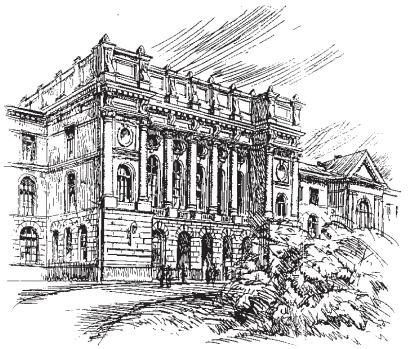
2(122)/2011



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. *Ренорм-групповой анализ основного состояния одномерной антиферромагнитной спин-1-цепочки* 7

Козловский В.В., Васильев А.Э., Емцев В.В., Оганесян Г.А., Колгатин С.Н. *Образование пар Френкеля в кремнии под действием электронов и протонов высоких энергий* 13

Вахрушев С.Б., Дамянович Д., Чернышев Д.Ю., Босак А.А., Кораблев-Дайсон М.А. *Фазовые переходы в перовските* $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$ *по данным дифракции синхротронного излучения* 21

Мелентьев Г.А., Шалыгин В.А., Винниченко М.Я., Софронов А.Н., Воробьев Л.Е., Фирсов Д.А. *Дальнее инфракрасное излучение горячих двумерных электронов в одиночном гетеропереходе AlGaN/GaN* 25

Бабичев А.В., Гасумянц В.Э., Бутко В.Ю. *Электронный транспорт в CVD-графене сантиметрового размера* 30

Комарова О.С., Мартынова О.А., Шорохов П.В., Гасумянц В.Э. *Модификация параметров энергетического спектра под действием легирования в системе* $Bi_2Sr_2CaCu_2O_y$ 34

Баграев Н.Т., Брилинская Е.С., Гец Д.С., Клячкин Л.Е., Маляренко А.М., Романов В.В. *Квантование характеристик продольного транспорта дырок в кремниевых наноструктурах* 41

Математическое моделирование физических процессов

Снегирёв А.Ю., Сажин С.С., Талалов В.А., Савин М.В. *Апробация модели теплообмена и испарения капель диспергированной жидкости* 48

Шейнман И.Я., Снегирёв А.Ю. *Математическое моделирование столкновений капель в газокапельной струе* 59

Григорьев П.Ю., Журкин Е.Е. *Моделирование распыления поверхности карбида кремния при бомбардировке ионами и кластерами* 67

Судаков И.А. *Динамика протаивания мерзлотных озер и изменения климата* 74

Приборы и техника физического эксперимента

Воробьев Л.Е., Софронов А.Н., Фирсов Д.А., Демидов Д.М., Леус Р.В., Свердлов М.А., Тер-Мартиросян А.Л. *Лазерные диоды для фотодинамической терапии* 80

Физическая электроника

Краснова Н.К. , Абрамёнок О.А. *Семейство полевых структур с плоскостью симметрии для электронной спектрографии* 85

Физическая оптика

Мокрушин Ю.М. *Дифракция света на ультразвуке вблизи оптической оси гиротропного кристалла* ... 93

Ядерная физика

Багаев К.А., Козловский С.С. *Применение компьютерного моделирования для калибровки детекторов в водной среде* 106

Бердников А.Я., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. *Подавление выхода короткоживущих нейтральных каонов в центральных столкновениях ядер золота при энергии 200 Гэв* 111

Бердников А.Я., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. *Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер меди при энергии 200 ГэВ* 116

Механика

Гиргидов А.Д. *О феноменологических градиентных зависимостях* 122

Соколов Е.И. *Оценка тяговой эффективности сопел микроракетных двигателей* 126

Рыбаков А.П., Вшивков О.Ю. *Удельный механический импульс ударной волны как физический параметр нагружения* 133

Фролов М.Е. *Реализация функционального подхода к апостериорному контролю точности решений трехмерных задач теории упругости* 137

Тихомиров В.В. *Трещина продольного сдвига, частично проникающая в упругое круговое включение с покрытием* 142

Астрофизика

Быков А.М., Владимиров А.Е., Красильщиков А.М., Павлов Г.Г. *Спектральная диагностика радиативных ударных волн в межзвездной среде* 150

Сведения об авторах, контактные данные 158

Аннотации, ключевые слова 163

Contents

Condensed matter physics

Orlenko F.E., Zegrya G.G. *The renormalization-group analysis of the ground state of the spin-antiferromagnetic chain* 7

Kozlovski V.V., Vasil'ev A.E., Emtsev V.V., Oganesjan G.A., Kolgatin S.N. *The Frenkel pairs formation in the silicon under high energy electron and proton irradiation* 13

Vakhrushev S.B., Damjanovic D., Chernyshev D.Yu., Bosak A.A., Korablev-Dyson M.A. *Phase transitions in $Li_{0.02}(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.98}NbO_3$ perovskite determined by powder diffraction of synchrotron radiation* 21

Melentyev G.A., Shalygin V.A., Vinnichenko M.Ya. , Sofronov A.N. , Vorobjev L.E. , Firsov D.A. *Far-infrared radiation emission by hot two-dimensional electrons in single GaN/AlGaN heterojunction* 25

Babichev A.V, Gasumyants V.E, Butko V.Y. *Electron transport in CVD-grown graphene of centimeter size* 30

Komarova O.S., Martynova O.A., Shorokhov P.V., Gasumyants V.E. *Modification of the energy spectrum parameters under doping in the $Bi_2Sr_2CaCu_2O_y$ system* 34

Bagraev N.T., Brilinskaya E.S., Gets D.S., Klyachkin L.E., Malyarenko A.M., Romanov V.V. *Longitudinal quantum transport of holes in silicon nanostructures* 41

Simulation of physical processes

Snegirev A.Yu., Sazhin S.S., Talalov V.A., Savin M.V. *Validation study of the model to predict heating and vaporization of a liquid droplet* 48

Sheinman I.Ya., Snegirev A.Yu. *Simulation of droplets collisions in gas-drop jet* 59

Grigoriev P.Yu., Zhurkin E.E. *Simulation of sputtering of the silicon carbide surface under bombardment by ions and clusters* 67

Sudakov I.A. *The dynamics of permafrost lakes thawing and climate changing* 74

Experimental technique and devices

Vorobjev L.E., Sofronov A.N., Firsov D.A., Demidov D.M., Leus R.V., Sverdlov M.A., Ter-Martirosyan A.L. *Laser diodes application to photodynamic therapy* 80

Physical electronics

Krasnova N.K., Abrameonok O.A. *A set of field structures with a symmetry plane for electron spectrography* 85

Physical optics

Mokrushin Yu.M. *The diffraction of light by ultrasonic waves near the optical axis of gyrotropic crystal* 93

Nuclear physics

Bagaev K.A., Kozlovsky S.S. *An application of computer simulation to detector calibration in the aqueous medium* 106

Berdnikov A.Ya, Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G., Samsonov V.M. *K_s-meson suppression in central Au + Au collisions at center-of-mass energy of 200 GeV per nucleon pair* 111

Berdnikov A.Ya., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G., Samsonov V.M. *K_s-meson production in Cu+Cu collisions at center-of-mass energy of 200 GeV per nucleon pair* 116

Mechanics

Girgidov A.D. *On phenomenological gradient dependences* 122

Sokolov E.I. *Evaluation of thrust effectiveness for nozzles of rocket microthrusters* 126

Rybakov A.P., Vshivkov O.Y. *Specific mechanical momentum of shock wave as a physical parameter of loading* 133

Frolov M.E. *An implementation of the functional approach to a posteriori error control of solutions in 3D elasticity* 137

Tikhomirov V.V. *An antiplane crack partially penetrating an elastic circular inclusion with coating* 142

Astrophysics

Bykov A.M., Vladimirov A.E., Krassilchtchikov A.M., Pavlov G.G. *Spectral diagnostics of the interstellar radiative shocks* 150

About the authors, contact information 158

Abstracts, key words 168

УДК 539.1 (075.8)

Ф.Е. Орленко, Г.Г. Зегря

РЕНОРМ-ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ СПИН-1-ЦЕПОЧКИ

Интерес к одномерным цепочкам ионов со спинами $s = 1$ возник давно, начиная с известных работ Ф.Д.М. Халдане [1, 2], в которых высказано предположение о том, что полный спин всей цепочки проявляет себя в основном состоянии как экспоненциально спадающая спин-спиновая корреляция и сопровождается появлением щели в спектре возбуждений. Это так называемое «предположение Халдане» сегодня получило надежные подтверждения в многочисленных экспериментах. Одноионная анизотропия с соответствующим проявлением магнитных свойств существует во многих соединениях, например в $CsNiCl_3$ (слабая аксиальная анизотропия); $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ (NENP) (слабая аксиальная анизотропия); $CsFeBr_3$, $Ni(C_2H_8N_2)_2Ni(CN)_4$ (NENC) и $NiCl_2$-$4SC(NH_2)_2$ (DTN) (сильная планарная анизотропия) [3]. Интерес к фазам Халдане, проявляющим линейную корреляцию дальнего порядка, проявился в работах [4–7], посвященных холодным атомным системам, в которых также исследуется линейный порядок. В работе Б. Матисова, Е. Орленко и И. Мазеца [7] показано, что свободный коэффициент β в гамильтониане, описывающем магнитное состояние спин-1-бозе-газа, может принимать только одно единственное значение $\beta = 1$. В работе [8] показано, что система частиц с произвольным, отличным от 1/2, спином может быть описана в спиновом представлении непосредственно, исходя из первых принципов [9], и в рассматриваемой цепочке могут распространяться и нелинейные волны, имеющие форму солитона (Dark-Bright-soliton[10]). Это происходит потому, что спиновый гамильтониан содержит биквадратные члены от скалярного произведения спиновых операторов частиц.

В настоящей работе были внесены существенные добавления в выражения для основного состояния антиферромагнитной спин-1-цепочки по сравнению с выражениями в работах [8, 11], связанные с последовательным использованием метода ренорм-групп [12]. Показано, что линейные возбуждения системы спинов с $s = 1$ в форме спиновых волн имеют иную, чем у антиферромагнетиков с половинным спином, дисперсионную зависимость частоты от волнового вектора, которая больше напоминает k-квадратную зависимость (имеет место у ферромагнетиков с половинными спинами). Однако в отличие от последних, спектр возбуждений антиферромагнитной спин-1-цепочки отделен энергетической щелью, предсказанной еще в работах Халдане.

Основное состояние антиферромагнитной цепочки

Гамильтониан всей цепочки спинов, в отличие от гамильтониана Гейзенберга, содержит биквадратный член от скалярного произведения операторов спина и имеет противоположный знак перед константой обменного взаимодействия [8, 9]:

$$\hat{H}_{int} = \sum_i \left[K_{i,i+1} + A_{i,i+1} \left\{ \left(\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_{i+1} \right)^2 + \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_{i+1} - 1 \right\} \right]. \quad (1)$$

Здесь $\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}_{i+1}$ — операторы спинов i-й и $(i + 1)$-й частиц; в нашем случае величины $s_i = s_{i+1} = 1$.

Такой вид гамильтониана обусловливает появление нелинейных решений для возбужденных состояний. Его можно переписать в форме, где операторы скалярных произведений спинов соседних ионов заменены операторами квадрата

суммарного спина этой же пары. Обменный вклад в энергию от каждой пары $E^{exc}_{i,i+1}$ запишется в виде

$$E^{exc}_{i,i+1} = A_{i,i+1}\left\{\left(\frac{1}{2}\big(S(S+1)-2s(s+1)\big)\right)^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\big(S(S+1)-2s(s+1)\big)-1\right\}. \qquad (2)$$

Будем считать величину суммарного спина пары плавно меняющейся переменной, тогда удобно перейти к новой, непрерывно меняющейся переменной x так, что

$$x = \frac{1}{2}\big(S(S+1)-2s(s+1)\big), \qquad (3)$$

где S — величина суммарного спина пары, а переменная x находится в интервале $[-2, 1]$.

Тогда выражение для обменной энергии пары может быть записано как функция x:

$$E^{exc}_{i,i+1}(x) = A_{i,i+1}(x^2 + x - 1). \qquad (4)$$

Функция $E^{exc}_{i,i+1}(x)$ имеет минимум в точке $x = 0{,}5$, которая отвечала бы спину пары $S = 1{,}3$, лежащему близко к физически реальному значению $S = 1$ (оно соответствует антисимметричному состоянию для каждой пары спинов).

Тогда полный гамильтониан обменного взаимодействия (1) цепочки спинов можно представить в виде ряда

$$\hat{H}_{int} \approx K\frac{N}{2} + \sum_{i=1,N/2} A_{i,i+1}\langle \bullet_i \bullet_{i+1}\rangle +$$

$$+ \sum_{q=1,N/4} A^{(1)}_{q,q+1}\left\langle \langle \bullet\bullet\rangle_q \langle \bullet\bullet\rangle_{q+1}\right\rangle + \ldots, \qquad (5)$$

где символически обозначены операторы обменного взаимодействия пары соседних ионов

$$A_{i,i+1}\langle \bullet_i \bullet_{i+1}\rangle = \mathrm{A}_{i,i+1}\left\{\left(\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_{i+1}\right)^2 + \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}}_{i+1} - 1\right\}$$

двух пар —

$$A^{(1)}_{q,q+1}\left\langle \langle \bullet\bullet\rangle_q \langle \bullet\bullet\rangle_{q+1}\right\rangle =$$

$$= A^{(1)}_{q,q+1}\left\{\left(\hat{\mathbf{s}}_q \cdot \hat{\mathbf{s}}_{q+1}\right)^2 + \hat{\mathbf{s}}_q \cdot \hat{\mathbf{s}}_{q+1} - 1\right\}$$

с перенормированной константой $A^{(1)}_{q,q+1}$ обменного взаимодействия и суммарными спинами пары $\hat{\mathbf{s}}_{q=\frac{i+1}{2}} = \hat{\mathbf{s}}_i + \hat{\mathbf{s}}_{i+1}$ и $\hat{\mathbf{s}}_{q+1=\frac{i+3}{2}} = \hat{\mathbf{s}}_{i+2} + \hat{\mathbf{s}}_{i+3}$ и т. д.

Энергия основного состояния находится методом последовательных приближений с учетом блочной структуры гамильтониана. При этом наиболее низким состоянием, соответствующим минимальной энергии в паре блоков, является антисимметричное с суммарным спином пары $S = 1$. Таким образом, значение суммарного спина Σ всей цепочки, состоящей из N ионов, будет равно единице, что соответствует удельной намагниченности системы, приходящейся на одну частицу $M / N = \frac{g\Sigma}{N} \to 0$, и относится к антиферромагнитному. Полная энергия при этом будет иметь следующий вид:

$$E_{int} \approx K\frac{N}{2} + \frac{N}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\left(A^{(0)} + \frac{A^{(1)}}{2} + \ldots + \frac{A^{(\nu)}}{2^{\nu}}\right). \qquad (6)$$

Полагаем, что константа обменного взаимодействия $A^{(k)}$ при каждом последующем шаге k перенормировки связана с константой $A^{(k-l)}$ предыдущего шага $k-1$ как

$$A^{(k)} \approx A^{(k-1)}\xi, \qquad (7)$$

где ξ — постоянная ренормализации.

Тогда энергия основного состояния антиферромагнитной цепочки бесконечной длины, приходящаяся на один ион, будет стремиться к значению

$$\frac{E_{int}}{N} \approx \frac{K}{2} + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)\sum_{\nu}\frac{A^{(\nu)}}{2^{\nu}} = \frac{1}{2}\left(K - A^{(0)}\sum_{\nu}\frac{\xi^{\nu}}{2^{\nu}}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}K - A^{(0)}\frac{1}{2-\xi}. \qquad (8)$$

Таким образом, обменное взаимодействие в цепочке обеспечивает эффект дальнего порядка при выполнении условия $\xi \to 2$ и приводит к установлению антиферромагнитного состояния.

Спиновый вектор основного состояния антиферромагнитной цепочки может быть получен в явном виде. Антисимметричные спиновые состояния для системы 2^{ν} частиц могут быть записаны в виде

$$\left|\mathrm{A}\right\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix}\left|\mathrm{A}\right\rangle^{(\nu-1)} & \left|\mathrm{A}\right\rangle^{(\nu-1)} \\ \left|\mathrm{B}\right\rangle^{(\nu-1)} & \left|\mathrm{B}\right\rangle^{(\nu-1)}\end{bmatrix};$$

$$|\mathrm{B}\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\mathrm{A}\rangle^{(\nu-1)} & |\mathrm{A}\rangle^{(\nu-1)} \\ |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix};$$

$$|\Gamma\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \\ |\mathrm{B}\rangle^{(\nu-1)} & |\mathrm{B}\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix}, \qquad (9)$$

где векторы $|\mathrm{A}\rangle$, $|\mathrm{B}\rangle$, $|\Gamma\rangle$ соответствуют состояниям системы 2^{ν} частиц с полным спином $\Sigma = 1$ и соответствующими проекциями полного спина 1, 0, -1; верхний индекс ν над этими векторами означает номер итерации при укрупнении системы.

Коэффициент ренормализации

Следуя методу ренорм-групп [12], запишем статистическую сумму в виде

$$Z = \sum_{\sigma_{1,2}=0}^{2}\sum_{\sigma_{3,4}=0}^{2}\ldots\sum_{\sigma_{N-1,N}=0}^{2}\exp\left(-\frac{A}{T}P(\overline{\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2})\right)\times$$

$$\times\exp\left(-\frac{A}{T}P(\overline{\hat{\mathbf{s}}_3\cdot\hat{\mathbf{s}}_4})\right)\ldots\exp\left(-\frac{A}{T}P(\overline{\hat{\mathbf{s}}_{N-1}\cdot\hat{\mathbf{s}}_N})\right) =$$

$$= \sum_{\sigma_{1,2}+\sigma_{3,4}}\sum_{\sigma_{5,6}+\sigma_{7,8}}\ldots\sum f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\times$$

$$\times\exp\left(-\frac{A^{(1)}}{T}P(\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}})\right)\times$$

$$\times f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\exp\left(-\frac{A^{(1)}}{T}P(\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{5,6}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{7,8}})\right)\ldots, \qquad (10)$$

где $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}$ — операторы векторов суммарных спинов пар частиц 1, 2 и 3, 4 соответственно; функция $f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)$ не должна зависеть от значений спинов $\sigma_{1,2}$ и $\sigma_{3,4}$.

Условие

$$\exp\left(-\frac{A}{T}\left(P(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2)+P(\hat{\mathbf{s}}_3\cdot\hat{\mathbf{s}}_4)\right)\right) =$$

$$= f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\exp\left(-\frac{A^{(1)}}{T}\left(\mathrm{P}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})\right)\right) \qquad (11)$$

должно выполняться при всех возможных значениях $\sigma_{3,4}$. Собственные значения операторов $P(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2)$, как было показано выше, составляют $\bar{P}(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2)|_{\sigma_{1,2}=1} = -1$, $\bar{P}(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2)|_{\sigma_{1,2}=0} = \bar{P}(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2)|_{\sigma_{1,2}=2} = 1$.

Тогда условие (11) можно переписать для различных спиновых конфигураций.

1. Пусть $\sigma_{1,2} = \sigma_{3,4} = 1$; тогда

$$\left(e^{\frac{A}{T}(1+1)}\right) = f\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)\left(e^{\frac{A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{-A^{(1)}}{T}}\right). \qquad (12)$$

2. Пусть $\sigma_{1,2} \neq \sigma_{3,4}$; тогда возможны два варианта:

а) $\sigma_{1,2} = 1$, $\sigma_{3,4} = 0$, $\Rightarrow \sigma_{1,2,3,4} = 1$, $\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}} = 0$, $\overline{P(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})} = -1$;

б) $\sigma_{1,2} = 1, \sigma_{3,4} = 2, \Rightarrow \sigma_{1,2,3,4} = 1, 2, 3$; $\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}} = -3, -1, 2$; $\overline{P(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})} = 5, -1, 5$ (см. таблицу).

Собственные значения оператора перестановки для различных значений суммарного спина

$\sigma_{1,2,3,4}$	$\overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4}}$	$\overline{P(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{3,4})}$
1	-3	5
2	-1	-1
3	2	5

Просуммировав выражения а) и б), получим условие (11) в виде

$$2 = f\left(A^{(1)}/T\right)\left(e^{\frac{-5A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{-5A^{(1)}}{T}} + e^{\frac{A^{(1)}}{T}}\right) =$$

$$= 4f\left(A^{(1)}/T\right)\mathrm{ch}\left(3\frac{A}{T}\right)e^{\frac{-2A^{(1)}}{T}}. \qquad (13)$$

Таким образом, имеем систему уравнений (12) и (13). Из уравнения (13) находим функцию

$$f\left(A^{(1)}/T\right) = \frac{e^{\frac{2A^{(1)}}{T}}}{2\mathrm{ch}\left(3\frac{A^{(1)}}{T}\right)}$$

и получаем уравнение для нахождения коэффициента ренормализации:

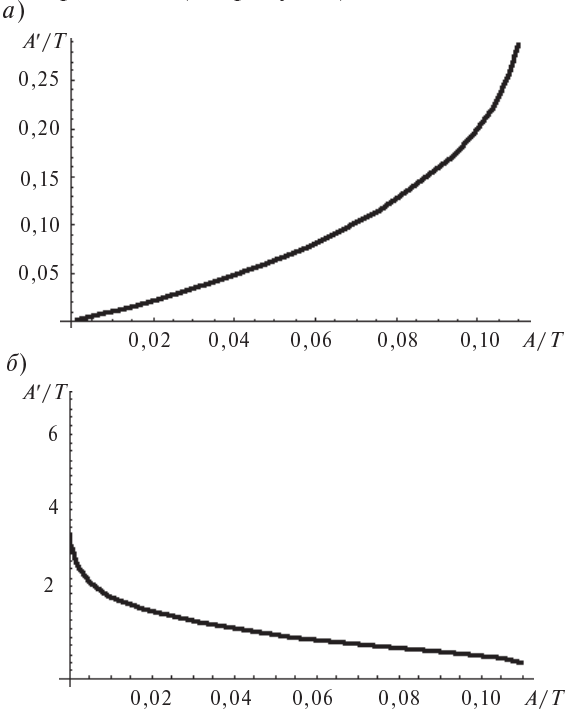
$$2\mathrm{ch}\left(\frac{2A}{T}\right)=\frac{2\mathrm{ch}\left(\dfrac{A^{(1)}}{T}\right)}{2\mathrm{ch}\left(3\dfrac{A^{(1)}}{T}\right)}e^{\frac{2A^{(1)}}{T}}. \qquad (14)$$

Решение уравнения (14) дает следующее соотношение «старой» и «новой» констант связи:

$$\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)=x'=\frac{1}{2}\ln\left\{\frac{1\pm\sqrt{1-4(e^{2x}-1)}}{2(e^{2x}-1)}\right\}; \qquad (15)$$

$$x=\frac{A}{T}.$$

В пределах области существования решений $x=\dfrac{A}{T}\in[0,\ln(5/4)/2]$ и соответствующей ей области значений $x'=\dfrac{A^{(1)}}{T}\in[0,\ln(2)/2]$ имеем два вида решений (см. рисунок):



Решения уравнения (14) — зависимости перенормированной константы обменного взаимодействия от исходной (с учетом температуры): истинное (*а*) и ложное (*б*) решения

$$\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)_1=x'_1=\frac{1}{2}\ln\left\{\frac{1-\sqrt{1-4(e^{2x}-1)}}{2(e^{2x}-1)}\right\};$$

$$\left(\frac{A^{(1)}}{T}\right)_2=x'_2=\frac{1}{2}\ln\left\{\frac{1+\sqrt{1-4(e^{2x}-1)}}{2(e^{2x}-1)}\right\}.$$

Второе решение должно быть отброшено, поскольку означало бы наличие бесконечно больших корреляций в пределе высоких температур ($x\to 0$). Для предельно допустимых значений x и x' коэффициент ренормализации может достигать значения

$$\xi=A^{(1)}/A=x'/x=\ln 2/\ln(5/4)\approx 3{,}1.$$

Из анализа рисунка видно, что при определенной температуре ($T^*\approx\dfrac{A}{0{,}075k_{\mathrm{B}}}$, где k_{B} — константа Больцмана) коэффициент ренормализации стремится к двум ($\xi\to 2$), что в соответствии с формулой (8) означает переход в антиферромагнитное состояние с возникновением дальнего порядка.

Спиновые волны в спин-1- цепочке

Основное состояние этой системы — антиферромагнитное; тогда в приближении взаимодействия с ближайшими соседями будем считать, что спин пары атомов $S=1$ и собственное значение оператора $\hat{\mathbf{s}}_i\cdot\hat{\mathbf{s}}_{i+1}$ равно $\overline{\hat{\mathbf{s}}_i\cdot\hat{\mathbf{s}}_{i+1}}=-1$.

Пусть один спин под номером k из цепочки атомов переброшен. Тогда оператор энергии возбуждения можно записать в виде

$$\hat{V}=\hat{H}_{int}-E_0=$$

$$=A\left\{\hat{\mathbf{s}}_{k-1}\hat{\mathbf{s}}_k+\hat{\mathbf{s}}_k\hat{\mathbf{s}}_{k+1}+(\hat{\mathbf{s}}_{k-1}\hat{\mathbf{s}}_k)^2+\right.$$

$$\left.+(\hat{\mathbf{s}}_k\hat{\mathbf{s}}_{k+1})^2-2\left((-1)\hat{\mathbf{s}}_k^2+(-1)^2\hat{\mathbf{s}}_k^4\right)\right\}, \qquad (16)$$

где $E_0=A\sum_i((-1)^2s_i^4+(-1)s_i^2-1)$ соответствует энергии основного состояния в нулевом (парном) приближении.

В полуклассическом континуальном приближении собственные значения механических моментов ионов могут быть представлены в виде непрерывной функции расстояния от иона. Тогда вектор спина узла $k\pm 1$ может быть записан в виде

$$\mathbf{s}_{k\pm1} = \mathbf{s}_k \pm \beta \frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial x} + \frac{\beta^2}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}. \qquad (17)$$

В этом выражении β — постоянная решетки. После подстановки выражения (17) в (16) в полуклассическом приближении, с учетом замены операторов спина на их векторные функции, получим для энергии возбуждения V выражение

$$V = 2A\left\{\mathbf{s}_k^2\left(2+\beta^2\left(\frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial x}\right)^2+\frac{\beta^4}{4}\left(\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right)^2\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{\beta^2}{2}\left(1+2\mathbf{s}_k^2\right)\mathbf{s}_k\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right\}. \qquad (18)$$

С другой стороны, в приближении среднего эффективного поля $\mathbf{H}^*$, образованного всей совокупностью магнитных моментов переброшенных спинов, энергия возбуждения будет записываться как энергия взаимодействия каждого собственного магнитного момента с этим полем:

$$V = -g\,\mathbf{s}_k \cdot \mathbf{H}^*, \qquad (19)$$

где g — фактор Ланде, умноженный на магнетон Бора.

Тогда в соответствии с теоремой Блоха собственный магнитный момент каждого иона будет прецессировать в эффективном магнитном поле как

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \gamma(\mathbf{H}^* \times \mathbf{m});$$

$$\gamma = \frac{e}{Mc}; \qquad (20)$$

тогда как явное выражение для напряженности поля имеет следующий вид:

$$\mathbf{H}^* = \frac{-A}{g}\left\{\mathbf{s}_k\left(2+\beta^2\left(\frac{\partial \mathbf{s}_k}{\partial x}\right)^2+\frac{\beta^4}{4}\left(\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right)^2\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{\beta^2}{2}\left(1+2\mathbf{s}_k^2\right)\cdot\frac{\partial^2 \mathbf{s}_k}{\partial x^2}\right\}. \qquad (21)$$

Распишем (20) для каждой компоненты вектора магнитного момента $\mathbf{m} = g\mathbf{s}$ и учтем очевидное равенство $\mathbf{s}\times\mathbf{s} = 0$; тогда можно переписать (17) в линейном приближении для циклических координат:

$$\dot{m}^+ = \frac{\gamma A s}{g} i\left\{-2m^+ + \frac{\beta^2}{2}(1+2s(s+1))\frac{\partial^2 m^+}{\partial x^2}\right\}.$$

Тогда, если искать решение для m^+ в виде монохроматической волны, то получим дисперсионное соотношение для спиновых волн в антиферромагнетике ($s = 1$), отличное от известного [11]:

$$\omega = \frac{\gamma A s}{g}\left\{-2+\frac{5}{2}\beta^2 k^2\right\}. \qquad (22)$$

Таким образом, при малых отклонениях от равновесного антиферромагнитного состояния по системе целых спинов ($s = 1$) будут распространяться спиновые возбуждения в виде поперечных спиновых волн с дисперсионной зависимостью, напоминающей дисперсионное соотношение для спиновых волн в ферромагнетике ($s = 1/2$). Однако из соотношения (22) видно, что спектр линейных возбуждений отделен от основного состояния энергетической щелью

$$\Delta = \hbar\omega = 2\frac{\hbar\gamma A s}{g},$$

что можно связать с существованием минимального предельного значения для волнового вектора $k_{\min} = \sqrt{\frac{4}{5\beta^2}}$ и соответствующим ограничением на максимальную длину волны.

В заключение можно сделать вывод, что антиферромагнитное состояние цепочки ионов со спинами, равными единице, формируется на основании того обстоятельства, что при парном взаимодействии наиболее выгодным состоянием является антисимметричное с суммарным спином ближайших соседей $S = 1$. При взаимодействии ближайших блоков, составленных из двух частиц каждый, наиболее выгодным будет также антисимметричное состояние с суммарным спином, равным единице. Таким образом, на ν-й итерации укрупнения при взаимодействии двух кластеров, состоящих из $2^{\nu-1}$ каждый, формируется кластер, содержащий 2^ν частиц, для которого антисимметричное состояние с суммарным спином $\Sigma = 1$ кластера является

основным. Таким образом, намагниченность системы, помещенной в магнитное поле, будет определяться проекцией на направление поля именно этого суммарного спина ($\Sigma = 1$), так что удельная намагниченность системы, приходящаяся на один ион, будет стремиться к нулю как

$$M / N = \frac{g\Sigma}{N} \to 0,$$

где g — гиромагнитный фактор иона. В системе устанавливается антиферромагнитный дальний порядок при температуре, приблизительно равной $T^* \approx \frac{A}{0,075 k_B}$. Линейные возбуждения системы с $s = 1$ в форме спиновых волн имеют иную, чем у антиферромагнетиков со спином 1/2, дисперсионную зависимость частоты от волнового вектора, которая больше напоминает k-квадратную зависимость, имеющую место у ферромагнетиков с половинными спинами. Однако, в отличие от последних, спектр возбуждений антиферромагнитной спин-1-цепочки отделен энергетической щелью, предсказанной в работах Ф.Д.М. Халдане.

Работа выполнена при финансовой поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы», при финансовой поддержке Комитета по науке и высшей школе Правительства Санкт-Петербурга (грант 2010 года для молодых ученых вузов и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга), гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук МК-5318.2010.2.

Приложение

ВЕКТОР ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Антисимметричные спиновые состояния для пары частиц известны и могут быть записаны в виде

$$|S=1, S_z=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2) = |\mathrm{A}\rangle^{(1)};$$

$$|S=1, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle_1|\gamma\rangle_2 - |\gamma\rangle_1|\alpha\rangle_2) = |\mathrm{B}\rangle^{(1)};$$

$$|S=1, S_z=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\gamma\rangle_1|\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1|\gamma\rangle_2) = |\Gamma\rangle^{(1)};$$

$$|\alpha\rangle_1 = |s_1 = 1, s_{1z} = 1\rangle_1;$$

$$|\beta\rangle_1 = |s_1 = 1, s_{1z} = 0\rangle_1;$$

$$|\gamma\rangle_1 = |s_1 = 1, s_{1z} = -1\rangle_1.$$

Здесь нижними индексами 1 и 2 обозначены номера частиц со спинами $s = 1$ и соответствующими проекциями. Векторы $|\mathrm{A}\rangle$, $|\mathrm{B}\rangle$, $|\Gamma\rangle$ соответствуют состояниям пары частиц с полным спином $S = 1$ и соответствующими проекциями полного спина; верхний индекс ν над этими векторами означает номер итерации и связан с $2^{\nu=1}$ числом частиц, составляющих полный спин. Составим антисимметричные спиновые состояния для цепочки из четырех ($2^{\nu=2}$) частиц, то есть во второй ($\nu = 2$) итерации:

$$|\mathrm{A}\rangle^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{1,2}|\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{3,4} - |\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{1,2}|\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{3,4}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{1,2} & |\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{3,4} \\ |\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{1,2} & |\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{3,4} \end{bmatrix};$$

$$|\mathrm{B}\rangle^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{1,2}|\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4} - |\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2}|\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{3,4}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{1,2} & |\mathrm{A}\rangle^{(1)}_{3,4} \\ |\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2} & |\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4} \end{bmatrix};$$

$$|\Gamma\rangle^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2}|\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{3,4} - |\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{1,2}|\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\Gamma\rangle^{(1)}_{1,2} & |\Gamma\rangle^{(1)}_{3,4} \\ |\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{1,2} & |\mathrm{B}\rangle^{(1)}_{3,4} \end{bmatrix}.$$

Продолжая таким образом укрупнять систему, на ν-й итерации, в которой учитывается состояние цепочки из 2^ν частиц, имеем для векторов спинового состояния выражения:

$$|\mathrm{A}\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\mathrm{A}\rangle^{(\nu-1)} & |\mathrm{A}\rangle^{(\nu-1)} \\ |\mathrm{B}\rangle^{(\nu-1)} & |\mathrm{B}\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix};$$

$$|\mathrm{B}\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\mathrm{A}\rangle^{(\nu-1)} & |\mathrm{A}\rangle^{(\nu-1)} \\ |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix};$$

$$|\Gamma\rangle^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\det\begin{bmatrix} |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} & |\Gamma\rangle^{(\nu-1)} \\ |\mathrm{B}\rangle^{(\nu-1)} & |\mathrm{B}\rangle^{(\nu-1)} \end{bmatrix}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

2. **Haldane, F.D.M.** Rigorous results on valence-bond ground state in antiferromagnets [Text] /F.D.M. Haldane // Phys. Lett.— 1983.— Vol. 93A.— P. 464–469.

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

4. **Ho, T-L.** Fragmented and single condensate ground states of spin-1 Bose gas [Text] / T.-L. Ho, L. Yip // Phys. Rev. Lett.— 2000.— Vol. 84.— No. 11.— P. 4031–4034.

5. **Ciobanu, C.V.** Phase diagrams of $F = 2$ spinor Bose — Einstein condensates [Text] / C.V. Ciobanu, S.K. Yip, T.-L. Ho // Phys. Rev. A.— 2000.— Vol. 61.— P. 1050–1056.

6. **Ho, T-L.** Bose — Einstein condensate in optical traps [Text] / T-L. Ho // Phys. Rev. Lett.— 1998.— Vol. 81.— P. 742–745.

7. **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.

8. **Orlenko, E.V.** Excitations for the one-dimensional $S = 1$ pseudo-Heisenberg antiferromagnetic chain [Text] / E.V. Orlenko, F.E. Orlenko, G.G. Zegrya // Natural Science.— 2010.— Vol. 2.— No. 11.— P. 1287–1291.

9. **Orlenko, E**. The universal Hamiltonian of the exchange interaction for the system of particles with arbitrary spin j [Text] / E. Orlenko// International Journal of Quantum Chemistry.—2007.— Vol. 107— P. 2838–2843.

10. **Манаков, С.В.** Об интегрируемости и стохастичности в дискретных динамических системах [Текст] / С.В. Манаков // ЖЭТФ.— 1974.— Т. 65.— С. 505–511.

11. **Лифшиц, Е.М.** Статистическая физика [Текст]: в 2 ч. Ч. 2 / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский.— М.: Наука, 1978.— 447 с.

12. **Maris, H.J.** Teaching of the renorm-group [Text] / H.J. Maris, L.P. Kadanoff // American Journal of Physics.— 1978.— Vol. 46.— P. 652–658.

УДК 621.38 + 539.1

В.В. Козловский, А.Э. Васильев,
В.В. Емцев, Г.А. Оганесян, С.Н. Колгатин

ОБРАЗОВАНИЕ ПАР ФРЕНКЕЛЯ В КРЕМНИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРОТОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Как известно, радиационное дефектообразование сопровождается появлением в запрещенной зоне полупроводника локальных энергетических уровней. Радиационные дефекты (РД) в основном являются либо центрами компенсации («ловушками» носителей заряда), либо центрами рекомбинации неравновесных носителей заряда [1]. Поэтому облучение может в широких пределах изменять характеристики полупроводников (концентрацию, подвижность и время жизни носителей заряда) и свойства полупроводниковых приборов [2].

Процесс радиационного дефектообразования имеет две стадии: генерацию первичных точечных дефектов вакансия-междоузельный атом (пара Френкеля (ПФ)) и формирование вторичных дефектов. Генерация РД осуществляется за счет двух процессов. Во-первых, происходит смещение атомов кристаллической решетки в результате непосредственного взаимодействия с налетающей частицей — образуются так называемые первично выбитые атомы (ПВА). Во-вторых, смещения осуществляются этими ПВА, получившими от бомбардирующих частиц достаточную энергию — образуется каскад смещений. Вторая стадия — формирование вторичных РД. На ней происходит взаимодействие первичных РД между собой, с дефектами и примесями, существующими в полупроводнике; в результате формируются стабильные в данных условиях

вторичные РД, которые в дальнейшем и определяют изменения свойств материалов и приборов.

В настоящей работе анализировались два вида облучения, используемые для моделирования радиационных поясов Земли (поясов Ван Аллена — Вернова [3]) и отличающиеся по параметрам радиационного дефектообразования: электроны с энергией 1 МэВ и протоны с энергией 8 МэВ.

Генерация первичных радиационных дефектов

Электронное облучение. Рассеяние, имеющее место при столкновениях, приводящих к смещениям, главным образом связано с кулоновским взаимодействием электрона с ядром мишени, но нерелятивистские законы рассеяния Резерфорда в данном случае неприменимы, поскольку электрон с энергией $E_e = 1$ МэВ имеет скорость, близкую к скорости света ($V = 0{,}945\ c$). Релятивистское кулоновское рассеяние электронов было аналитически рассмотрено Моттом [4], а также Мак-Кинли и Фешбахом [5]. Полученные ими общие формулы для энергетической зависимости сечения образования смещений являются достаточно сложными. Они показывают, что сечение по мере увеличения энергии бомбардирующих электронов постепенно возрастает от нуля при некой граничной энергии электронов (при облучении кремния граничная энергия $E_{\text{гр}} = 250$ кэВ) и затем становится постоянным. Поскольку выбранная нами энергия 1 МэВ значительно превосходит граничную, то сечение рассеяния (в барнах) можно оценивать по упрощенной формуле Мак-Кинли — Фешбаха:

$$\sigma_d = (1/4\pi\varepsilon_0)^2(2\pi Z^2 e^4 / E_d M c^2) = \\ = 140 Z^2 / A E_d, \qquad (1)$$

где c — скорость света, e — заряд электрона; M, A, Z — масса, массовое число и заряд атома мишени; E_d, эВ — пороговая энергия смещения атома из узла решетки кремния.

В настоящей работе для E_d было принято значение 25 эВ, наиболее часто используемое в литературе [6]. При такой пороговой энергии сечение образования РД по формуле (1) составляет около 40 барн.

Оценим среднюю энергию $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$, которую получают ПВА кремния при столкновении с релятивистским электроном. Количество атомов, первично выбитых релятивистским электроном из своих равновесных положений, как и в случае бомбардировки атомными частицами, распределяется приблизительно по закону обратного квадрата энергии. В этом случае для вычисления средней энергии, которую получают атомы полупроводника при столкновении с релятивистским электроном, применима формула, полученная для упругого резерфордовского рассеяния [7]:

$$\langle E_{\text{ПВА}} \rangle = \left[E_d E_{\max} / \left(E_{\max} - E_d \right) \right] \times \\ \times \ln\left(E_{\max} / E_d \right), \qquad (2)$$

где $E_{\max}$, МэВ — максимальная энергия, переданная атому кремния релятивистским электроном;

$$E_{\max} = 2E_e \left(E_e + 2m_e c^2 \right) / Mc^2 = \\ = E_e \left(E_e + 1{,}022 \right) / \left(469\ A \right) \qquad (3)$$

(m_e — масса покоя электрона).

При энергии $E_{\max}$, равной E_d, формула (3) определяет граничную энергию электрона $E_{\text{гр}}$, выше которой начинают генерироваться ПФ.

В табл. 1 приведены значения средней и максимальной энергий атомов отдачи кремния в зависимости от энергии бомбардирующих электронов. Видно, что при облучении электронами с энергией 1 МэВ, используемой в настоящей работе, $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ составляет около 55 эВ, что сопоставимо с энергетическим порогом дефектообразования E_d. Таким образом, энергии электрона 1 МэВ достаточно для образования только одиночных пар вакансия-междоузельный атом (ПФ). В радиационной физике твердого тела такой вид облучения часто называют модельным. С ростом энергии электронов увеличивается среднее число смещенных атомов кремния ν, приходящихся на каждый ПВА; в это число включают обычно и сам ПВА. В табл.1 представлены значения ν (называемые также коэффициентами размножения), оцененные по формуле Кинчина — Пиза [8], модифицированной Зиглером [9]:

$$\nu = \langle E_{\text{ПВА}} \rangle / 2{,}5E_d \\ \text{при } 2{,}5E_d < \langle E_{\text{ПВА}} \rangle < E_i, \qquad (4)$$

где E_i — пороговая энергия ионизации атома (равна 7,15 кэВ для кремния).

Заметим, что формула (4) выведена в предположении, что зависимость вероятности W сме-

щения атома из узла кристаллической решетки от полученной энергии E имеет вид ступенчатой функции: $W = 0$ при $E < E_d$; $W = 1$ при $E \geq E_d$.

Из формул (1) и (2) видно, что с ростом энергии электронов сечение образования дефектов не меняется, однако растет величина $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ и, следовательно, — величина ν. Так, для электронов с энергией 4 МэВ $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle = 105$ эВ, $\nu \approx 1{,}7$.

Концентрация смещенных атомов (ПФ) при облучении дозой Ф рассчитывается по формуле

$$N_d = N_0 \sigma_d \nu \Phi, \qquad (5)$$

где N_0 — концентрация атомов кремния.

Удобнее пользоваться величиной темпа генерации ПФ η_{FP}, вводимой как отношение N_d к дозе облучения Ф. Тогда

$$\eta_{FP} = N_0 \sigma_d \nu. \qquad (6)$$

Поскольку, как рассчитано выше для электронов с энергией 1 МэВ, $\sigma_d = 40$ б и $\nu = 1$, темп генерации ПФ согласно формуле (6) будет составлять 2 $см^{-1}$ (см. табл. 1, где представлены значения η_{FP}). Отметим, что данный результат нельзя трактовать формулировкой «каждый электрон создает две пары Френкеля», предполагающей, что электрон пробегает в кремнии расстояние 1 см, не теряя при этом энергии. Реально пробег электронов с энергией 1 МэВ в кремнии составляет около 1,75 мм [10], причем темп генерации ПФ уменьшается по мере торможения электронов; так что среднее количество дефектов, создаваемых одним электроном в слое полного поглощения, не превышает значения 0,3. Для «тонких» образцов количество дефектов, создаваемых одним электроном, определяется как простое произведение темпа генерации ПФ на толщину образца ($\eta_{FP} \cdot d$) и составляет для стандартной толщины $d = 250$ мкм величину, равную 0,05.

В связи с тем, что толщина используемых в промышленности пластин кремния, как правило, не превышает 1 мм, а тормозные потери энергии электронов в кремнии составляют примерно 0,4 кэВ/мкм [10], электроны с энергией 1 МэВ проходят через всю пластину (облучение «на прострел»), замедляясь на выходе до энергии около 0,6 МэВ. При таком замедлении электронов сечение образования РД начинает уменьшаться и перестает подчиняться упрощенной формуле (1).

Протонное облучение. Для удобства сравнения с электронным мы будем для протонного об-

Таблица 1

Зависимость основных энергетических параметров атомов отдачи кремния и темпа генерации пар Френкеля от энергии бомбардирующих электронов E_e

E_e, МэВ	E_{max}	$\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$	ν	η_{FP}, $см^{-1}$
	эВ			
1,0	154	55	1,0	2,0
2,0	460	76	1,2	2,4
2,5	666	86	1,4	2,8
4,0	1530	105	1,7	3,4
8,0	5496	135	2,2	4,4

Обозначения: E_{max}, $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ — максимальная и средняя энергия ПВА.

Примечание: $\nu = \langle E_{\text{ПВА}} \rangle / 2{,}5\ E_d$, где E_d — пороговая энергия смещения атома; $E_d = 25$ эВ.

лучения также использовать аналитические оценки, не прибегая к более точным, но менее наглядным численным решениям с помощью метода Монте-Карло. Используемые в настоящей работе протоны с энергией $E_p = 8$ МэВ в первом приближении можно считать нерелятивистскими, поскольку их скорость почти на порядок меньше скорости света ($V = 0{,}13\ c$). Смещение атома решетки происходит при прямом рассеянии протона на ядре этого атома. Такое кулоновское рассеяние для нерелятивистского случая было подробно рассмотрено Э. Резерфордом. Дифференциальное сечение резерфордовского рассеяния с передачей атому отдачи энергии T записывается в виде [12]:

$$d\sigma_d = (1/4\pi\varepsilon_0)^2 (\pi Z^2 e^4 m_p\, dT / E_p M T^2), \qquad (7)$$

где m_p — масса протона.

Проинтегрировав это выражение в пределах от E_d до E_{max}, получим сечение образования ПФ:

$$\sigma_d = (1/4\pi\varepsilon_0)^2 \pi [Ze^2 (m_p + M)/2ME_p]^2 \times \times [(E_{max}/E_d) - 1)], \qquad (8)$$

где в нерелятивистском случае E_{max} из формулы (3) упрощается:

$$E_{max} = 4m_p ME_p / (m_p + M)^2 = 4AE_p/(1 + A)^2. \qquad (9)$$

При облучении протонами кремния с энергией 8 МэВ $E_{max} = 1{,}07$ МэВ.

Если $E_{max} >> E_d$, то формула (8) значительно упрощается:

$$\sigma_d = (1/4\pi\varepsilon_0)^2 \pi [Z^2 e^4 m_p / ME_p E_d] =$$

$$= 2{,}6\cdot 10^{11} Z^2/[4AE_p E_d)]. \qquad (10)$$

Значение σ_d получается в барнах, если E_p и E_d измерены в электрон-вольтах.

Отметим, что если дифференциальное сечение рассеяния (7) зависит от свойств матрицы только через зарядовое число и массу атома матрицы, то интегральное сечение рассеяния (сечение дефектообразования) (10) сильно зависит еще и от пороговой энергии образования дефекта в данном материале. Так, при $E_d = 25$ эВ сечение образования РД в кремнии протонами с энергией 8 МэВ по формуле (10) составляет приблизительно 2300 барн.

Сравнивая формулы (1) и (10) для образования РД при протонном и электронном облучении, видим, что отношение сечений выражается как

$$\sigma_p / \sigma_e = m_p c^2 / 2E_p = 938/2\ E_p\ (\text{МэВ}). \qquad (11)$$

Полученное выражение позволяет оценить, что сечение дефектообразования на протонах с энергией 8 МэВ примерно в 60 раз больше, чем на электронах с энергией 1 МэВ.

Оценим среднюю энергию $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$, которую получают ПВА кремния при столкновении с протоном. Здесь также применима формула (2), однако, поскольку при протонном облучении $E_{\max} >> E_d$, то выражение (2) упрощается:

$$\langle E_{\text{ПВА}} \rangle = E_d \ln\left(E_{\max} / E_d\right). \qquad (12)$$

В табл. 2 приведены значения средней и максимальной энергии атомов отдачи кремния в зависимости от энергии бомбардирующих протонов. Там же и на рис. 1 представлены также сечения образования и темпы генерации РД. Как видно из табл. 2, при облучении протонами с энергией 8 МэВ, используемой в настоящей работе, $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ и ν составляют 267 эВ и 4,3 соответственно. Таким образом каждый ПВА создает в среднем еще около 3,3 ПФ. Значит приблизительно 25 % ПФ рождается в первичных соударениях протонов с атомами кремния, и 75 % — в каскадах соударений, вызванных ПВА. Темп генерации ПФ при таком облучении согласно формуле (6) составит 490 см$^{-1}$. Отметим, что темп генерации ПФ при $E_p = 8$ МэВ превосходит аналогичный параметр при электронном облучении почти в 250 раз, хотя, как отмечалось выше, отношение сечений генерации ПФ составляет всего 60 (табл. 3).

Таблица 2

Зависимость основных энергетических параметров атомов отдачи кремния и характеристик ПФ от энергии бомбардирующих протонов E_p

E_p, МэВ	$E_{\max}$	$\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$	ν	σ_d, кб	η_{FP}, см$^{-1}$
	кэВ				
0,5	67	0,197	3,1	37,0	5700
1,0	134	0,215	3,4	18,5	3100
2	368	0,232	3,7	9,2	1700
4	535	0,250	4,0	4,6	920
8	1070	0,267	4,3	2,3	494
15	2006	0,283	4,5	1,2	280
20	2680	0,290	4,6	0,9	207

Обозначение: σ_d — сечение образования ПФ.
См. также примечания к табл. 1.

Из формул (6) и (10) следует, что зависимости сечения образования и темпа генерации ПФ от энергии протонов практически обратно пропорциональны энергии протонов, поскольку дополнительный множитель ν в выражении (6) весьма медленно (логарифмически) растет с увеличением E_p. В связи с этим при замедлении протона темп генерации ПФ будет увеличиваться. Если, например, облучать пластину кремния толщиной 1 мм протонами с энергией 15 МэВ, то на выходе из пластины замедленные протоны будут иметь энергию около 8 МэВ. При таком облучении «на прострел» скорость генерации ПФ на лицевой стороне облучаемой пластины (280 см$^{-1}$) будет почти в два раза меньше, чем на обратной стороне пластины (490 см$^{-1}$, см. табл. 2, 3).

Отметим, что если в расчетах использовать верхнее предельное значение E_d, встречающееся в литературе [11] и равное 35 эВ, то согласно формулам (1), (2) и (6) для электронов с энергией 1 МэВ $\sigma_d = 29$ б, $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle = 68$ эВ и $\eta_{\text{FP}} = 1{,}4$ см$^{-1}$. При использовании $E_d = 35$ эВ для протонов с энергией 8 МэВ получим согласно формулам (11), (13) и (7) значения $\sigma_d = 1600$ б, $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle = 360$ эВ и $\eta_{\text{FP}} = 330$ см$^{-1}$. Поскольку отношение сечений дефектообразования (11) не зависит от E_d, то и отношение темпов генерации дефектов при рассматриваемых видах облучения очень слабо изменяется (от 245 при $E_d = 25$ эВ до 235 при $E_d = 35$ эВ).

Формирование вторичных радиационных дефектов. Сравнение с экспериментом

Поведение образовавшихся путем облучения полупроводника компонентов пары Френкеля (вакансия и междоузельный атом) зависит от многих факторов, главными из которых являются:

температура облучения;

примесный состав и уровень легирования конкретного полупроводника;

энергия первично выбитого атома отдачи.

Многолетний опыт экспериментального изучения поведения радиационных дефектов после их генерации помогает создать такие условия, при которых существует основной механизм формирования вторичных РД, устойчиво регистрируемых в эксперименте. К таким условиям относятся:

использование кремния, выращенного методом бестигельной зонной плавки (FZ), с малым содержанием кислорода, обеспечивающим заведомо малую концентрацию радиационных дефектов, называемых *A*-центрами (атом кислорода-вакансия OV) (рис. 2, 3);

наличие в кремнии основной легирующей примеси, как правило, фосфора, обладающей высоким сечением захвата вакансии, обеспечивающим высокую концентрацию радиационных дефектов, называемых *E*-центрами (атом фосфора-вакансия PV) (см. рис. 2, 3);

использование экспериментальных методов, позволяющих однозначно определять температурные зависимости концентрации и подвижности носителей заряда, основанные на одновременном измерении эффекта Холла и удельной электропроводности.

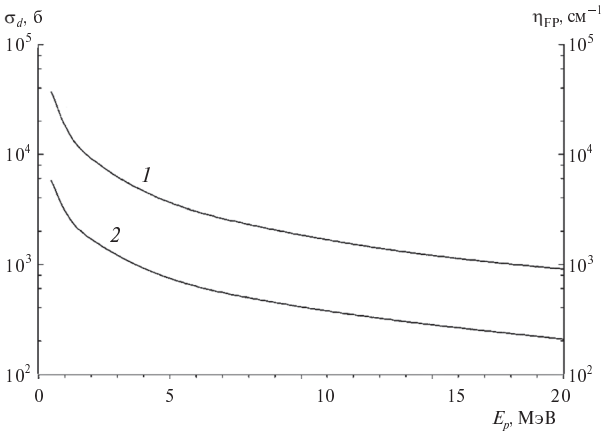


Рис. 1. Зависимости сечения образования (*1*) и темпа генерации (*2*) ПФ от энергии протонов

На рис. 4 представлен пример использования вышеописанных экспериментальных условий для облучения кремния электронами с энергией 1 МэВ. Показаны зависимости концентрации носителей заряда от обратной температуры, $n(1/T)$ исходного и облученного электронами образца кремния n-FZ-Si. Кривые $n\,(1/T)$ имеют участки плато, понижающиеся с увеличением дозы облучения, что позволяет определить скорость удаления носителей заряда из зоны проводимости. В наших условиях она составляет $\eta_e = -0{,}23$ см$^{-1}$.

С другой стороны, анализ зависимостей $n(1/T)$ на основе уравнений электронейтральности для невырожденных полупроводников позволяет определить раздельно концентрации мелких донорных состояний примеси фосфора (N_d) и компенсирующих акцепторов (N_a) в исходных и облученных материалах. Это оказывается возможным, так как экспоненциальный («низкотемпературный») участок характеризует степень

Таблица 3

Сравнение основных характеристик образования пар Френкеля для атомарного (Si) и бинарного (SiC) полупроводников при различных видах облучения

Вид бомбардировки	Энергия облучения, МэВ	σ_d, б			η_{FP}, см$^{-1}$			
		Si	SiC		Si	SiC		
			Si	C		Si	C	Сумма
Электроны	1	39,2	40,8	23,3	2,0	1,9	1,2	3,1
Протоны	8	2300	2400	1400	490	510	320	830
	15	1200	1300	750	280	280	170	450

Примечание. Принятые значения величин: E_d (Si) = 24 эВ, E_d (C) = 18 эВ, $N_0 = 4{,}8\cdot10^{22}$ см$^{-3}$.

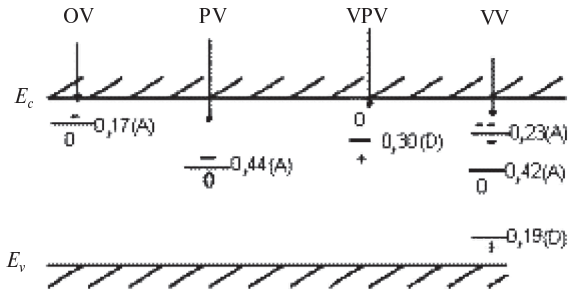


Рис. 2. Энергетическое положение уровней (эВ) основных радиационных дефектов, созданных в кремнии путем облучения электронами и протонами;

Типы радиационных дефектов: OV (кислород-вакансия); PV (фосфор-вакансия); VPV (вакансия-фосфор-вакансия), но природа данного центра однозначно не установлена; VV (дивакансия)

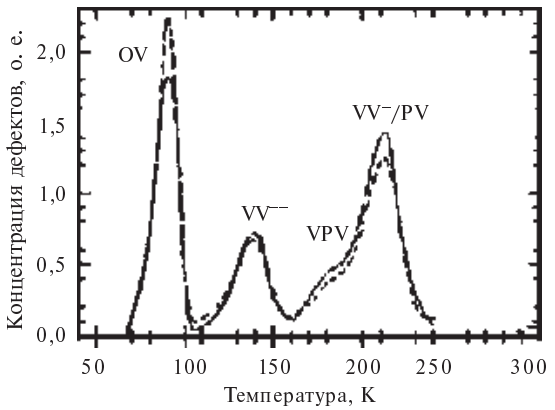


Рис. 3. Спектр радиационных дефектов, созданных в кремнии путем облучения протонами с энергией 8 МэВ (сплошная кривая) и электронами с энергией 1 МэВ (пунктир);

пики соответствуют радиационным дефектам *E*1 (90 K), *E*2 (130 K), *E*3 (170 K) и *E*4 (220 K)

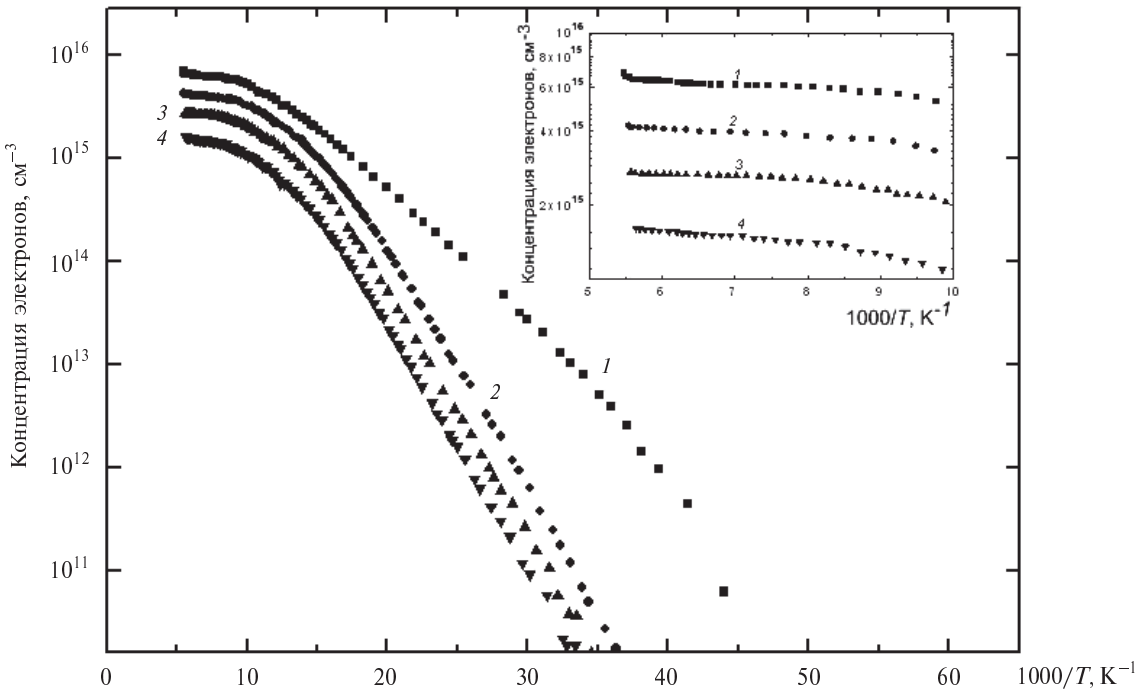


Рис. 4. Температурные зависимости концентрации электронов в кремнии *n*-FZ-Si, легированном фосфором, в исходном состоянии (*1*) и после облучения электронами с энергией 1 МэВ (*2–4*).

Доза Ф, $см^{-2}$: 0 (*1*); $1 \cdot 10^{16}$ (*2*); $2 \cdot 10^{16}$ (*3*); $3 \cdot 10^{16}$ (*4*).
Вставка – то же в области высоких температур

компенсации (отношение концентраций N_a/N_d), а область примесного истощения («высокотемпературный» участок) — разность концентраций ($N_d - N_a$).

Выяснилось, что уменьшение концентрации носителей заряда при облучении n-FZ-Si электронами с энергией 1 МэВ хорошо описывается моделью с доминирующей ролью E-центров.

E-центрами называют электрически активные комплексы вакансия-примесный атом V группы, в данном случае фосфора. Комплексы проявляют себя как акцепторы с глубиной залегания $E_T \approx E_C - 0{,}4$ эВ. В итоге захват атомами V группы подвижных вакансий приводит не только к потере мелких донорных состояний (деактивация примеси), но дополнительно и к компенсации электронной проводимости акцепторными уровнями E-центров. Формально одна вакансия радиационного происхождения удаляет из зоны проводимости полупроводника два электрона проводимости. Поэтому при таком механизме компенсации проводимости полупроводника $\eta_e(\max) = 2\eta_{FP} = 4\ \text{см}^{-1}$.

Из данных, приведенных на рис. 1, были определены скорость удаления мелких донорных состояний $\eta_{SD} \approx -0{,}12\ \text{см}^{-1}$ и скорость введения компенсирующих акцепторов $\eta_A \approx 0{,}11\ \text{см}^{-1}$. Видно, что величина скорости удаления носителей $\eta_e = -0{,}23\ \text{см}^{-1}$ является суммой двух примерно равных слагаемых. Такое соотношение скоростей удаления мелких донорных состояний и носителей заряда в облученных образцах n-Si подтверждает доминирующий вклад E-центров в процесс компенсации.

Скорость удаления мелких донорных состояний η_{SD} в n-Si на начальных стадиях облучения может служить мерой образования в кремнии так называемых «далеких» ПФ, т. е. разделившихся на изолированные вакансии и междоузельные атомы. Из литературы было известно, что для умеренно легированного кремния $n \sim 10^{16}\ \text{см}^{-3}$, когда расстояние между атомами донорной примеси составляет

$$R_n = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n}} \cong 3 \cdot 10^{-8}\ \text{м}, \qquad (13)$$

доля нерекомбинировавших ПФ f_{FP} составляет ~ 5 % [13]. Измеренная нами скорость образования разделенных ПФ ($0{,}12\ \text{см}^{-1}$) хорошо совпадает с этими оценками (доля разделившихся ПФ f_{FP} составляет 6 % от общей скорости генерации ПФ — $2\ \text{см}^{-1}$). Для сильнолегированного кремния ($n > 10^{19}\ \text{см}^{-3}$), когда расстояние между примесными атомами R_n уменьшается до 30 Å, скорость удаления носителей заряда η_e при облучении электронами с энергией 1 МэВ составляет $1{,}1\ \text{см}^{-1}$ [14] и доля f_{FP} разделившихся ПФ составляет ~ 27 %. При увеличении энергии электронов до 2,5 МэВ f_{FP} увеличивается в сильнолегированном кремнии до 60 %. Такое резкое увеличение доли разделившихся ПФ свидетельствует о сильном влиянии средней энергии атомов отдачи на поведение (разделение на компоненты) первичных ПФ.

Аналогичные зависимости $n(1/T)$ — концентрации носителей заряда от обратной температуры были получены для образцов n-FZ-Si, облученных протонами с энергией 8 МэВ. Кривые $n(1/T)$ имеют участки плато, понижающиеся с увеличением дозы облучения, что позволяет определить скорость удаления носителей заряда из зоны проводимости при протонном облучении. В наших условиях она составляет $\eta_e = 190\ \text{см}^{-1}$ для $E_p = 8$ МэВ. Уменьшение концентрации носителей заряда при облучении n-FZ-Si протонами обусловлено, как и в случае облучения электронами, двумя процессами: во-первых, резким уменьшением концентрации мелких донорных состояний атомов фосфора и, во-вторых, сравнительно медленным увеличением концентрации акцепторов радиационного происхождения. Для указанных процессов были определены при $E_p = 8$ МэВ скорость удаления мелких донорных состояний $\eta_{SD} \approx -120\ \text{см}^{-1}$ и скорость введения компенсирующих акцепторов $\eta_A \approx 70\ \text{см}^{-1}$. Видно, что величина скорости удаления носителей $\eta_e = -190\ \text{см}^{-1}$ является суммой двух неравных слагаемых (как и раньше, в расчетах фигурирует модуль отрицательной величины). Ранее предполагалось, что при протонном облучении кремния основную роль играет обычная компенсация мелких доноров глубокими акцепторными состояниями радиационного происхождения, в первую очередь, вакансионными комплексами типа дивакансий. В настоящей работе показано, что это не так: в случае протонного облучения FZ-Si скорость удаления носителей заряда из зоны проводимости в основном определяется скоростью удаления мелких донорных состояний (деактивация доноров), а не скоростью образования акцепторных центров радиационного происхождения. Модель радиационного дефектообразования, в которой абсолютно доминирует процесс

формирования E-центров (облучение FZ-Si быстрыми электронами), не подходит для описания радиационной деградации электрических параметров того же материала при протонном облучении. Можно предположить, что при протонном облучении в областях с высокой концентрацией генерируемых подвижных вакансий возрастает вероятность образования не только дивакансий, но и комплексов примесных атомов с двумя вакансиями.

В отличие от атомарного полупроводника — кремния, анализ радиационного дефектообразования в сложных полупроводниках, например в перспективном широкозонном бинарном полупроводнике — карбиде кремния SiC, выглядит намного сложнее и неоднозначнее, поскольку ПВА может создавать дефекты в обеих подрешетках (см. табл. 3).

В заключение сравним расчетные значения темпа генерации точечных дефектов и экспериментальные значения скорости удаления носителей заряда при двух видах облучения (см. табл. 3). В конце предыдущего параграфа мы рассчитали, что протоны с энергией 8 МэВ генерируют первичные точечные дефекты примерно в 250 раз эффективнее, чем электроны с энергией 1 МэВ. Эти результаты предполагали, что дозы облучения, при которых наблюдаются одинаковые изменения свойств полупроводника (проводимости) должны тоже отличаться в 250 раз. Однако на эксперименте было установлено, что протоны удаляют носители заряда почти в 800 раз эффективнее, чем электроны. Повышенная в 3–5 раз «активность» ПФ, созданных протонным облучением (по сравнению с ПФ, созданными электронным облучением), в удалении носителей заряда была обнаружена не только для кремния [15], но и для нитрида галлия [16] и карбида кремния [17]. Основное различие в воздействии сравниваемых излучений следует искать в величине энергии, передаваемой в актах рассеяния [18]. При облучении электронами $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ кремния составляет около 55 эВ. Эта энергия лишь немного превосходит пороговую энергию смещения атомов. Поэтому электронное облучение создает лишь точечные дефекты — единичные близко расположенные пары вакансия-междоузельный атом (ПФ). При облучении кремния протонами $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ составляет 267 эВ. По сравнению с электронным облучением, наблюдаются два существенных отличия. Во-первых, за счет большей величины $\langle E_{\text{ПВА}} \rangle$ могут значительно увеличиваться расстояния между образующимися компонентами ПФ. Во-вторых, атомы отдачи с вышеприведенными энергиями способны вызывать каскады столкновений с образованием «вторичных» ПФ, причем число вторичных ПФ может в несколько раз превышать число первичных. В результате каскада возникают микрообласти размером 20–30 Å, в которых генерируется до десятка смещений. Такие микрообласти еще не являются, строго говоря, областями разупорядочения. Однако высокая концентрация вакансий в них способствует формированию дивакансий и их комплексов с примесными атомами. Таким образом, появление микрообластей монокристаллического кремния с высокой концентрацией вакансий, в которых интенсивно протекают реакции по формированию дивакансий и их комплексов с примесными атомами, есть принципиальное различие в воздействии протонного облучения. Наблюдающаяся при протонном облучении ситуация представляется «промежуточной» между случаем разупорядоченных областей при нейтронном облучении и случаем одиночных точечных дефектов при электронном облучении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Козловский, В.В**. Модифицирование полупроводников пучками протонов [Текст]: Монография / В.В.Козловский.— СПб.: Наука, 2003.— 268 с.

2. **Емцев, К.В.** Легирование широкозонных полупроводников радиационными дефектами [Текст] / К.В.Емцев, В.В.Козловский // Научно-технические ведомости СПбГПУ. — 2006.— Вып. 3.— С. 156–161.

3. **Громов, В.Т.** Введение в радиационную физику твердого тела [Текст] / В.Т. Громов.— Снежинск: Изд. ВНИИТФ, 2007.— 208 с.

4. **Mott, N.F.** The scattering of fast electrons by atomic nuclei [Text]/ N.F. Mott // Proc. Roy. Soc.— 1929.— Vol. A124.— P. 426–432.

5. **McKinley, W.A.** The Coulomb scattering of relativistic electrons by nuclei [Text] / W.A. McKinley, H. Feshbach // Phys.Rev.— 1948.— Vol. 74.— P. 1759–1766.

6. **Holmström, E.** Threshold defect production in silicon determined by density functional theory molecular dynamics simulations [Text] / E. Holmström, A. Kuronen, K. Nordlund // Phys. Rev. B.— 2002.— Vol. 78.— P. 045202–045209.

7. **Dienes, G.J.** Radiation effects in solids [Text] / G.J. Dienes, G.H. Vineyard // New York: Interscience Publishers, 1957.— P. 12.

8. **Kinchin, G.H.** The displacement of atoms in solids by radiation [Text] / G.H. Kinchin, R.S. Pease / / Rep. Prog. Phys.— 1955.— Vol. 18.— P. 1–14.

9. **Ziegler, J.F.** The stopping and range of ions in solids [Text]/ J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark.— New York: Pergamon, 1985.— 256 p.

10. **Вавилов, В.С.** Радиационные эффекты в полупроводниках и полупроводниковых приборах [Текст] / В.С. Вавилов, Н.А. Ухин.— М.: Атомиздат, 1969.— 117 с.

11. **Берман, Л.С.** Распределение атомов кремния по пороговой энергии смещения и его зависимость от температуры [Текст] / Л.С. Берман, Н.А. Витовский, В.Н. Ломасов [и др.] // ФТП.— 1990.— Т. 24.— Вып. 10.— С. 1818-1822.

12. **Коршунов, Ф.П.** Радиационные эффекты в полупроводниковых приборах [Текст] / Ф.П. Коршунов, Г.В. Гатальский, Г.М. Иванов.— Минск: Наука и техника, 1978.— 11 с.

13. **Poate, J.M.** Ion implantation and beam processing [Text] / J.M. Poate, J.S. Williams.— Sydney: Academic, 1984.— P. 13.

14. **Sivo, L.L.** Studies of radiation damage in degenerate silicon irradiated at low temperatures [Text] / L.L. Sivo, E.E. Klontz // Phys. Rev.— 1969.— Vol. 178.— No. 3.— P. 1264–1273.

15. **Taylor, S.J.** Comparison of the effects of electron and proton irradiation on n^+–p-p^+ silicon diodes [Text] / S.J. Taylor, M. Yamaguchi, T. Yamaguchi [et al.] // J. Appl. Phys.— 1998.— Vol. 83.— No 9.— P. 4620–4627.

16. **Ionascut-Nedelcescu, A.** Radiation hardness of gallium nitride [Text] / A. Ionascut-Nedelcescu, C. Carlone, H.J. Bardeleben. [et al.] // IEEE Trans. Nucl. Sci.— 2002.— Vol. 49.— No. 6.— P. 2733–2738.

17. **Емцев, В.В.** Сравнительное изучение изменения электрических свойств кремния и карбида кремния при облучении протонами [Текст] / В.В. Емцев, А.М. Иванов, В.В. Козловский [и др.] // ФТП.— 2010.— Т. 44.— Вып. 5.— С. 706–712.

18. **Иванов, А.М.** Распределение по энергии атомов отдачи и формирование радиационных дефектов в пленках карбида кремния при протонном облучении [Текст] / А.М. Иванов, В.В. Козловский, Н.Б. Строкан [и др.] // ФТП.— 2011.— Т. 45.— Вып. 2.— С. 145–148.

УДК 538.9

С.Б. Вахрушев, Д. Дамянович, Д.Ю. Чернышев, А.А. Босак, М.А. Кораблев-Дайсон

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПЕРОВСКИТЕ $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$ ПО ДАННЫМ ДИФРАКЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Сегодня одной из основных проблем при синтезе и широком применении соединений с высокими пьезоэлектрическими показателями является содержание в них токсичного свинца. Использование свинецсодержащих соединений в ряде стран регулируются на государственном уровне директивами правительств (RoHS 2006, ELV 2003, WEEE 2004). Широко используется в промышленности свинецсодержащий пьезоэлектрик на основе цирконата-титаната свинца (ЦТС) [1, 2], в котором содержание свинца доходит до 60 %. Большое количество исследований посвящено поиску замены ЦТС экологически чистым соединением, сравнимым с ним по эффективности [3].

Недавно, в 2004 году, была синтезирована группа бессвинцовых соединений $(KNa)NbO_{3(1-x)}$-$LiNbO_{3x}$ (KNNL) с пьезоэлектрическими коэффициентами, близкими к ЦТС; в частности, значение его пьезоэлектрической константы d_{33} превышало 300 пКл/Н [4]. Известно, что в сегнетоэлектрических материалах пьезоэлектрический и диэлектрический отклики увеличиваются в окрестности фазового перехода (ФП). В работе [5] было продемонстрировано, что при комнатной температуре эти характеристики име-

ют максимум при концентрации ниобата лития $LiNbO_3$ 6–7 %, что может быть соотнесено с существованием морфотропной фазовой границы при структурном фазовом переходе из орторомбической в тетрагональную фазу.

Фазовая диаграмма зависимости от состава керамики KNNL с содержанием примеси $LiNbO_3$ от 2 до 10 % исследовалась в работе [6] методами комбинационного рассеяния, диэлектрической спектроскопии и пьезоэлектрического резонанса. В отличие от ЦТС, в котором на фазовой диаграмме «температура — состав» граница ФП располагается практически вертикально, в KNNL она имеет наклон: с увеличением содержания лития температура ФП понижается. Исследования проводились в температурном интервале от 7 до 779 K. При охлаждении KNNL претерпевает последовательность структурных фазовых переходов: сначала из кубической в тетрагональную фазу (из параэлектрической в сегнетоэлектрическую), затем происходит переход из тетрагональной в орторомбическую (сохраняется сегнетоэлектрическая фаза). На основании данных комбинационного рассеяния было сделано предположение, что симметрия фаз KNNL аналогична таковой в ниобате калия: для KNNL в кубической фазе (I) структура описывается пространственной группой $Pm\bar{3}m$, в тетрагональной (II) — $P4mm$, в орторомбической (III) — $Amm2$.

Наиболее полную информацию о симметрии и структуре вещества предоставляет монокристальный дифракционный эксперимент. Необходимым условием последнего является наличие монокристаллов, технология получения которых для KNNL очень сложна и пока не получила широкого распространения [7 , 8]. Недавно в работе [8] были представлены первые результаты диэлектрических измерений высококачественных монокристаллов KNNL. Нами было проведено детальное исследование кристалла $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$.

Основные цели данной работы — проследить последовательность фазовых переходов с уточнением их рода, изучить температурную эволюцию спонтанных деформаций и определить параметры термодинамических констант. Для этого использовалась порошковая дифракция высокого разрешения. Использование синхротронного излучения (СИ) позволяет значительно ускорить процесс проведения эксперимента за счет высокой интенсивности падающего излучения. Таким образом могут быть получены подробные температурные зависимости параметров решетки в соединении $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$.

В качестве образца для исследования использовался поликристалл (тщательно перемолотый монокристалл). Другие монокристаллы того же синтеза использовались в монокристальном дифракционном эксперименте, данные которого будут опубликованы отдельно.

Экспериментальные исследования проводились на швейцарско-норвежской линии BM01A в Европейском центре синхротронного рассеяния на длине волны синхротронного излучения $\lambda = 0{,}73484$ Å. Длина волны была откалибрована с использованием порошка борида лантана (LaB_6, NIST Standard № 660a) дифракционным методом. Регулирование температуры образца осуществлялось в интервале от 62 до 455 °C при помощи его обдува парами нагретого азота (GSB 1300 FMB Oxford heat blower). Кристаллический образец был помещен в капилляр диаметром 0,2 мм. Идентификация рефлексов и уточнение постоянных решетки был проведено при помощи программного пакета Fullprof (Profile Matching Mode). Пример дифрактограммы при температуре 62 °C показан на рис. 1.

В результате последовательной обработки 119 порошковых дифрактограмм была определена температурная зависимость параметров ячейки соединения $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$. Наблюдалось два структурных ФП, сопровождавшихся двумя областями сосуществования фаз. Температурная зависимость параметров элементарной ячейки всех трех фаз показана на рис. 2, *а*. Изменение объема при структурном фазовом переходе происходит скачком, что позволяет отнести оба фазовых перехода к переходам первого рода. (рис. 2, *б*). Изменение порошковых дифрактограмм можно описать с помощью предложенной в работе [8] последовательности структур симметрии $Pm\bar{3}m$, $P4mm$, $Amm2$ для кубической, тетрагональной и орторомбической фаз соответственно.

В работе [9] исследовалась порошковая дифракция нейтронов чистого ниобата натрия. Данное соединение, обладающее структурой перовскита, претерпевает такую же последовательность структурных фазовых переходов, как и иссле-

дованное нами соединение. При переходе из орторомбической в тетрагональную фазу (О-Т) в $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$, в отличие от ниобата натрия, параметр ячейки b претерпевает скачок, тогда как в $NaNbO_3$ параметр решетки $b \approx c \approx a\sqrt{2} = 3{,}971$Å [9].

Области сосуществования фаз требуют более детального исследования и в данной работе не рассматриваются.

Для перехода из кубической в тетрагональную фазу (С-Т) особенно велика роль спонтанных деформаций, связанных с эволюцией параметра элементарной ячейки (рис. 2, *а*).

Температурную эволюцию спонтанных деформаций (см. рис. 2, *а* и рис. 3) для тетрагональной области можно записать в следующем виде:

$$u_{33}^0 = \frac{c - a_0}{a_0}; \quad u_{22}^0 = u_{11}^0 = \frac{a - a_0}{a_0}, \qquad (1)$$

где a_0 — параметр решетки из кубической фазы, экстраполированный в тетрагональную и орторомбическую, c, a — параметры решетки в тетрагональной фазе.

Величины деформации существенным образом зависят от коэффициентов, входящих в электроупругую энергию Φ_σ. В термодинамическом потенциале при наличии упругих напряжений чисто упругие члены типа $s_{iklm}\sigma_{lm}$ учтены в тензоре напряжений σ_{ik}, поэтому энергия примет вид [10 , 11]:

$$\Phi = \Phi_0 + \alpha_1 P_x^2 + \alpha_2 P_y^2 + \alpha_3 P_z^2 + \frac{1}{2}\beta_1 P^2 +$$

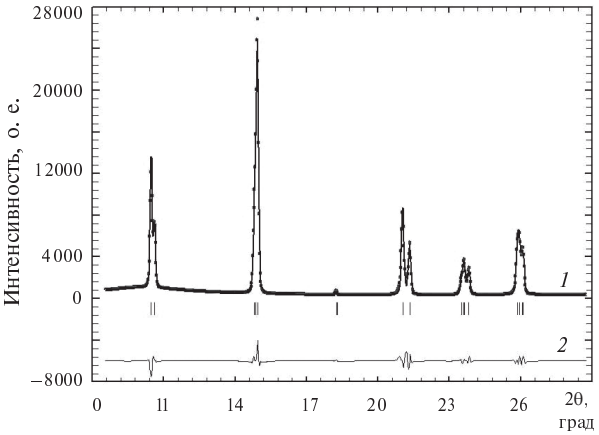


Рис. 1. Порошковая дифрактограмма (*1*) и разностный спектр (*2*) между экспериментом (точки) и расчетным спектром (жирная линия) для образца $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$ при температуре 62 °С.

Вертикальные отрезки обозначают рассчитанные положения брэгговских рефлексов

$$+ \beta_2\left(P_x^2P_y^2 + P_y^2P_z^2 + P_z^2P_x^2\right) + \frac{1}{3}\gamma_1 P^6 +$$

$$+ \gamma_2\left(P_x^4\left(P_y^2 + P_z^2\right) + P_y^4\left(P_z^2 + P_x^2\right) +\right.$$

$$\left. + P_z^4\left(P_x^2 + P_y^2\right)\right) + \gamma_3 P_x^2P_y^2P_z^2, \qquad (2)$$

где $\alpha_1 = \alpha - \chi_1\sigma_{11} - \chi_2(\sigma_{22} + \sigma_{33})$; $\alpha_2 = \alpha - \chi_1\sigma_{22} -$ $- \chi_2(\sigma_{33} + \sigma_{11})$; $\alpha_3 = \alpha - \chi_1\sigma_{33} - \chi_2(\sigma_{11} + \sigma_{22})$.

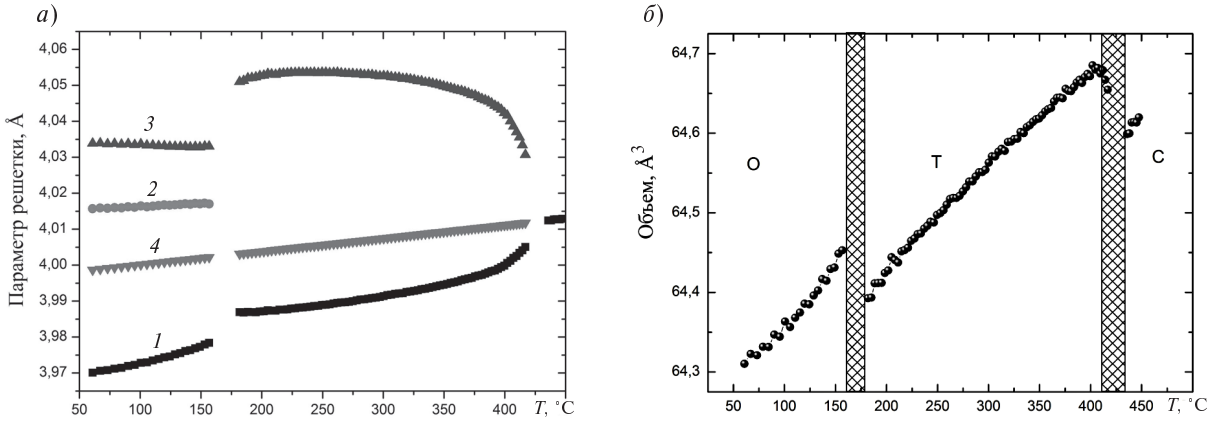


Рис. 2. Температурная эволюция параметров (*а*) и объема (*б*) элементарной ячейки соединения $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$ с экстраполяцией параметра решетки из высокосимметричной кубической фазы в области тетрагональной и орторомбической фаз. Параметры решетки: *1* — *a*; *2* — *b*; *3* — *c*; *4* — a_0; структурные фазы: орторомбическая *Amm*2 (О); тетрагональная *P*4*mm* (Т), кубическая $Pm\bar{3}m$ (С)

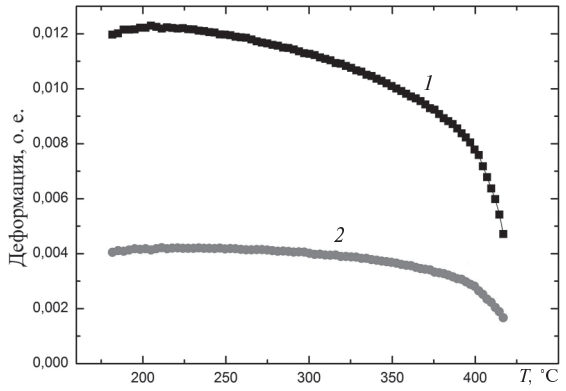


Рис. 3. Температурная эволюция спонтанных деформаций u_{33} (*1*) и $u_{11} = u_{22}$ (*2*) в тетрагональной фазе

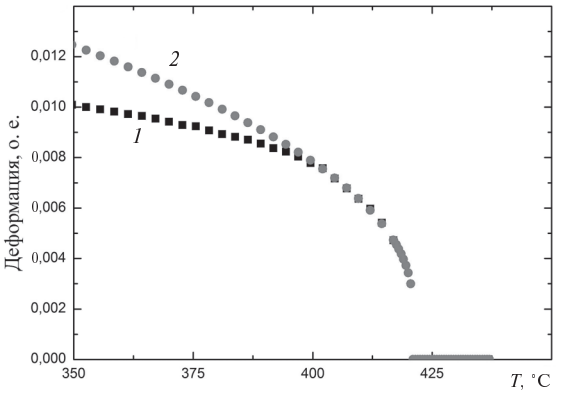


Рис. 4. Температурная эволюция спонтанных деформаций u_{33} (*1*) и квадрата поляризации (*2*) в тетрагональной фазе

Компоненты тензора спонтанных деформаций кристалла определяются из формулы

$$u_{ik} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ik}}. \qquad (3)$$

Таким образом,

$$u_{ii} = \chi_1 P_i^2 + \chi_2 \left(P^2 - P_i^2 \right); \;\; u_{ik} = \chi_3 P_i P_k. \qquad (4)$$

В тетрагональной области при учете того, что поляризация направлена вдоль одного высокосимметричного направления, компоненты тензора спонтанной деформации кристалла определяются следующим образом:

$$u_{33}^0 = \chi_1 P^2; \qquad u_{11}^0 = u_{22}^0 = \chi_3 P^2. \qquad (5)$$

Так как измерения поляризации для данного образца пока не проводились, можно определить только относительное значение коэффициентов:

$$\chi_2 / \chi_1 = -0,35.$$

В работе [12] были получены экспериментальные данные для титаната бария, позволившие получить отношение коэффициентов $\chi_2 / \chi_1 = -0,42$.

Теперь перейдем к рассмотрению поляризации. Из условия минимума термодинамического потенциала (2) можно получить нетривиальные решения параметра порядка. В частности, для тетрагональной области поляризация отлична от нуля и равна

$$P_z^2 = \frac{1}{2\gamma_1}\left[-\beta_1 + \sqrt{\beta_1^2 - 4\alpha_1 (T - T_0)\gamma_1} \right]. \qquad (6)$$

В связи тем, что температурная зависимость спонтанных деформаций качественно повторяет поведение таковой для квадрата поляризации (5), можно получить относительные значения коэффициентов разложения термодинамического потенциала при помощи подгонки зависимости спонтанных деформаций от температуры в области, близкой к области ФП (рис. 4). В результате такой подгонки были получены следующие относительные значения термодинамических коэффициентов: $\alpha_1 = 2,059\text{E} - 005$; $\beta_1 = -0,03725$; $\gamma_1 = 14,89$.

Экстраполяция полученной модельной функции в область двух фаз позволила получить значение температуры, при которой параметр порядка претерпевает скачок, а именно $T_c =$ = 420,5 °C. Значение температуры Кюри при переходе из тетрагональной в орторомбическую фазу соответствует данным, полученным в работах [7, 13].

Таким образом, проведенное дифракционное исследование подтвердило наличие двух фазовых переходов в соединении $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$ в диапазоне температур от комнатной до 450 °C; при этом предложенные ранее изменения симметрии [8] соответствуют наблюдаемым в дифрактограммах. Получены температурные зависимости спонтанных деформаций и проведен их анализ в рамках феноменологической теории.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jaffe, B.** Piezoelectric ceramics [Текст] / B. Jaffe, W.R. Cook, Jr., H. Jaffe.— London, New York: Academic Press.— 1971.— 326 p.

2. **Berlincourt, D.A.** Piezoelectric properties of polycrystalline lead titanate-zirconate compositions [Текст]/ D.A. Berlincourt, C. Cmolik, H. Jaffe // Proceedings of the IRE.— 1960.— Vol 48.— P. 220–223.

3. **Takenaka, T.** Present status of non-lead-based piezoelectric ceramics [Текст] / T. Takenaka, H. Nagata // Key Eng. Mater.— 1999.— Vol. 157–158.— P. 57–64.

4. **Saito, Y.** Lead-free piezoceramics [Текст] / Y. Saito, H. Takao, T. Tani [et al.] // Nature.— 2004.— Vol. 432.— P. 84–87 .

5. **Kakimoto, K.** Raman scattering study of piezoelectric $(Na_{0.5}K_{0.5})NbO_3$-$LiNbO_3$ ceramics [Текст] / K. Kakimoto, K. Akao, Y. Guo [et al.] // Jpn. J. Appl. Phys.— 2005.— Part 144.— P. 7064–7067.

6. **Klein, N.** A study of the phase diagram of (K, Na, Li)NbO_3 determined by dielectric and piezo-electric measurements, and Raman spectroscopy [Текст] / N. Klein, E. Hollenstein, D. Damjanovic [et al.] // J. Appl. Phys.—2007.— Vol. 102.— P. 014112.

7. **Hollenstein, E.** Piezoelectric properties of Li- and Ta-modified $(Na_{0.5}K_{0.5})NbO_3$ ceramics [Текст] / E.M. Hollenstein, Davis, D. Damjanovic [et al.] // Appl. Phys. Lett.—2005.— Vol. 87.—P. 182905 (1–3).

8. **Davis, M.** Large and stable thickness coupling coefficients of [001]C-oriented $KNbO_3$ and Li-modified (K,Na)NbO_3 single crystals [Текст] / M. Davis, N. Klein, D. Damjanovic [et al.] // APL.— 2007.— Vol. 90.— P. 62904.

9. **Hewat, A.W.** Cubic-tetragonal-orthorhombic-rhombohedral ferroelectric transitions in perovskite potassium niobate: neutron powder profile refinement of the structures [Текст] / A.W. Hewat // J. Phys. C: Solid State Phys.— 1973.— Vol. 6.— P. 2559–2572.

10. **Гинзбург, В.Л.** Теория сегнетоэлектрических явлений [Текст] / В.Л. Гинзбург // УФН.— 1949.— Т. 38.— Вып. 4.— С. 490–525.

11. **Холоденко, Л.П.** Термодинамическая теория сегнетоэлектриков типа титаната бария [Текст] / Л.П. Холоденко.— Рига: Зинатне, 1971.— 198 с.

12. **Huibregste, E.J.** Triple hysteresis loops and the free-energy function in the vicity of the 5°C transition in $BaTiO_3$ [Текст] / E.J. Huibregste, M. Drougard, D. Young // Phys. Rev.— 1955 .— Vol. 98.— P. 1705–1711.

13. **Guo, Y.** $(Na_{0.5}K_{0.5})NbO_3$-$LiTaO_3$ lead-free piezoelectric ceramics [Текст] / Y.Guo, K. Kakimoto, H. Ohsato // Materials Letters.—2004.— Vol. 59.— P. 241–244.

УДК 535.3

Г.А. Мелентьев, В.А. Шалыгин, М.Я. Винниченко, А.Н. Софронов, Л.Е. Воробьев, Д.А. Фирсов

ДАЛЬНЕЕ ИНФРАКРАСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ГОРЯЧИХ ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ОДИНОЧНОМ ГЕТЕРОПЕРЕХОДЕ AlGaN/GaN

Дальнее инфракрасное (ИК) излучение находит широкое применение во многих областях науки и техники: в спектроскопии материалов и биологических объектов, медицинской диагностике и терапии, системах безопасности и экологического мониторинга, беспроводной связи. В последние годы внимание исследователей привлекает нитрид галлия GaN как перспективный материал для источников дальнего ИК излучения с электрической накачкой (см. [1, 2] и цитированные там работы). Нитрид галлия обладает уникальным сочетанием свойств, в частности, для него характерны сильное взаимодействие электронов с оптическими фононами, большая энергия полярного оптического фонона (91 мэВ), большая величина насыщения дрейфовой скорости в сильных электрических полях.

В работе [1] теоретически исследована возможность получения излучения дальнего ИК и миллиметрового диапазона на основе пролетного резонанса с испусканием оптических фононов в структурах на основе нитридов. Однако экспериментально пролетный резонанс в нитридах, и в частности в GaN, наблюдать не удалось

вследствие недостаточно высокого качества материала, которое обеспечивает современная технология. С другой стороны, в микроструктурах на основе эпитаксиальных слоев нитрида галлия удалось наблюдать эмиссию дальнего ИК излучения в условиях пробоя примеси электрическим полем [3]; эмиссия фотонов в данных структурах была, в основном, вызвана внутрицентровыми донорными переходами. Еще одна возможность получить интенсивное излучение дальнего ИК диапазона из нитрида галлия — это разогрев электронов в сильных электрических полях. При этом наиболее перспективен двумерный (2D) электронный газ в гетероструктурах AlGaN/GaN [4], поскольку для него характерно значительное увеличение подвижности электронов по сравнению с трехмерным электронным газом в объемных эпитаксиальных слоях нитрида галлия, что обеспечивает более существенный разогрев электронов.

Данная работа посвящена детальным исследованиям спонтанной эмиссии излучения света дальнего ИК диапазона из селективно легированной гетероструктуры AlGaN/GaN при разогреве 2D-электронов в латеральном электрическом поле. С целью определить зависимость температуры горячих электронов от электрического поля также были выполнены экспериментальные исследования вольт-амперных характеристик (ВАХ) и проведены теоретические расчеты скорости потери энергии горячими электронами. Рассмотрена теоретическая модель теплового излучения горячих 2D-электронов и проведено сопоставление результатов расчета с данными эксперимента по эмиссии терагерцового излучения.

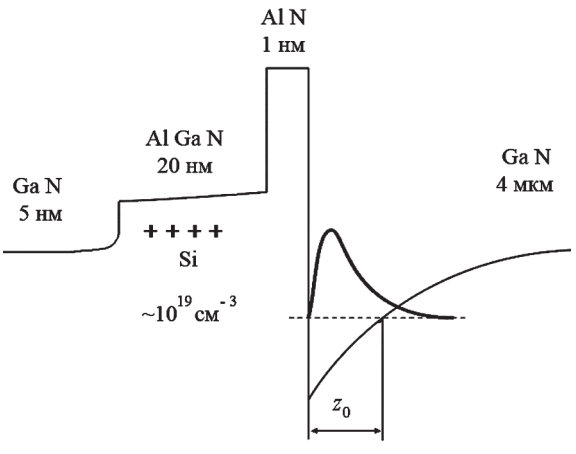


Рис. 1. Профиль дна зоны проводимости структуры. Показаны химический состав и характерные толщины слоев. На границе гетероперехода AlN/GaN приведен график волновой функции 2D-электронного газа (размер области ее локализации z_0 = 1,7 нм)

Как известно, на гетерогранице AlGaN/GaN в слое нитрида галлия формируется треугольная квантовая яма. В таких структурах обычно выращивается интерфейсный слой нитрида алюминия AlN, который препятствует проникновению электронного газа в область барьера, где локализованы ионизованные доноры кремния; благодаря этому обеспечивается высокая подвижность 2D-электронов в квантовой яме. Исследованная гетероструктура AlGaN/GaN была выращена на подложке из сапфира методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОС-гидридной эпитаксии) [4, 5]. Профиль дна зоны проводимости, характерные размеры слоев и волновая функция 2D электронного газа представлены на рис. 1. Структура включала изолирующий буфер GaN, интерфейсный слой AlN, селективно легированный барьер $Al_{0,3}Ga_{0,7}N$ и нелегированный покровный слой. Поверхностная концентрация электронов n_s в треугольной квантовой яме, возникающей на гетероинтерфейсе AlGaN/GaN, составляла $1{,}6\cdot10^{13}$ см$^{-2}$, что соответствует энергии Ферми ε_F = 192 мэВ. Подвижность носителей заряда μ возрастала от 1500 до 5700 см^2/(В·с) при охлаждении структуры от 300 до 4,2 К. На поверхности образцов создавались электрические контакты титан/золото (Ti/Au) на расстоянии 6,2 мм друг от друга, длина контактов составляла 5 мм. Вольт-амперные характеристики измерялись в электрических полях до 4 кВ/см. Интегральная интенсивность излучения дальнего ИК диапазона регистрировалась с поверхности образца в полосе чувствительности фотоприемника германий : галлий (длины волн от 41 до 133 мкм). При этом и образец, и фотоприемник погружались в жидкий гелий. Для исключения возможных паразитных сигналов фотоответа в видимом и ближнем ИК спектральных диапазонах между фотоприемником и образцом располагался фильтр из черного полиэтилена. Излучение регистрировалось в телесном угле 0,25 ср. Чтобы предотвратить нагрев образца, все измерения проводились в импульсных электрических полях (длительность импульса — 2 мкс, частота повторения — менее 1 Гц).

Результаты экспериментального исследования ВАХ при трех температурах образца представлены на рис. 2. Все характеристики сублинейные, что указывает на уменьшение подвижности 2D-электронов в сильных полях.

Из ВАХ были рассчитаны зависимости подвижности двумерных электронов от электрического поля (рис. 2, кривые *4*–*6*). Если сравнить слабополевые значения подвижности при разных температурах, то видно, что при нагревании образца от 4,2 до 105 K подвижность убывает слабо, а при дальнейшем нагревании до комнатной температуры подвижность резко уменьшается в несколько раз. Как известно, это обусловлено тем, что при температурах решетки выше 100 K начинается интенсивное рассеяние электронов с эмиссией полярных оптических фононов.

Анализ полевой зависимости подвижности двумерных электронов при температуре решетки 4,2 K показывает, что в сильных полях подвижность убывает в шесть раз. Это говорит о сильном разогреве электронов в электрическом поле. Можно грубо оценить степень разогрева электронов, если заметить, что сильнополевое значение подвижности при гелиевой температуре даже меньше, чем слабополевое при комнатной температуре. Это позволяет заключить, что в достаточно сильных электрических полях температура горячих электронов в нашем эксперименте превышала 300 K.

С целью определения полевой зависимости температуры горячих электронов был проведен более детальный анализ ВАХ. При этом выражения для расчета скорости потерь энергии 2D-электронами в треугольной квантовой яме были взяты из работы [6], а неравновесное распределение электронов по энергиям описывалось функцией распределения Ферми — Дирака с эффективной температурой T_e. При расчетах учитывались потери энергии при рассеянии электронов на акустических фононах за счет деформационного и пьезоэлектрического механизмов, а также процессы рассеяния с эмиссией оптических фононов. Согласно расчетам, при гелиевых температурах кристаллической решетки, когда температура электронов ниже 100 K, доминируют потери энергии за счет деформационных акустических фононов. При $T_e > 100$ K потери энергии быстро растут за счет эмиссии оптических фононов. При температурах решетки 105 и 300 K всегда доминирует рассеяние с эмиссией оптических фононов — независимо от электронной температуры.

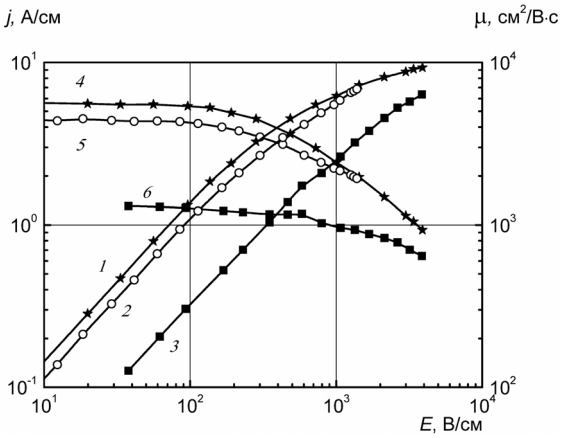


Рис. 2. Зависимости плотности тока (*1*–*3*) и подвижности (*4*–*6*) 2D-электронов от прикладываемого электрического поля в гетероструктурах AlGaN/GaN для разных температур решетки T, K: 4,2 (*1*, *4*); 105 (*2*, *5*); 300 (*3*, *6*)

Для определения зависимости эффективной температуры электронов T_e от электрического поля можно использовать уравнение баланса мощности:

$$e\mu E^2 = \left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle, \qquad (1)$$

где в правой части уравнения — рассчитываемая теоретически величина скорости потери энергии $\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle$, зависящая от T_e, а в левой — скорость набора электронами энергии от электрического поля, которая явно зависит от прикладываемого электрического поля E. Таким образом, уравнение баланса мощности позволяет установить взаимно однозначную связь между приложенным электрическим полем и температурой горячих электронов. В данных расчетах мы использовали экспериментальные значения подвижности μ (см. рис. 2). Зависимость электронной температуры от прикладываемого поля при температуре решетки $T = 4{,}2$ K, найденная с помощью уравнения (1), показана на рис. 3, *а*. На рис. 3, *б* представлена экспериментальная полевая зависимость интегральной интенсивности излучения дальнего ИК диапазона из исследуемой структуры.

В диапазоне полей от 20 В/см до 4 кВ/см температура электронов увеличивается на порядок, а интегральная интенсивность излучения — на три порядка. Максимальная интегральная интенсивность излучения в полосе чувствительности фотоприемника Ge:Ga, достигнутая в экспериментах, составляла величину около 10 мкВт/см^2 в телесном угле 1/4 ср. При этом, как показывает расчет, в телесном угле 2π ср интенсивность излучения составляет около 90 мкВт/см^2.

Чтобы подтвердить, что регистрируемая эмиссия дальнего ИК излучения обусловлена именно тепловым излучением горячих электронов, была рассмотрена следующая модель, разработанная в статье [7], основой которой служит классическая модель Друде для динамической электропроводности 2D-электронов:

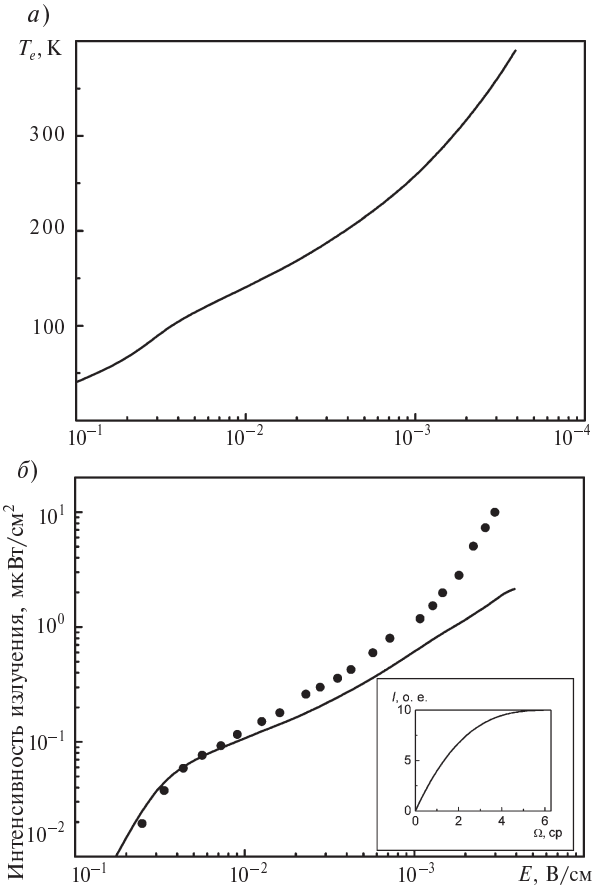


Рис. 3. Полевые зависимости рассчитанной электронной температуры (*а*) и интегральной интенсивности излучения дальнего ИК диапазона в телесном угле 0,25 ср (*б*): линии — расчет, символы — эксперимент. На вставке — угловая зависимость интенсивности излучения. Температура решетки 4,2 К

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 n_s \tau_m}{m_e} \frac{1}{1 - i\omega\tau_m}, \qquad (2)$$

где ω — круговая частота излучения дальнего ИК диапазона; e, m_e — заряд и эффективная масса электрона; τ_m — время релаксации, определяемое подвижностью 2D-электронов; $\tau_m(E) = m_e\mu(E)/e$.

Поглощательную способность (которая равна излучательной) тонкого (гораздо меньше длины волны излучения) проводящего слоя на гетерогранице AlGaN/GaN можно рассчитать на основе результатов статьи [8]; при нормальном падении ($\theta = 0$) она описывается соотношениями:

$$A(\omega) = \frac{4\,\mathrm{Re}\, y}{\left|1 + \sqrt{\kappa_s} + y\right|^2}; \quad y = \frac{4\pi}{c}\sigma(\omega), \qquad (3)$$

где $\kappa_s = 9{,}0$ — диэлектрическая проницаемость сапфировой подложки. Спектральная плотность теплового излучения 2D-электронов с эффективной температурой T_e описывается распределением Планка:

$$\frac{dI}{d\omega} = \int \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2 \left[\exp\left(\hbar\omega / k_B T_e\right) - 1\right]} \times$$

$$\times A(\omega)\cos\theta\, d\Omega, \qquad (4)$$

где $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ — элемент телесного угла.

В распределении (4) мы пренебрегаем θ-зависимостью поглощательной способности $A(\omega)$ и рассматриваем конфигурацию нормального падения ($\theta = 0$), поскольку эксперимент проводился в пределах малого телесного угла $\Omega = 0{,}25$ ср. Более общее рассмотрение показывает, что нелинейность зависимости интегральной интенсивности излучения $I = \int_{\Delta\omega} \frac{dI}{d\omega} d\omega$ от величины телесного угла становится существенной лишь при $\Omega > 1$ ср (см. вставку на рис. 3, *б*).

Спектр теплового излучения горячих 2D-электронов на гетероинтерфейсе AlGaN/GaN существенно отличается от спектра эмиссии абсолютно черного тела (АЧТ) при такой же температуре. У АЧТ поглощательная (излучательная) способность всегда равна 1, а у горячих электронов при частотах $f > 1$ ТГц она быстро убывает с частотой по закону $A(\omega) \propto \omega^{-2}$, что приводит к существенному спектральному сдвигу полосы излучения горячих 2D-электронов в длинновол-

новую область по сравнению с АЧТ. Расчет показывает, что при температурах горячих электронов от 100 до 400 K максимум в спектре излучения наших образцов соответствует длинам волн в интервале от 236 до 67 мкм.

Сигнал на фотоприемнике Ge:Ga моделировался с учетом его спектральной чувствительности $D(\omega)$:

$$U_{\mathrm{PD}} = S \int \left[I(\omega, T_e) - I(\omega, T) \right] D(\omega)\, d\omega, \qquad (5)$$

где S — площадь излучающей поверхности образца.

Величина U_{PD} характеризует интегральную интенсивность падающего на фотоприемник излучения (в пределах его полосы чувствительности). Сравнивая экспериментальную полевую зависимость сигнала фотоответа с расчетной (см. рис. 3, *б*), можно сделать вывод, что экспериментальные результаты хорошо качественно согласуются с рассмотренной моделью теплового излучения горячих электронов.

В то же время в электрических полях, превышающих 200 В/см, наблюдается значительное количественное расхождение эксперимента и теории (см. рис. 3, *б*), которое можно объяснить тем, что в теоретических расчетах не был учтен эффект накопления неравновесных оптических фононов. Действительно, время релаксации энергии уменьшается с ростом электрического поля, и, как показывает расчет, при $E \approx 200$ В/см становится сравнимым с временем жизни неравновесных оптических фононов — $5 \cdot 10^{-12}$ с [9]. В таких условиях начинается накопление неравновесных оптических фононов. Это, в частности, приводит к уменьшению скорости потери энергии, и, следовательно, к увеличению электронной температуры и соответствующему увеличению интенсивности излучения дальнего ИК излучения, по сравнению с рассмотренной выше упрощенной моделью.

Заметим, что если перейти от классической модели теплового излучения к квантовой модели эмиссии фотонов за счет непрямых оптических переходов 2D-электронов, то в сильных полях появляется дополнительный канал эмиссии излучения, который отсутствует в слабых. Речь идет об эмиссии фотонов $\hbar\omega$, соответствующих дальнему ИК диапазону, сопровождаемой поглощением неравновесных оптических фононов с энергией $\hbar\omega_0$. В этих переходах могут участвовать электроны, энергия которых ε удовлетворяет неравенству

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} - \varepsilon < \hbar\omega_0 - \hbar\omega.$$

Для исследованных образцов доля таких электронов — около 50 % (для сравнения укажем, что доля электронов, которые участвуют в процессах эмиссии фотонов с испусканием оптического фонона, составляет менее 1 %). Поэтому накопление неравновесных оптических фононов приводит к резкому нарастанию интегральной интенсивности терагерцового излучения, что наблюдается экспериментально в электрических полях свыше 200 В/см (см. рис. 3, *б*).

Работа поддержана ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы, АВЦП Минобрнауки РФ (2009–2011), Германо-Российской программой BMBF, грантами РФФИ и Правительства С.-Петербурга.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Starikov, E.** Terahertz generation in nitrides due to transit-time resonance assisted by optical phonon emission [Text] / E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gružinskis [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter.— 2008.— Vol. 20.— P. 384209-1— 384209-12.

2. **Fatimy, A.El.** AlGaN/GaN high electron mobility transistors as a voltage-tunable room temperature terahertz sources [Text] / A.El. Fatimy, N. Dyakonova, Y. Meziani [et al.] // J. Appl. Phys.— 2010.— Vol. 107.— P. 024504-1–024504-4.

3. **Shalygin, V.A.** Impurity breakdown and terahertz luminescence in *n*-GaN epilayers under external electric field [Text] / V.A.Shalygin, L.E. Vorobjev, D.A. Firsov [et al.] // J. Appl. Phys.— 2009.— Vol. 106.— P. 123523-1–123523-5.

4. **Shalygin, V.A.** Blackbody-like emission of terahertz radiation from AlGaN/GaN heterostructure under electron heating in lateral electric field [Text] / V.A. Shalygin, L.E. Vorobjev, D.A. Firsov, A.N. Sofronov, G.A.Melentyev [et al.] // J. App. Phys.— 2011.— Vol. 109.— Iss. 7. P. 073108-1–073108-6.

5. **Lundin, W.V.** MOVPE of device-oriented wide-band-gap III-N heterostructures [Text] / W.V. Lundin, A.V. Sakharov, A.F. Tsatsulnikov, V.M. Ustinov // Semicond. Sci. Technol.— 2011.— Vol. 26.– P. 014039-1–014039-7.

6. **Hirakawa, K.** Energy relaxation of two-dimensional electrons and the deformation potential constant in selectively doped AlGaAs/GaAs heterojunctions [Text] / K. Hirakawa, H. Sakaki //Appl. Phys. Lett.— 1986.— Vol. 49.— P. 889–891.

7. **Hirakawa, K.** Blackbody radiation from hot two-dimensional electrons in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heterojunctions [Text] / K. Hirakawa, M. Grayson, D.C. Tsui, C. Kurdak // Phys. Rev. B.— 1993.— Vol. 47.— P. 16651–16654.

8. **Bauer, S.** Optical properties of a metal film and its application as an infrared absorber and as a beam splitter [Text] / S. Bauer // Am. J. Phys.— 1992.— Vol. 60.— P. 257.

9. **Tsen, K.T.** Nonequilibrium electron distributions and phonon dynamics in wurtzite GaN [Text] / K.T. Tsen, R.P. Joshi, D.K. Ferry [et al.] // Appl. Phys. Lett.— 1996.— Vol. 68.— P. 2990–2992.

УДК 538.94

А.В. Бабичев, В.Э. Гасумянц, В.Ю. Бутко

ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В CVD-ГРАФЕНЕ САНТИМЕТРОВОГО РАЗМЕРА

Развитие беспроводных линий телекоммуникаций нового поколения является одной из базовых задач научных разработок в области практического использования новых материалов. Ключевой элемент таких линий — высокочастотный транзистор, увеличение частоты работы которого возможно за счет использования материалов с большей подвижностью носителей заряда. В настоящее время графен рассматривается как один из кандидатов для развития посткремниевой электроники, в частности, для создания приборов СВЧ-электроники.

Наиболее приближенным к практическим реализациям является графен, полученный химическим напылением из газовой фазы (Chemical Vapor Deposition) — CVD-графен. Это обусловлено высокой скоростью роста и масштабируемостью вплоть до метровых размеров, что чрезвычайно важно для практических применений. Отметим, что к настоящему времени именно на CVD-графеновом транзисторе достигнуто рекордное значение частоты отсечки (свыше 150 ГГц [1]). Этот результат был получен всего через год после разработки 100-гигагерцового графенового транзистора на подложке SiC [2], что свидетельствует о быстром совершенствовании CVD-технологии роста графена.

К настоящему моменту максимальные значения подвижности носителей заряда u достигнуты в графене, полученном методом скотч-тэйп (scotch-tape) — ScT-графен (около 10^6 см^2/В·с при $T = 4{,}2$ K [3]). Однако такие высокие значения получены на образцах монослойного графена размером 1 мкм и меньше, когда наблюдается баллистический транспорт. Помимо того, что указанным методом невозможно получить образцы миллиметрового размера, для достижения высоких значений u необходимо также контролировать число углеродных слоев, что вызывает существенные трудности с точки зрения практических применений. В [1] показано, что помимо значений подвижности на СВЧ производительность графенового транзистора сильно влияют механизмы рассеяния, связанные с взаимодействием между графеном и подложкой.

Исследование электронного транспорта, в частности температурных зависимостей удельного сопротивления ρ и коэффициента термоэдс S, является информативным методом при изучении механизмов рассеяния в исследуемом материале. Однако к настоящему моменту в литературе внимание акцентировано прежде всего на изучении зависимостей $\rho(V_g)$ и $S(V_g)$, где V_g — напряжение на затворе, позволяющих определить вклад носителей заряда различного типа в процесс проводимости и значение u. Корректное измерение зависимости $S(V_g)$ с развязкой измеряемого сигнала и напряжения V_g, вносящего паразитный вклад, возможно с использованием методики «лок-ин» (lock-in) — перепад температуры создается микронагревателем на спроцессированной микроструктуре путем пропускания переменного тока через нее, что позволяет развязать по частоте измеряемый сигнал напряжения термоэдс и напряжения на затворе. Данный метод применим для образцов микромасштабов,

но его невозможно использовать при исследовании коэффициента термоэдс сантиметровых образцов.

Несмотря на достигнутые практические результаты, полученные на CVD-графене, остается ряд открытых вопросов, в числе которых понимание механизмов рассеяния, определяющих процессы электронного переноса и вид температурных зависимостей кинетических коэффициентов. В процессе трансфера CVD-графена может происходить разупорядочение на интерфейсе, поэтому свойства графена, полученного данной методикой, могут существенно отличаться от свойств ScT-графена. Отметим, что ранее зависимости $S(T)$ на CVD-графене не измерялись.

В связи с изложенным, в данной работе проведено исследование электронного транспорта образцов CVD-графена размером 1×1 см, состоящих в среднем из четырех монослоев.

Технология получения

Исследованные в работе образцы CVD-графена были выращены в Graphene Laboratories Inc. (США) с использованием стандартной технологии, описанной в работе [4]. На подложке кремния толщиной 100 мкм был создан окисел толщиной 500 нм, далее испарением с помощью электронного луча был нанесен слой никеля толщиной 300 нм. Образцы были нагреты в кварцевой трубке до 1000 °C, и за счет пропускания газовой смеси аргон-водород-метан произведена диффузия атомов углерода в слой никеля. Путем быстрого охлаждения на поверхности никеля были образованы слои углерода, содержащие в среднем 4 монослоя. Процесс последующего трансфера CVD-графена был проведен нами по технологии, описанной в работе [5]. Образцы были покрыты слоем раствора полиметилметакрилата (ПММА) толщиной 300 нм и затем отожжены при 420 K для удаления растворителя. Далее они были помещены в 1 M раствор хлорного железа с целью вытравливания нижележащего слоя никеля. Для использованных структур слои графен/ПММА были отделены от подложки в результате травления в течение 24 часов. После промывки в деионизованной воде для удаления остатка хлорного железа слои графен/ПММА были перенесены на подложки (Si/SiO_2, стекло). Конечный этап переноса состоял в растворении слоя ПММА с помощью ацетона. Контакты для исследования кинетических коэффициентов были сделаны с помощью контактола на расстоянии 1–2 мм друг от друга. После формирования контактов был произведен отжиг образцов (путем их нагрева при пропускании тока) для удаления нежелательных примесей и приближения положения электрохимического потенциала μ к точке Дирака (K-точка зоны Бриллюэна).

Измерительная методика, экспериментальные результаты и их интерпретация

Удельное сопротивление измерялось стандартным четырехзондовым методом на переменном токе, а коэффициент термоэдс определялся по дифференциальной методике относительно медных электродов с последующей коррекцией на абсолютный коэффициент термоэдс меди. Температурные зависимости были исследованы в диапазоне $T = 77–300$ K. Расстояние в 1–2 мм между контактами к образцам было выбрано в качестве оптимального: с одной стороны, требовалось свести к минимуму влияние рассеяния носителей заряда с большой поверхности на вид кривой $\rho(T)$, с другой — нужно было иметь возможность создания большого перепада температуры вдоль структуры.

Для всех образцов зависимости $\rho(T)$ имеют неметаллический тип со слабым линейным ростом во всем исследованном температурном диапазоне (значения ρ увеличиваются на 7–9 % при уменьшении температуры от 300 до 77 K). Типичные значения ρ, полученные на исследованных образцах, составляют при комнатной температуре около $3 \cdot 10^{-5}$ Ом·см. Зависимость $\rho(T)$ для одного из исследованных образцов представлена на рис. 1. Согласно имеющимся данным, вид $\rho(T)$ графена определяется целым рядом факторов, таких как число слоев, энергетическое положение структуры (электронная или дырочная ветвь) относительно точки электронейтральности, механизмы рассеяния и дефектность структуры (определяемые в том числе и взаимодействием с подложкой); нелатеральность, связанная с несовершенством подложки или самой структуры, и др. Тем не менее, аналогичный полученному нами на CVD-графене вид зависимости $\rho(T)$ наблюдается и в ScT-графене, содержащем различное число слоев при малой концентрации носителей заряда [6–8].

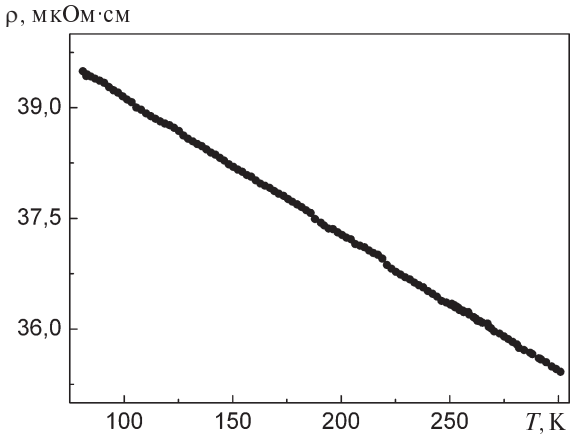


Рис. 1. Типичная зависимость $\rho(T)$ для исследованных образцов CVD-графена

Следует отметить, что при формировании структуры нами использовался ПММА; это может приводить к преобладанию в исследованных образцах рассеяния на ионизованных примесях, образовавшихся в процессе трансфера. Данный тип рассеяния позволяет описать полученный в эксперименте неметаллический вид $\rho(T)$, что согласуется с результатами теоретических расчетов [9]. Более слабый рост значений ρ при уменьшении температуры в наших образцах, по сравнению со случаем ScT-графена [10], может быть связан с особенностями структуры зонного спектра CVD-графена.

При исследовании транспортных свойств материала толщиной в несколько атомарных слоев существенно возрастает роль дефектов структуры, что может приводить к отклонению от приближения слабого поля. С целью проверки применимости данного приближения для образцов CVD-графена нами были измерены напряжения термоэдс при $T = 300$ K при различных перепадах температуры ΔT — от 0,1 до 20 K, что соответствует градиенту температуры от 1 до 100–200 K/см. Полученная линейная зависимость $V(\Delta T)$ во всем диапазоне (рис. 2) подтверждает применимость приближения слабого поля. Для дальнейших исследований был выбран перепад $\Delta T = 10$ K.

Типичный вид зависимости $S(T)$ для CVD-графена представлен на рис. 3. Она имеет вид, характерный для металла с дырочным типом проводимости. В исследованном диапазоне температур пика, связанного с эффектом фононного увлечения, не наблюдается. Отметим, что согласно данным для структур с дополнительным затвором [11–13], наклон зависимостей $S(T)$ определяется уровнем электрохимического потенциала μ. Полученная нами линейность $S(T)$ свидетельствует о малом изменении величины μ во всей исследованной области температур.

Типичные комнатные значения коэффициента термоэдс составляют около 10 мкВ/K, что согласуется с ранее полученными величинами для эпитаксиального и ScT-графена [13–15]. Отметим, что металлический вид $S(T)$, аналогичный полученному в эксперименте, обнаружен ранее и на ScT-графене с различным числом слоев [11, 13]. В то же время на эпитаксиальных образцах графена, выращенных на подложке SiC, наблюдается сильная нелинейность зави-

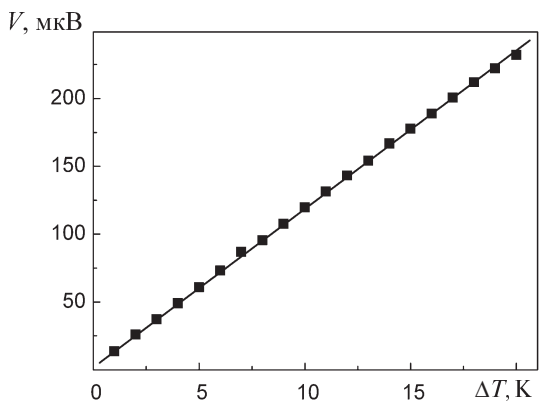


Рис. 2. Зависимость напряжения термоэдс от перепада температуры при $T = 297$ K; $S = 11{,}4$ мкВ/K

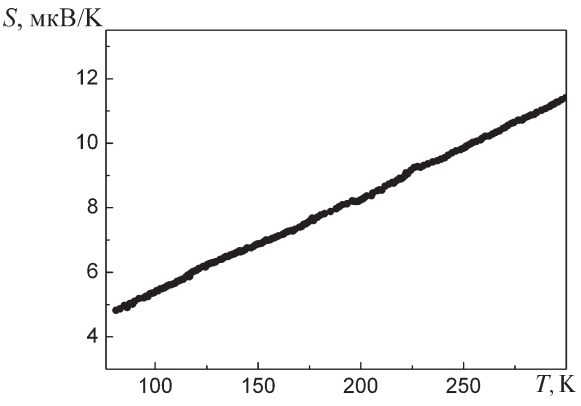


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента термоэдс на одном из исследованных CVD-образцов графена; $\Delta T = 10$ K

симости $S(T)$ [15]. Таким образом, именно CVD-графен наиболее близок по своим свойствам к ScT-графену, демонстрирующему наилучшие свойства с точки зрения практических применений.

Известно, что в зависимости от положения электрохимического потенциала μ относительно точки электронейтральности коэффициент термоэдс в ScT-графене может иметь различный знак [11–15]. Полученные нами положительные значения S, вероятно, связаны с использованием ПММА в процессе трансфера, что привело к p-легированию образцов. Данное предположение согласуется со сделанным ранее выводом о влиянии ионизованных примесей на вид зависимости $\rho(T)$. Тем не менее, экспериментальное наблюдение неметаллического вида $\rho(T)$, но металлического вида $S(T)$ на одних и тех же образцах является достаточно необычным, и установление однозначных причин проявления данной особенности в электронном транспорте графена требует проведения дальнейших исследований.

Таким образом, в работе исследован электронный транспорт на CVD-образцах графена сантиметрового размера, при этом впервые получены данные о поведении коэффициента термоэдс. Сделано предположение, что обнаруженный вид температурных зависимостей $\rho(T)$ и $S(T)$ объясняется влиянием ионизованных примесей, образующихся в процессе трансфера графена с использованием ПММА. Полученные экспериментальные результаты соответствуют данным для ScT-графена с высокой подвижностью, что позволяет говорить о перспективности использования CVD-технологии в качестве метода синтеза образцов графена, пригодных для практических применений.

Авторы благодарят Е. Полякову (сотрудника Graphene Laboratories Inc.) за предоставленные образцы CVD-графена, а также Ю.А. Кумзерова, А.Ю. Егорова, И. П. Сошникова, Е.В. Никитину и М. М. Кулагина за помощь в проведении исследований. Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 10-02-00853-а, Collaborative European Project EU-RU.NET, а также проекта СПбНЦ за 2011 год.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Wu, Y.** High-frequency, scaled graphene transistors on diamond-like carbon [Текст] / Y. Wu, Y.-M. Lin, A.A. Bol [et al.] // Nature.— 2011.— Vol. 472.— P. 74–78.

2. **Lin, Y.-M.** 100-GHz transistors from wafer-scale epitaxial graphene [Текст] / Y.-M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K.A. Jenkins [et al.] // Science.— 2010.— Vol. 327— No. 5966.— P. 662.

3. **Gorbachev, R.V.** Limits on charge carrier mobility in suspended graphene due to flexural phonons [Текст] / R.V. Gorbachev, D.C. Elias, K.S. Novoselov [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 2010.— Vol. 105.— P. 266601 (4 p.).

4. **Kim, K.S.** Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes [Текст] / K.S. Kim, Y. Zhao, H. Jang [et al.] // Nature.— 2009.— Vol. 457.— P. 706–710.

5. **Li, X**, Transfer of large-area graphene films for high-performance transparent conductive electrodes [Текст] / X. Li, Y. Zhu, W. Cai [et al.] // Nano Lett.— 2009.— Vol. 9.— No. 12.— P. 4359–4363.

6. **Lee, S.** Hot electron transport in suspended multilayer graphene [Текст] / S. Lee, N. Wijesinghe, C. D.-Pinto [et al.] // Phys. Rev. B.— 2010.— Vol. 82.— P. 045411 (5 p.).

7. **Taychatanapat, T.** Electronic transport in dual-gated bilayer graphene at large displacement fields [Текст] / T. Taychatanapat, P. Jarillo-Herrero // Phys. Rev. Lett.— 2010.— Vol. 105.— P. 166601 (4 p.).

8. **Liu, Y.** Effect of magnetic field on the electronic transport in trilayer graphene [Текст] / Y. Liu, S. Goolaup, C. Murapaka // ACS Nano.— 2010.— Vol. 4.— No. 12.— P. 7087–7092.

9. **Hwang, E.H.**, Carrier transport in two-dimensional graphene layers [Текст] / E.H. Hwang, S. Adam, S. Das Sarma // Phys. Rev. Lett.— 2007.— Vol. 98.— P. 186806 (4 p.).

10. **Craciun, M.F.** Trilayer graphene is a semimetal with a gate-tunable band overlap [Текст] / M.F. Craciun, S. Russo, M. Yamamoto [et al.] // Nature Nanotechnology.— 2009.— Vol. 4.— P. 383–388.

11. **Zuev, Y.M.** Thermoelectric and magnetothermoelectric transport measurements of graphene [Текст] / Y.M. Zuev, W. Chang, P. Kim // Phys. Rev. Lett.— 2009.— Vol. 102.— P. 096807 (4 p.).

12. **Checkelsky, J.G.** Thermopower and Nernst effect in graphene in a magnetic field [Текст] / J.G. Checkelsky, N.P. Ong // Phys. Rev. B.— 2009.— Vol. 80.— P. 081413(R) (4 p.).

13. **Wang, C.R.** Transverse thermoelectric conductivity of bilayer graphene in the quantum Hall regime [Текст] / C.R. Wang, W.S. Lu, W.-L. Lee // Phys. Rev. B.— 2010.— Vol. 82.— P. 121406(R) (4 p.).

14. **Nam, S.-G.** Thermoelectric transport of massive Dirac fermions in bilayer graphene [Текст] / S.-G. Nam, D.-K. Ki, H.-J. Lee // Phys. Rev. B.— 2010.— Vol. 82.— P. 245416 (5 p.).

15. **Wu, X.** Thermoelectric effect in high mobility single layer epitaxial graphene [Текст] / X. Wu, Y. Hu, M. Ruan [et al.] // arXiv:1104.1248v1 [cond-mat.mes-hall].— 2011.— (5 p.).

УДК 538.945

О.С. Комарова, О.А. Мартынова, П.В. Шорохов, В.Э. Гасумянц

МОДИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ В СИСТЕМЕ $Bi_2Sr_2CaCu_2O_Y$

Прошло уже 25 лет с момента открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), но несмотря на большой интерес и многочисленные исследования ответы на важнейшие вопросы физики ВТСП до сих пор не найдены. Среди них — определение принципиальных особенностей строения энергетического спектра ВТСП-соединений, его конкретных параметров в материалах различных систем, характера и механизмов их изменения при варьировании состава, а также связи между их значениями и величиной критической температуры T_c. В то же время очевидно, что наличие надежной информации по этим вопросам крайне необходимо для понимания как природы нормального состояния в данных материалах, так и физических причин реализации в них эффекта сверхпроводимости при столь высоких температурах. Именно по этой причине в литературе имеется большое число работ, посвященных попыткам как теоретического, так и экспериментального определения основных особенностей строения энергетического спектра ВТСП-соединений различных систем.

В качестве метода изучения структуры энергетического спектра может быть использовано экспериментальное исследование и количественный анализ электронных явлений переноса в образцах с направленными изменениями состава. Последнее достигается путем введения в решетку различных неизовалентных примесей, оказывающих влияние на свойства как нормального, так и сверхпроводящего состояния в ВТСП различных систем. Для описания температурных зависимостей кинетических коэффициентов в ВТСП-материалах в нормальном состоянии было разработано большое количество моделей, содержащих различные по физическому смыслу параметры и приводящих в ряде случаев к принципиально разным выводам об особенностях строения энергетического спектра и характере его модификации под действием легирования. По этой причине выбор модели, наиболее адекватно описывающей особенности электронного транспорта, является одним из актуальных вопросов физики ВТСП-соединений. В данной работе мы подробно рассмотрим и сравним результаты, полученные на основании анализа температурных зависимостей коэффициента термоэдс $S(T)$ в рамках трех моделей, наиболее часто используемых в литературе для описания поведения этого кинетического коэффициента в ВТСП различных систем [1–3]. Целью наших исследований было, во-первых, проверить применимость этих моделей к описанию электронного транспорта в ВТСП висмутовой системы при различных типах и диапазонах легирования и, во-вторых, получить надежные данные о параметрах нормального состояния и характере их изменения под действием легирования.

Модели, используемые для анализа экспериментальных данных

Как уже отмечалось во введении, в литературе были предложены различные модели электронного транспорта в ВТСП-материалах. Мы выделили три из них, не только наиболее часто используемые для анализа экспериментальных данных, но и содержащие ряд сходных по физическому смыслу параметров.

Первая из выбранных нами моделей — двухзонная модель Ксина [1]. Она была предложена и успешно применена для описания экспериментальных данных для различных серий образцов бесцепочечных ВТСП (висмутовая и таллиевая системы). В рамках этой модели предполагается, что в энергетическом спектре вблизи уровня Ферми E_F существуют две зоны, одна из которых вносит вклад в дырочную проводимость металлического типа, а вторая обеспечивает электронную проводимость полупроводникового типа. В рамках этой модели коэффициент термоэдс описывается выражением

$$S = AT + (B\lambda + CT)\exp(-\lambda/T),$$

где A, B, C, λ — подгоночные параметры модели.

При этом четким физическим смыслом обладают только два из них: параметр A определяет вклад в проводимость подвижных носителей заряда, т. е. его значение зависит от их концентрации (чем больше данный параметр, тем меньше концентрация дырок или, соответственно, больше концентрация электронов), а параметр $\lambda = E_g/2k_B$ — ширину «полупроводниковой» запрещенной зоны E_g (k_B — постоянная Больцмана).

Вторая модель — это двухзонная модель с дополнительным линейным слагаемым [2]. Она применялась для анализа экспериментальных данных, полученных для ВТСП висмутовой системы. Ее основное предположение — это наличие вблизи уровня Ферми узкого «резонансного» пика плотности состояний на фоне широкой зоны; при этом предполагается, что состояния на краях этого пика являются локализованными. Коэффициент термоэдс описывается выражением

$$S = \frac{AT}{B^2 + T^2} + \alpha T,$$

где $A = 2\dfrac{E_F - E_0}{|e|}$; $B = 3\dfrac{(E_F - E_0)^2 + \Gamma^2}{\pi^2 k_B^2}$; e — заряд электрона; E_0, Γ — центр и полуширина пика плотности состояний, соответственно, а величина $E_F - E_0$ определяет положение уровня Ферми относительно середины этого пика и, соответственно, число носителей заряда. Линейный член αT описывает вклад в коэффициент термоэдс носителей заряда, находящихся в стандартной металлической зоне.

Наконец, на основе предположения о наличии в энергетическом спектре ВТСП-материалов узкой проводящей зоны или узкого пика плотности состояний была разработана феноменологическая модель узкой зоны [3]. Данная модель неоднократно была успешно применена для описания температурных зависимостей коэффициентов термоэдс, Холла и Нернста — Эттингсгаузена в ВТСП различных систем [4]. В рамках этой модели используется аппроксимация функций плотности состояний $D(E)$ и дифференциальной проводимости $\sigma(E)$ прямоугольниками различной ширины, что позволяет получить для коэффициента термоэдс следующее выражение [3]:

$$S = -\frac{k_B}{e}\left\{\frac{W_\sigma^*}{\operatorname{sh} W_\sigma^*}\left[\exp(-\mu^*) + \operatorname{ch} W_\sigma^* - \right.\right.$$

$$-\frac{1}{W_\sigma^*}(\operatorname{ch}\mu^* + \operatorname{ch} W_\sigma^*)\times$$

$$\left.\left.\times \ln\frac{\exp(\mu^*) + \exp(W_\sigma^*)}{\exp(\mu^*) + \exp(-W_\sigma^*)}\right] - \mu^*\right\},$$

где $W_D^* = \dfrac{W_D}{2k_B T}$; $W_\sigma^* = \dfrac{W_\sigma}{2k_B T}$; $\mu^* = \dfrac{\mu}{k_B T} =$

$= \ln\dfrac{\operatorname{sh}(FW_D^*)}{\operatorname{sh}[(1-F)W_D^*]} - bW_D^*$; μ — уровень электрохимического потенциала.

Модель содержит четыре основных параметра: полная эффективная ширина зоны W_D; эффективная ширина зоны «по проводимости» W_σ, степень заполнения зоны электронами F, равная отношению числа электронов к числу состояний в зоне; и степень асимметрии зоны b, характеризующая несовпадение по энергии центров прямоугольников, аппроксимирующих функции $D(E)$ и $\sigma(E)$. Отметим, что изменение при легировании параметра C, равного отношению W_σ/W_D, в рамках данной модели характеризует изменение степени локализации зонных состояний (чем меньше значение параметра C, тем большая часть состояний является локализованной). В случае симметричной зоны положение уровня Ферми относительно ее середины может быть вычислено по формуле

$$E_F = (F - 1/2)W_D,$$

а при наличии ее асимметрии положение E_F относительно середины проводящей полосы (т. е. прямоугольника, аппроксимирующего функцию $\sigma(E)$), определяется как

$$E_F = (F - 1/2)W_D - bW_D.$$

Таким образом, выбранные модели основаны на различных базовых предположениях о строении энергетического спектра ВТСП-материалов, но в то же время содержат ряд параметров, имеющих сходный физический смысл. Это позволяет на основе сравнительного анализа изменения значений этих параметров получить более надежную информацию об особенностях модификации свойств нормального состояния в зависимости от уровня и типа легирования, что

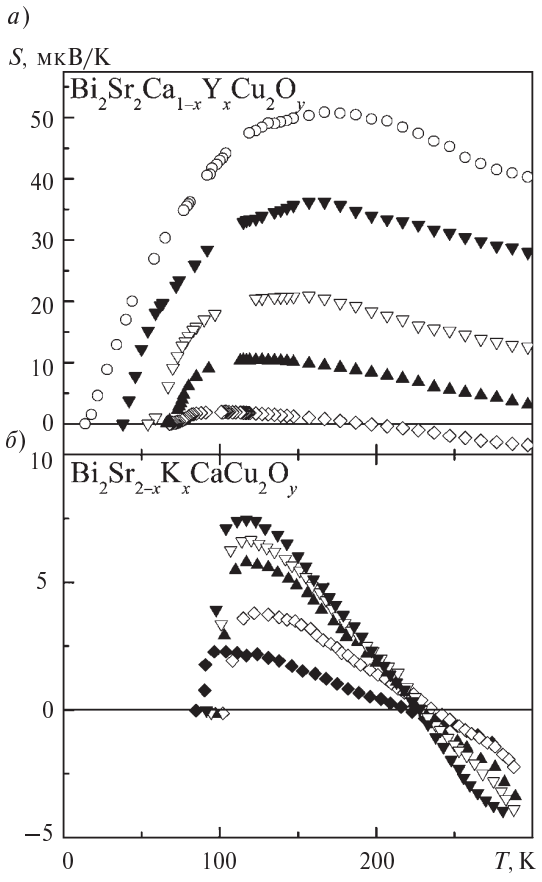


Рис. 1. Температурные зависимости коэффициента термоэдс для систем $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ (*а*) и $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ (*б*) при различных значениях *x*: 0 (♦); 0,1 (◇); 0,2 (▲); 0,3 (▽); 0,4(▼); 0,5(○)

и определило выбор перечисленных моделей для проведения запланированных исследований.

Исходные данные для анализа

Образцы составов $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ (x = = 0–0,5) [5] и $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ (x = 0–0,4) [6] были изготовлены авторами указанных работ по стандартной керамической технологии и являлись однофазными. Полученные температурные зависимости коэффициента термоэдс для всех образцов приведены на рис. 1. Для системы $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ в случае слаболегированных образцов наблюдаются протяженный участок практически линейного падения коэффициента термоэдс с ростом температуры и наличие выраженного максимума на кривой $S(T)$ при температуре выше температуры сверхпроводящего перехода. С увеличением уровня легирования линейность зависимостей $S(T)$ постепенно пропадает, а максимум на кривой $S(T)$ размывается и смещается в область более высоких температур. При этом значения коэффициента термоэдс S_{300} при комнатной температуре сильно возрастают с увеличением концентрации иттрия. Для системы $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ увеличение содержания калия в образцах ведет к аномально сильному увеличению наклона зависимостей $S(T)$, при этом значение S_{300} изменяется очень незначительно и лежит в диапазоне –(1,5–4,0) мкВ/К.

Для всех образцов были определены значения критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c. В системе $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ значения T_c монотонно уменьшаются с ростом содержания примеси (от T_c = 85 К при x = 0 до T_c = = 30 К при x = 0,5). В системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ с введением калия значение критической температуры уменьшается достаточно слабо: от T_c = = 102 К при x = 0,1 до T_c = 92 К при x = 0,4.

Таким образом, в системе $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ наблюдается сильное и монотонное изменение параметров нормальной фазы и сверхпроводящих свойств с ростом x, характерное для влияния большинства неизовалентных замещений в ВТСП различных систем. Это дает основание полагать, что при анализе электронного транспорта в данной системе можно получить информацию об общих тенденциях в изменении параметров энергетического спектра под действием легирования, характерных для ВТСП висмутовой системы. В системе же $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ увеличение содержания калия ведет к нетриви-

альной трансформации зависимостей $S(T)$, а также слабому изменению значений критической температуры, что указывает на наличие определенной специфики в механизме влияния данной примеси на свойства висмутовых ВТСП.

Анализ экспериментальных данных

Нами был проведен количественный анализ температурных зависимостей коэффициента термоэдс в рамках трех выбранных моделей, определены значения всех модельных параметров и проанализирован характер их изменения под действием легирования. По качеству описания экспериментальных зависимостей в случае обеих серий образцов двухзонная модель Ксина [1] уступает двум другим. Модель [2] хорошо описывает экспериментальные данные для образцов с малым уровнем легирования (при $x = 0$–$0{,}3$ в $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ и при $x = 0$–$0{,}2$ в $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$), а при больших x наблюдается сильное рассогласование экспериментальных и расчетных зависимостей в области максимума на кривой $S(T)$. Модель узкой зоны [3] хорошо описывает экспериментальные кривые во всем температурном диапазоне для всех концентраций примесей. В качестве примера на рис. 2 показаны варианты согласования экспериментальных и расчетных зависимостей для двух образцов системы $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ с $x = 0{,}2$ и $0{,}5$. Полученные нами значения модельных параметров, соответствующие наилучшей расчетной кривой $S(T)$ для каждого образца, представлены в табл. 1–3.

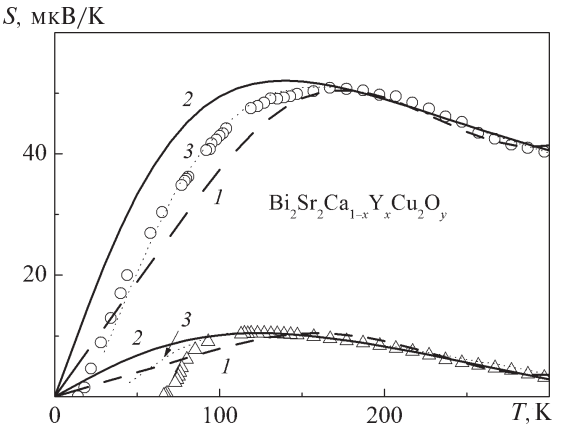


Рис. 2. Пример сравнения расчетных зависимостей $S(T)$ (линии) с экспериментом (символы) в рамках используемых моделей: *1* — [1], *2* — [2], *3* — [3]. Система $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ при $x = 0{,}2$ (△); $0{,}5$ (○)

Рассмотрим полученные результаты. Во всех трех моделях есть параметры, характеризующие количество носителей заряда в зоне — A, $(E_0 - E_F)$ и F, соответственно; при этом в рамках модели [3] также может быть вычислено положение уровня Ферми относительно середины зоны. Как видно из рис. 3, в системах $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ и $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ количество электронов в зоне возрастает согласно результатам, полученным в рамках всех трех моделей. В системе $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ этот факт может быть легко объяснен на основе простых кристаллохимических соображений. Действительно, поскольку валентность иттрия (3+) больше, чем валентность

Таблица 1

Результаты обработки экспериментальных данных в рамках модели [1]

x	A, мкВ/К	B, мкВ/К^2	C, мкВ/К^2	E_g, эВ
$Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$				
0,1	0,0157	−1,5000	4,5190	0,1935
0,2	0,0790	−1,8990	4,4390	0,1727
0,3	0,1560	−2,3540	4,8000	0,1565
0,4	0,2710	−2,9480	5,4230	0,1494
0,5	0,3789	−3,2550	5,1790	0,1425
$Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$				
0	0,0161	−1,3700	4,3630	0,2049
0,1	0,0259	−1,2440	3,2270	0,1908
0,2	0,0455	−1,1850	2,3800	0,1634
0,3	0,0650	−1,2000	2,0400	0,1311
0,4	0,0722	−1,2390	2,0320	0,1287

Таблица 2

Результаты обработки экспериментальных данных в рамках модели [2]

x	A, мкВ	B, К	α, мкВ/К^2	$E_F - E_0$, мэВ	Г, мэВ
$Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$					
0,1	3249	214	–0,040	1,6	33,4
0,2	4962	164	–0,034	2,5	25,5
0,3	6966	146	–0,023	3,5	22,6
0,4	10086	132	–0,004	5,0	20,0
0,5	14046	137	0,005	7,0	20,2
$Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$					
0	2601	198	–0,031	1,3	30,9
0,1	3798	191	–0,043	1,9	29,8
0,2	6015	190	–0,072	3,0	29,6
0,3	7506	201	–0,084	3,8	31,2
0,4	9090	215	–0,091	4,5	33,3

Таблица 3

Результаты обработки экспериментальных данных в рамках модели [3]

x	F	W_D, мэВ	W_σ, мэВ	C	b	E_F, мэВ
$Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$						
0,1	0,4731	115	30,4	0,264	–0,029	0,3
0,2	0,4780	155	37,2	0,240	–0,035	2,0
0,3	0,4815	250	44,8	0,179	–0,038	4,9
0,4	0,4896	310	52,7	0,170	–0,042	9,8
0,5	0,5001	395	61,9	0,157	–0,040	15,8
$Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$						
0	0,4717	90	39,1	0,434	–0,034	0,5
0,1	0,4466	96	50,3	0,524	–0,065	1,1
0,2	0,4297	89	45,3	0,509	–0,088	1,6
0,3	0,4030	100	45,9	0,459	–0,115	1,8
0,4	0,4168	79	46,1	0,583	–0,110	2,1

замещаемого им кальция (2+), увеличение уровня легирования должно приводить к росту числа свободных электронов. В системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ соотношение валентностей замещающего и замещаемого элементов обратное ($K^{1+} \rightarrow Sr^{2+}$), и причина обнаруженного роста E_F может быть объяснена только в рамках модели [3]. Согласно полученным данным, с ростом содержания калия степень заполнения зоны в этой системе уменьшается, но одновременно происходит сильное увеличение асимметрии проводящей зоны, в результате чего значение уровня Ферми увеличивается, хотя и остается очень близким к середине зоны ($E_F = 0–2$ мэВ).

Модели [2] и [3] содержат также параметры, характеризующие долю делокализованных состояний — Г и C. В системе $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ их изменения качественно аналогичны — интервал (в модели [2]) или доля (в модели [3]) делокализованных состояний уменьшаются с ростом x (рис. 4). При этом согласно модели [3] одновременно происходит сильное расширение зоны.

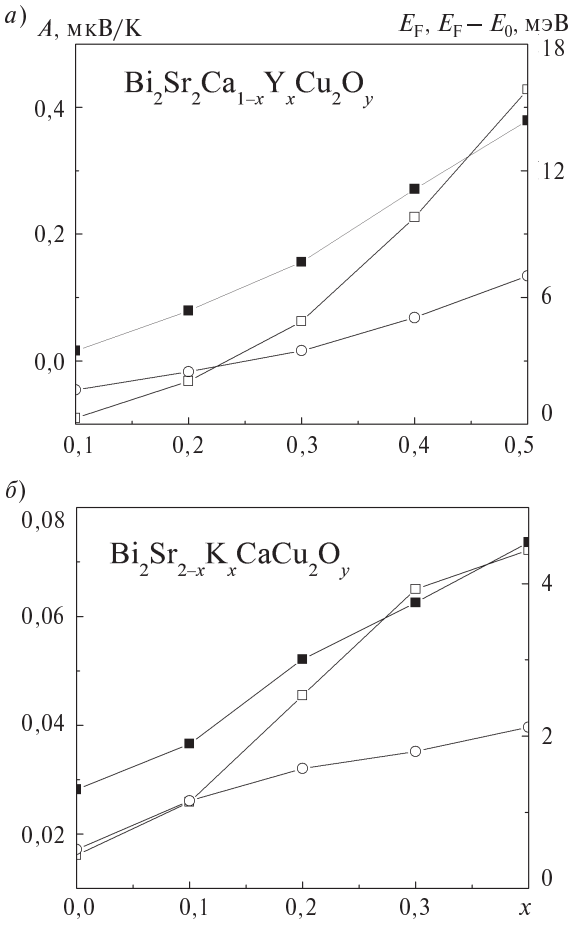


Рис. 3. Зависимость модельных параметров A (-■-), ($E_F - E_0$) (-○-), E_F (-□-), характеризующих концентрацию носителей заряда, от состава исследованных систем $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ (*а*) и $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ (*б*)

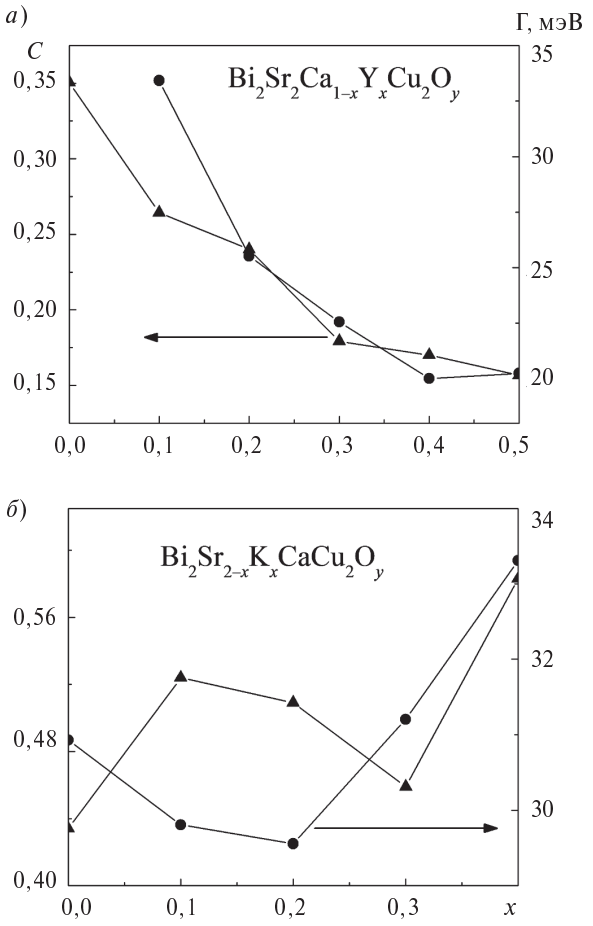


Рис. 4. Зависимость модельных параметров C (-▲-), Г (-●-), характеризующих степень делокализации носителей заряда, от состава исследованных систем (те же составы, что на рис. 3)

Два этих факта свидетельствуют о реализации механизма андерсоновской локализации состояний. Таким образом, эффект дополнительного разупорядочения решетки $Bi_2Sr_2CaCu_2O_y$, возникающего при введении неизовалентной примеси в позицию кальция, играет определяющую роль в трансформации энергетического спектра данного соединения. В системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ доля делокализованных состояний согласно обеим моделями изменяется немонотонно, в целом слабо возрастая с ростом x.

Обсудим полученные данные о трансформации параметров энергетического спектра и их влияние на экспериментально наблюдаемые свойства исследованных соединений. В системе $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ сильное расширение зоны с ростом x (ширина зоны возрастает в 4 раза при переходе от образца с $x = 0$ к образцу с $x = 0{,}5$) и смещение E_F вверх по шкале энергии приводят к уменьшению значения функции плотности состояний $D(E_F)$ на уровне Ферми, что в свою очередь вызывает последовательное уменьшение значений критической температуры. В системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$, напротив, слабое изменение ширины проводящей зоны с ростом уровня легирования ($W_D = 80-100$ мэВ для всех образцов) и практически постоянное значение E_F приводят к тому, что значения $D(E_F)$ и, соответственно, T_c уменьшаются незначительно. Нетривиальность зависимостей $S(T)$ в этой системе вызвана появлением сильной асимметрии зоны (степень асимметрии изменяется по закону $b \approx -0{,}25x$). Можно предположить, что обнаруженный резкий рост отрицательных значений b с увеличением содержа-

ния калия в $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ связан со специфическим воздействием, оказываемым данной примесью на структуру энергетического спектра. Поскольку примесь калия в данной системе по своему зарядовому состоянию аналогична примеси кальция в позиции иттрия в системе $YBa_2Cu_3O_y$ (валентность кальция (+2) меньше, чем у иттрия (+3)), можно предположить, что калий, так же как и кальций в иттриевой системе [7], вносит дополнительные состояния в проводящую зону. Однако несмотря на то, что в системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ степень асимметрии при легировании изменяется значительно сильнее, чем в легированных кальцием образцах иттриевых ВТСП (для которых $b \approx -0{,}12x$, где x — содержание кальция [7]), каких-либо специфических особенностей в динамике уровня Ферми в системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ не наблюдается, в отличие от случая замещения $Ca \rightarrow Y$ в иттриевых ВТСП [8]. Это свидетельствует о том, что дополнительный пик калиевых состояний в энергетическом спектре $Bi_2Sr_2CaCu_2O_y$ формируется ближе к краю проводящей зоны.

Итак, в работе были проанализированы экспериментальные зависимости коэффициента термоэдс для систем $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ и $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ в рамках трех различных моделей электронного транспорта. На основе проведенного сравнительного анализа полученных результатов можно сделать следующие выводы.

1. Наилучшее согласие экспериментальных и расчетных зависимостей для образцов обеих систем различного состава достигается в рамках модели узкой зоны. Двухзонная модель Ксина во всех случаях дает более сильное расхождение расчетных и экспериментальных данных, а двухзонная модель с дополнительным линейным по температуре слагаемым хорошо описывает зависимости $S(T)$ только при малом уровне легирования. Таким образом, две последние модели ограниченно применимы для анализа экспериментальных данных в легированных висмутовых ВТСП.

2. Несмотря на существенные различия, рассмотренные модели электронного транспорта содержат ряд параметров, имеющих сходный физический смысл. Для обеих исследованных систем выявлены качественно или количественно одинаковые изменения этих параметров с ростом содержания примесей; это позволяет получить надежные данные о характере модификации параметров нормального состояния под действием легирования.

3. В системе $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ количество электронов в зоне возрастает, а число делокализованных состояний уменьшается с ростом содержания иттрия. В системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ введение калия в решетку приводит к увеличению концентрации электронов в зоне и слабому возрастанию числа делокализованных состояний.

4. Сделано предположение о том, что калий в системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ вносит дополнительные состояния в проводящую зону. Анализ динамики уровня Ферми в сравнении с данными для иттриевых ВТСП позволяет сделать вывод, что пик калиевых состояний формируется вблизи края проводящей зоны.

Работа выполнена в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (г/к № П1237).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Xin, Y.** Thermoelectric power of the thallium-based superconductor $Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10-\delta}$ [Текст] / Y. Xin, K.W. Wong, C.X. Fan [et al.] // Phys. Rev. B.— 1993.— Vol. 48.— № 1.— P. 557–561.

2. **Forro, L.** Thermoelectric power of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ single crystals with varying oxygen stoichiometry [Текст] / L. Forro, J. Lukatela, B. Keszei // Solid State Commun.— 1990.— Vol. 73.— № 7.— P. 501–505.

3. **Gasumyants, V.E.** The electron transport phenomena in Y-based HTSC's and their analysis on the basis of phenomenological narrow-band theory. The band structure transformation with oxygen content and substitution for Cu [Текст] / V.E. Gasumyants, V.I. Kaidanov, E.V. Vladimirskaya // Physica C.— 1995.— Vol. 248.— № 3–4.— P. 255–275.

4. **Gasumyants, V.E.** Analysis of the electron transport phenomena in HTSC-materials as the method of studying the band spectrum and its transformation under doping by different impurities [Текст] / V.E. Gasumyants // Advanced in Condensed Matter and Materials Research. Edited by F.Gerard.— New York: Nova Science Publishers, 2001.— Vol. 1.— P. 135–200.

5. **Gaojie, X.** Microstructure, localized Cu^{2+} spins, and transport properties of $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_{8+\delta}$ [Текст] / X. Gaojie, P. Qirong, D. Zejun

[et al.] // Phys. Rev. B.— 2000.— Vol. 62.— № 13.— P. 9172–9178.

6. **Sekhar, M.C.** Thermoelectric power in $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ [Текст] / M.C. Sekhar, S. Suryanarayana // Physica C.— 2004.— Vol. 415.— P. 209–219.

7. **Гасумянц, В.Э.** О возможности внесения кальцием дополнительных состояний в проводящую зону при легировании $YBa_2Cu_3O_y$ [Текст] / В.Э. Гасумянц, Е.В. Владимирская, М.В. Елизарова [и др.] // ФТТ.— 1998.— Т. 40.— С. 2145–2152.

8. **Комарова, О.С.** Влияние легирования кальцием на структуру проводящей зоны и динамику уровня Ферми в системе $Y_{0,75-x}Ca_xPr_{0,25}Ba_2Cu_3O_y$ [Текст] / О.С. Комарова, О.А Мартынова, В.Э. Гасумянц // Научно-технич. ведом. СПбГПУ. Физико-математические науки.— 2009.— Т. 88.— № 4.— С. 66–73.

УДК 538.935

Н.Т. Баграев, Е.С. Брилинская, Д.С. Гец, Л.Е. Клячкин, А.М. Маляренко, В.В. Романов

КВАНТОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОДОЛЬНОГО ТРАНСПОРТА ДЫРОК В КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Эффекты Шубникова — де Гааза (ШдГ) и де Гааза — Ван Альфена (дГВА) были открыты в 1930 году при исследовании продольного транспорта носителей тока в поперечном магнитном поле в пленках висмута [1–3]. При этом были обнаружены периодические осцилляции магнетосопротивления [2] и статической магнитной восприимчивости [3] в зависимости от обратной величины внешнего магнитного поля. Причиной возникновения этих осцилляций является квантование продольного сопротивления вследствие формирования дискретного спектра уровней Ландау из непрерывного спектра состояний электронного или дырочного газа:

$$E_\nu = h\omega_c\left(\nu+\frac{1}{2}\right),$$

где ν — номер уровня Ландау; ω_c — циклотронная частота, $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ (m^* — эффективная масса носителя) [1].

Число заполненных уровней Ландау $\nu = \frac{n_e}{2eB/h}$ зависит от величины внешнего магнитного поля и плотности носителей тока, которая определяет позицию уровня Ферми

$$E_F = \frac{(hk_F)^2}{2m^*},$$

где k_F — фермиевское значение волнового числа.

При увеличении напряженности внешнего магнитного поля число заполненных уровней Ландау уменьшается, что сопровождается увеличением заполнения каждого из них при фиксированной позиции уровня Ферми. Каждый раз, когда уровень Ландау пересекает уровень Ферми, наблюдается очередной пик в значениях продольного магнетосопротивления и статической магнитной восприимчивости, совокупность которых формирует осцилляции ШдГ и дГВА. В свою очередь минимумы значений магнетосопротивления в осцилляциях ШдГ и дГВА наблюдаются при позиции уровня Ферми между уровнями Ландау.

Интерес к исследованиям осцилляций ШдГ и дГВА возрос после их обнаружения в низкоразмерных системах, например таких как граница раздела $Si–SiO_2$ [4] и гетеропереходы A^3B^5 [5], а также в наноструктурах кремния [6] и фторида кадмия [7] в сверхпроводящих оболочках. В этом случае энергетические позиции уровней размерного квантования определяют спектр уровней Ландау, который отражается в квантовании характеристик продольного транспорта двумерных носителей тока. Если принимать во внимание значение номера верхнего заполненного уровня Ландау $\nu = \frac{n_e}{2eB/h}$, то можно определять плотность двумерных носителей тока не только из полевой холловской зависимости, но и из пози-

ций максимумов этих осцилляций. По данным наблюдений осцилляций Шубникова — де Гааза и де Гааза — Ван Альфена можно оценить плотность носителей, если исходить из их положения в обратном магнитном поле. Плотность носителей может быть вычислена с помощью следующей формулы:

$$n_e = \frac{2e}{h}\frac{1}{(1/B_1)-(1/B_2)},$$

где B_1, B_2 — величины магнитного поля, соответствующие соседним пикам осцилляций ШдГ и дГВА

$$\left(\nu_1 - \nu_2 = \frac{n_e}{2eB_1/h} - \frac{n_e}{2eB_2/h} = 1\right).$$

Таким образом, чем выше плотность носителей, тем в более сильных магнитных полях наблюдаются осцилляции ШдГ и дГВА, а в случае их малой плотности данные осцилляции проявляются в слабых магнитных полях. Как правило, осцилляции ШдГ и дГВА регистрируются при значениях магнитных полей, больших 1 Т, вследствие низкой транспортной длины пробега носителей тока из-за обратного рассеяния на примесях и больших размеров исследуемых структур.

Для наблюдения осцилляций ШдГ и дГВА в слабых магнитных полях необходимо одновременное выполнение нескольких условий:

расстояние между уровнями Ландау должно быть больше, чем тепловое размытие $h\omega_c > kT$;

заполнение низшей двумерной подзоны $\varepsilon_F > h\omega_c$;

наличие низкого значения эффективной массы и большого времени релаксации момента τ, чтобы удовлетворить условию сильного поля

$$\omega_c\tau = B\mu >> 1,$$

которое соответствует высокой подвижности $\mu = e\tau/m^*$ носителей тока.

Кроме того, в течение долгого времени не удавалось найти системы, в которых наблюдались бы осцилляции ШдГ и дГВА при температуре $T > 30$ К [8]. Тем не менее, недавно осцилляции ШдГ были обнаружены при комнатной температуре в графене. При этом значение подвижности $\mu = 10000$ см^2/В·с определялось низкой эффективной массой электронов (10^{-4} m_e), тогда как время релаксации момента оставалось очень коротким: $\tau \approx 10^{-13}$ с. Поэтому для наблюдения осцилляций ШдГ и квантового эффекта Холла прикладывалось магнитное поле величиной около 29 Т [9]. Таким образом, реализация приближения сильного поля в слабых магнитных полях остается актуальной задачей.

Впервые осцилляции ШдГ в малом поле были получены при исследовании сэндвич-наноструктур на основе CdF_2 [10]. Сэндвич-наноструктура представляет собой сверхтонкую прослойку полупроводникового материала шириной в несколько нанометров, ограниченную сверхузкими барьерами, проявляющими сверхпроводящие свойства, вследствие которых носители тока обладают малой эффективной массой и большим временем релаксации момента [6, 7, 10, 11].

В настоящей работе исследовалась сэндвич-наноструктура на основе кремния, представляющая собой сверхузкую кремниевую квантовую яму (СККЯ) *p*-типа, ограниченную сверхпроводящими δ-барьерами, сильно легированными бором на поверхности кремния (100) *n*-типа. Ширина квантовой ямы в такой структуре составляет 2 нм [6] (рис. 1).

Полученные зависимости продольного магнетосопротивления и статической магнитной восприимчивости демонстрируют ШдГ- и дГВА-осцилляции, возникающие вследствие большого времени релаксации момента и малой эффективной массы двумерных дырок, которая определялась с помощью измерений температурных зависимостей осцилляций де Гааза — Ван Альфена.

Экспериментальная часть

Кремниевые сэндвич-наноструктуры сверхпроводник — сверхузкая кремниевая квантовая яма — сверхпроводник С—СККЯ—С были получены с помощью планарной кремниевой технологии (см. рис. 1). При изготовлении структур использовались подложки Si (100) *n*-типа проводимости толщиной 0,35 мм с удельным сопротивлением 500 и 20 Ом·см, которые были предварительно окислены при температуре 1150 °С в атмосфере сухого кислорода, содержащей пары четыреххлористого углерода CCl_4. Толщина слоев окисла составила 0,22 мкм. С помощью фотолитографии в окисле вскрывались окна в холловской геометрии размером 4,7×0,2 мм для проведения кратковременной диффузии бора из газовой фазы при $T = 900$ °С (см. рис. 1).

Технология создания сэндвич-наноструктур детально разработана и основана на процессах самоорганизации микродефектов межузельных атомов кремния при росте окисла на поверхности Si (100) *n*-типа. Как известно, формирование слоев окисла на поверхности монокристаллического кремния приводит к появлению избыточных потоков собственных межузельных атомов и вакансий, которые имеют выделенные кристаллографические направления соответственно вдоль осей <111> и <100> [12–14]. Образование тонкого слоя окисла сопровождается генерацией избыточных межузельных атомов кремния, тогда как поверхность раздела толстый окисел — кремний является источником генерации избыточных потоков вакансий [12,15]. Наличие тонкого окисла приводит к самоорганизации собственных межузельных атомов в микродефекты в форме пирамид с основанием 2×2 нм, самоупорядочивающиеся в δ-слои, параллельные поверхности Si (100), между которыми формируются сверхузкие кремниевые квантовые ямы (СККЯ) [15]. Пассивация оборванных связей в δ-слоях, созданных в процессе предварительного окисления подложек Si (100), производится посредством кратковременной диффузии бора в окна в окисле кремния, полученные с помощью фотолитографии. Процесс пассивации бором трансформирует δ-слои микродефектов в δ-барьеры, сильно легированные бором ($N(\mathrm{B}) = 5\cdot10^{21}$ см$^{-3}$), которые ограничивают СККЯ [6, 15]. Ранее на основании исследования угловых зависимостей циклотронного резонанса, сканирующей туннельной микроскопии и электронного парамагнитного резонанса было показано, что δ-барьеры состоят из последовательностей чередующихся нелегированных и легированных квантовых точек. При этом последние содержат одиночные тригональные дипольные центры бора B^+–B^- с отрицательной корреляционной энергией, сформированные вследствие реконструкции мелких акцепторов бора: $2\mathrm{B}^0 \Rightarrow \mathrm{B}^+ + \mathrm{B}^-$ [16, 17]. Было обнаружено, что δ-барьеры, сильно легированные бором, проявляют свойства высокотемпературных сверхпроводников ($T_c = 145$ K, $H_{c2} = 0{,}22$ Т), которые, по-видимому, возникают в результате переноса дырочных биполяронов малого радиуса через дипольные центры бора на границе раздела кремниевая квантовая яма — δ-барьер [6]. Позиции уровней размерного квантования в СККЯ и значение сверхпроводящей щели $2\Delta = 0{,}044$ эВ в δ-барьерах, сильно легированных бором, были идентифицированы с помощью туннельной спектроскопии и дальней инфракрасной спектроскопии [6]. Таким образом, планарные кремниевые сэндвич-наноструктуры С—СККЯ—С представляют собой интересный объект для изучения квантования характеристик продольного транспорта носителей, поскольку варьирование величиной магнитного поля и температуры, которое используется при регистрации ШдГ- и дГВА-осцилляций, может сопровождаться изменением плотности двумерных дырок в СККЯ вследствие влияния δ-барьеров на сверхпроводящие свойства [6, 18].

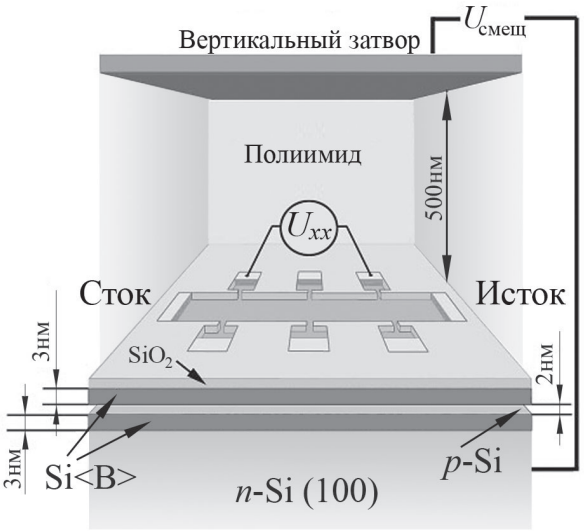


Рис. 1. Планарная структура СККЯ *p*-типа проводимости на поверхности Si (100) *n*-типа, ограниченной δ-барьерами, сильно легированными бором

Структура выполнена в рамках холловской геометрии для изучения оптических и электрических свойств в условиях изменения величины плотности двумерных дырок с помощью вертикального управляющего затвора

Измерения продольного магнетосопротивления в магнитном поле, перпендикулярном плоскости кремниевой сэндвич-структуры проводились при температуре жидкого азота и при стабилизированном токе исток-сток на уровне 10 нА (рис. 1). Температурные и полевые зависимости статической магнитной восприимчивости измерялись в интервале температур 3,5–300 K методом Фарадея. При этом высокая чувствительность, 10^{-9}–10^{-10} CGS, балансного спектрометра MGD 3 12 FG обеспечивала высокую стабильность калибровки значений BdB/dx.

В свою очередь, для калибровки величины BdB/dx использовались монокристаллы чистого фосфида индия InP, которые характеризуются температурной стабильностью значения магнитной восприимчивости $\chi = -313 \cdot 10^{-9}$ см^3/г [18] и подобны по форме и размеру исследуемым образцам.

Результаты и их обсуждение

Экспериментальные полевые зависимости продольного магнетосопротивления неожиданно проявляют две последовательности осцилляций ШдГ с различной формой пиков в двух разных интервалах значений магнитного поля (рис. 2).

Как показано выше, из величины периода осцилляций ШдГ, определенного из зависимостей продольного магнетосопротивления от обратных значений магнитного поля, можно оценить плотность двумерных дырок в СККЯ. Данная оценка для осцилляций, представленных на рис. 2, *а* и 2, *б*, приводит к значениям $P_{2D} = 2{,}20 \cdot 10^{13}$ м$^{-2}$ и $P_{2D} = 6{,}43 \cdot 10^{13}$ м$^{-2}$, соответственно. Эти значения плотности двумерных дырок позволили определить заполнение уровня Ландау, соответствующее каждому пику осцилляций ШдГ (см. рис. 2).

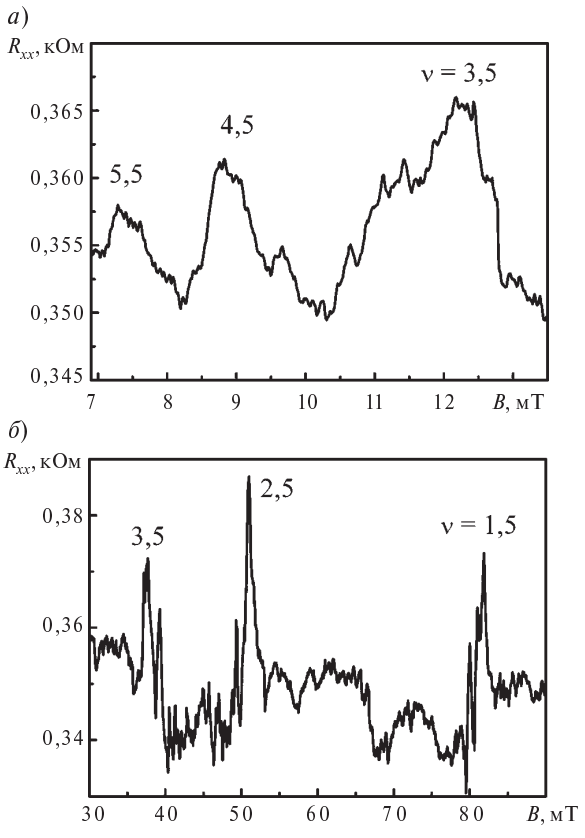


Рис. 2. Осцилляции Шубникова — де Гааза в полевой зависимости продольного магнетосопротивления СККЯ *p*-типа проводимости на поверхности Si (100) *n*-типа, ограниченной δ -барьерами, сильно легированными бором; P_{2D}, м$^{-2}$: $2{,}20 \cdot 10^{13}$ (*а*); $6{,}43 \cdot 10^{13}$ (*б*). Ток $I_{ds} = 10$ нА

В исследуемых структурах С—СККЯ—С сверхпроводящие свойства исчезают с ростом величины магнитного поля; это сопровождается разрушением куперовских пар дырок на границе СККЯ — сверхпроводящий барьер и таким образом приводит к увеличению плотности одиночных дырок в СККЯ. Поскольку диаграмма сверхпроводящего перехода достаточно нелинейна, то и высвобождение дырок из δ-барьеров в СККЯ происходит нелинейно. В связи с этим в определенных интервалах значений внешнего магнитного поля плотность двумерных дырок может быть достаточно стабильна. Следовательно, в полевых зависимостях магнетосопротивления может проявляться несколько участков с различным энергетическим зазором между уровнями Ландау, которые определяются значением текущей плотности двумерных дырок (см. рис. 2). При этом в ряде случаев возможно наблюдение нескольких последовательностей осцилляций ШдГ в разных диапазонах магнитных полей, которые соответствуют одним и тем же номерам уровней Ландау вследствие увеличения плотности одиночных двумерных дырок в СККЯ с ростом магнитного поля.

Следует отметить, что наблюдение осцилляций характеристик продольного транспорта при малой плотности двумерных дырок в СККЯ, а также регистрация нескольких их последовательностей в процессе изменения сверхпроводящих свойств δ-барьеров в кремниевых сэндвич-наноструктурах С—СККЯ—С, по-видимому, стали возможны благодаря уменьшению эффективной массы носителей вследствие наличия дипольных центров бора [6, 19]. При этом величина эффективной массы двумерных дырок может контролироваться с помощью измерений температурных зависимостей как ШдГ-, так и дГВА-осцилляций (согласно положениям общепринятой теории Лифшица — Косевича [20]). Далее для анализа температурных зависимостей магнитной восприимчивости наноструктур С—СККЯ—С использовалось следующее выражение для осциллирующей части магнитного мо-

мента [21–23], которое получено в развитии положений [20] для двумерного газа носителей:

$$M = \frac{\pi}{1+Z_0}\frac{ekT}{hcd}\times$$

$$\times\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{\mathrm{sh}(2\pi^2 jkT/h\omega_c)}\sin\left(2\pi j\frac{B_0}{B}\right), \qquad (1)$$

где d — ширина квантовой ямы, $B_0 = \Phi_0 n_e \equiv \equiv hcn_e/e$ (Φ_0 — квант магнитного потока, n_e — двумерная плотность носителей), e — заряд электрона, c — скорость света, h — постоянная Планка, k — постоянная Больцмана, $\omega_c = eB/m^*c$ (m^* — эффективная масса электрона), T — температура; отношение $E_F/h\omega_c$ выражено через B_0/B ($E_F/h\omega_c = B_0/B$).

Величина Z_0 пропорциональна константе обменного взаимодействия между электронами, она отрицательна и может быть близка к –1 [24]. Поэтому целесообразно рассматривать случай $Z_0 + 1 << 1$. Следуя работе [23], для расчета мы использовали значение $1 + Z_0 = 2\cdot10^{-4}$.

Полученное на основании указанных температурных зависимостей осцилляций дГВА (рис. 3) значение эффективной массы дырок в кремниевой наноструктуре С—СККЯ—С $m^* = 2{,}5\cdot10^{-4}m_0$, где m_0 — масса свободного электрона, находится в хорошем согласии с результатами исследований осцилляций Аронова — Кашера и циклотронного резонанса [6, 19]. Таким образом, малая величина эффективной массы двумерных дырок в сочетании с достаточно длинным временем релаксации момента, которое следует из величины полуширины пиков ШдГ-осцилляций, свидетельствует о выполнении условия сильного поля $\omega_c\tau = B\mu >> 1$ в кремниевых сэндвич-наноструктурах в слабых магнитных полях. Кроме того, условие сильного поля выполняется в С—СККЯ—С даже при высоких температурах, хотя возникновение дГВА-осцилляций в сверхпроводящих структурах предсказывалось при очень низких температурах:

$$T < (eH_{c2}/2\pi^2 m^* c) \sim T^2{}_c/E_F;$$

где T_c — критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние.

В частности, оценка температуры наблюдения дГВА-осцилляций в кремниевых сэндвич-наноструктурах с учетом выполнения условия сильного поля приводит к достаточно высокому значению температуры $T < 100$ K.

Обнаруженное изменение периода дГВА-осцилляций при $T = 120$K, возможно, связано с процессами квантования длины когерентности куперовских пар дырок в δ-барьерах, которые могут приводить к осцилляциям плотности двумерных дырок при изменении магнитного поля и/или температуры [25]. Однако данный вопрос нуждается в специальном исследовании.

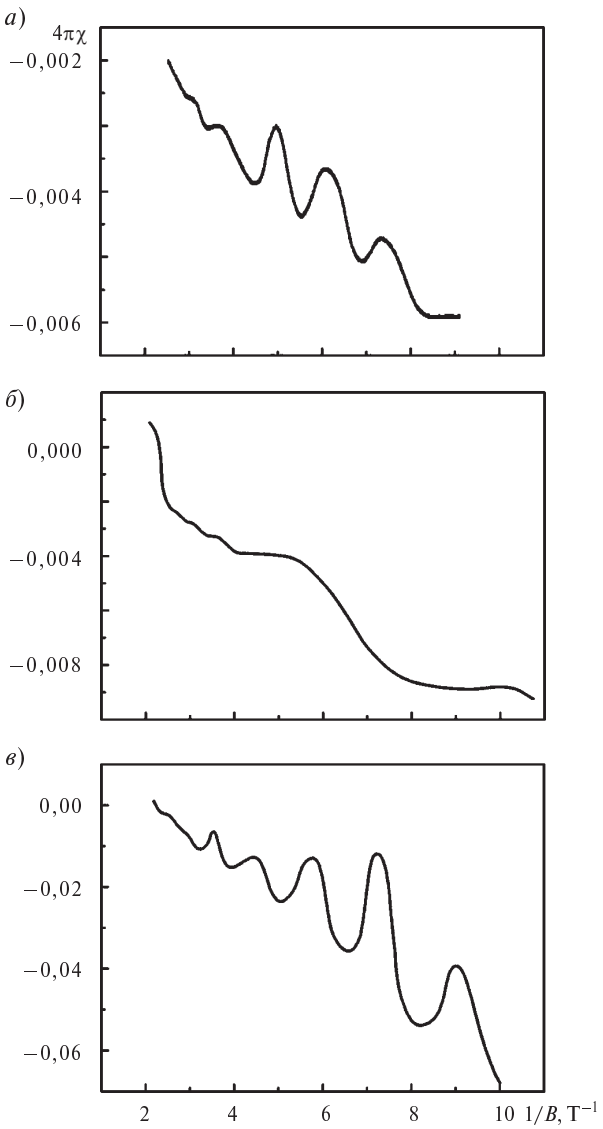


Рис. 3. Осцилляции де Гааза — Ван Альфена в полевой зависимости статической магнитной восприимчивости СККЯ p-типа проводимости на поверхности Si (100) n-типа, ограниченной δ-барьерами, сильно легированными бором. Температура T, K: 200 (*а*), 120 (*б*), 50 (*в*). Ток $I_{ds} = 10$ нА

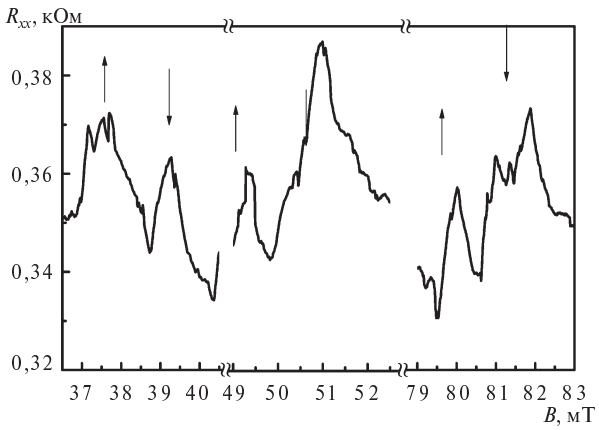


Рис. 4. Структура пиков осцилляций Шубникова — де Гааза в полевой зависимости продольного магнетосопротивления СККЯ p-типа проводимости на поверхности Si (100) n-типа, ограниченной δ -барьерами, сильно легированными бором; $P_{2D} = 6{,}43 \cdot 10^{13}$ м$^{-2}$. Ток $I_{ds} = 10$ нА; стрелки — направление спина

Детальное рассмотрение структуры максимумов осцилляций ШдГ показывает наличие спинового расщепления уровней Ландау, величина которого практически не изменяется с увеличением магнитного поля, что указывает на важную роль обменного взаимодействия в его формировании (рис. 4). Более того, величина амплитуды пиков осцилляций ШдГ $\Delta R/R_0 \approx 5\,\%$, по-видимому, обусловлена вкладом спиновой интерференции вследствие спин-орбитального взаимодействия в валентной зоне СККЯ, которая приводит к возникновению положительного магнетосопротивления при пересечении уровня Ферми уровнями Ландау. Кроме того, наблюдается тонкая структура пиков осцилляций ШдГ, которая также мало меняется при изменении номера уровня Ландау (см. рис. 4). Подобная модуляция характеристик продольного транспорта носителей объясняется в рамках резонансного туннелирования между краевыми каналами СККЯ через локализованные состояния на ее границе с δ-барьерами [26].

Итак, осцилляции Шубникова — де Гааза и де Гааза — Ван Альфена были обнаружены при высоких температурах в слабых магнитных полях с помощью измерений полевых и температурных зависимостей продольного сопротивления и статической магнитной восприимчивости сверхузкой кремниевой квантовой ямы p-типа на поверхности кремния (100) n-типа, ограниченной δ-барьерами, сильно легированными бором.

Регистрация квантования характеристик продольного транспорта носителей стала возможной вследствие реализации приближения сильного поля ($\mu B >> 1$), благодаря малой эффективной массе двумерных тяжелых дырок, что подтверждается измерениями температурных зависимостей осцилляций де Гааза — Ван Альфена. Обнаружено, что значение плотности двумерных дырок, определенное из частоты осцилляций Шубникова — де Гааза и де Гааза — Ван Альфена, периодически увеличивается с ростом магнитного поля синхронно с усилением диамагнитных свойств δ-барьеров, ограничивающих сверхузкую кремниевую квантовую яму. Обнаруженные осцилляции Шубникова — де Гааза демонстрируют наличие спинового расщепления уровней Ландау, величина которого практически не изменяется с увеличением магнитного поля, что указывает на важную роль обменного взаимодействия в его формировании.

Данная работа поддержана в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Квантовая физика конденсированных сред» (проект 9.12), Федеральной целевой программы исследований и развития по приоритетным направлениям российской науки и технологического комплекса на 2007–2012 годы (проект 02.514.11.4074), программы Швейцарского национального научного фонда (SNSF) (grant IZ73Z0-127945/1), 7-й Европейской рамочной программы (Marie Curie Actions PIRSES-GA-2009-246784 project SPINMET).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ландау, Л.Д.** Диамагнетизм металлов [Текст] / Л.Д. Ландау // Zs. Phs.— 1930.— Т. 64.— С. 629–652.

2. **Schubnikow, L.** Magnetische Widerstandsvergrosserung in Einkristallen von Wismut bei tiefen Temperaturen [Text] / L. Schubnikow, W.J. de Haas // Leiden Commun.— 1930.— No. 207a.— P. 3–6.

3. **de Haas, W.J.** The dependence of the susceptibility of bismuth singlecrystals upon the field [Text] / W.J. de Haas, P.M. van Alphen // Leiden Commun.— 1932.— No. 220d.— P. 454–458.

4. **Fowler, A.B.** Magneto-oscillatory conductance in silicon surfaces [Text] / A.B. Fowler, F.F. Fang, W.E. Howard [et al.] // PRL.— 1966.— Vol. 16.— No. 20.— P. 901–903.

5. **Cage, M.E.** Test of the quantum Hall effect as a resistance standard [Text] / M.E. Cage, R.F. Dziuba,

B.F. Field // IEEE Trans. Instrum. Meas.— 1985.— Vol. IM-34.— P. 301–303.

6. **Баграев, Н.Т.** Сверхпроводящие свойства кремниевых наноструктур [Текст] / Н.Т. Баграев, Л.Е. Клячкин, А.А. Кудрявцев [и др.] // ФТП.— 2009.— Т. 43.— Вып. 11.— С. 1481–1495.

7. **Баграев, Н.Т.** Квантовый спиновый эффект Холла в наноструктурах на основе фторида кадмия [Текст] / Н.Т. Баграев, О.Н. Гимбицкая, Л.Е. Клячкин [и др.] // ФТП.— 2010.— Т. 44.— Вып. 10.— С. 1372–1381.

8. **Landwehr, G.** Quantum transport in *n*-type and *p*-type modulation doped mercury telluride quantum wells [Text] / G. Landwehr, J. Gerschьtz, S. Oehling [et al.] // Physica E.— 2000.— Vol. 6.— No. 1–4.— P. 713–717.

9. **Geim, A.K.** The rise of graphene [Text] / A.K. Geim, K.S. Novoselov // Nature Materials.— 2007.— Vol. 6.— P. 183–199.

10. **Баграев, Н.Т.** Квантовый эффект Холла в наноструктурах на основе фторида кадмия [Текст] / Н.Т. Баграев, О.Н. Гимбицкая, Л.Е. Клячкин [и др.] // ФТП.— 2009.— Т. 43.— Вып. 1.— С. 82–84.

11. **Баграев, Н.Т.** Спиновый транзистор в наноструктурах на основе фторида кадмия [Текст] / Н.Т. Баграев, О.Н. Гимбицкая, Л.Е. Клячкин [и др.] // ФТП.— 2009.— Т. 43.— Вып. 1.— С. 85–94.

12. **Frank, W.** Diffusion in silicon and germanium [Text] / W. Frank, U. Gosele, H. Mehrer, A. Seeger // In: Diffusion in Crystalline Solids, ed. by G.E. Murch, A.S. Nowick.— New York: Academic Press, 1984.— P. 63–142.

13. **Goesele, U.** Point defects and diffusion in silicon and gallium arsenide [Text] / U. Goesele, T.Y. Tan // Def. Dif. Forum.— 1988.— Vol. 59.— P. 1–16.

14. **Robertson, J.** Electronic structure of amorphous semiconductors [Text] / J. Robertson // Advances in Physics.— 1983.— Vol. 32.— P. 361–452.

15. **Bagraev, N.T.** Self-assembled impurity superlattices and microcavities in silicon [Text] / N.T. Bagraev, A.D. Bouravleuv, W. Gehlhoff [et al.] // Def. Dif. Forum.— 2001.— Vol. 194–199.— P. 673–678.

16. **Баграев, Н.Т.** Квантованная проводимость в кремниевых квантовых проволоках [Текст] / Н.Т. Баграев, А.Д. Буравлев, Л.Е. Клячкин [и др.] // ФТП.— 2009.— Т. 36.— Вып. 4.— С. 462–483.

17. **Gehlhoff, W.** Shallow and deep centres in heavily doped silicon quantum wells [Text] / W. Gehlhoff, N.T. Bagraev, L.E. Klyachkin // Mater. Sci. Forum.— 1995.— Vol. 196–201.— P. 467–472.

18. **Bagraev, N.T.** Spin-dependent transport of holes in silicon quantum wells confined by superconductor barriers [Text] / N.T. Bagraev, W. Gehlhoff, L.E. Klyachkin [et al.] // Physica C.— 2008.— Vol. 468.— P. 840–843.

19. **Bagraev, N.T.** Phase and amplitude response of the '0.7 feature' caused by holes in silicon one-dimensional wires and rings [Text] / N.T. Bagraev, N.G. Galkin, W. Gehlhoff [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter.— 2008.— Vol. 20.— P. 164202–12.

20. **Лифшиц, И.М.** К теории магнитной восприимчивости металлов при низких температурах [Текст] / И.М. Лифшиц, А.М. Косевич // ЖЭТФ.— 1955.— Т. 29.— Вып. 6.— С. 730–742.

21. **Бычков, Ю.А.** Влияние примесей на эффект де Газа — Ван Альфена [Текст] / Ю.А. Бычков // ЖЭТФ.— 1961.— Т. 39.— Вып. 5.— С. 1401–1410.

22. **Бычков, Ю.А.** Квантовые осцилляции термодинамических величин для металла в магнитном поле в модели Ферми-жидкости [Текст] / Ю.А. Бычков, Л.П. Горьков // ЖЭТФ.— 1961.— Т. 41.— Вып. 5.— С. 1592–1605.

23. **Зегря, Г.Г.** Квантование магнитной индукции в 2D-системе в условиях квантового эффекта Холла [Текст] / Г.Г. Зегря // ФТП.— 1999.— Т. 33.— Вып. 9.— С. 1144–1147.

24. **Минеев, В.П.** Эффект де Газа — Ван Альфена в сверхпроводниках [Текст] / В.П. Минеев, М.Г. Вавилов // УФН.— 1997.— Т. 167.— Вып. 10.— С. 1121–1123.

25. **Geim, A.K.** Mesoscopic superconductors as 'artificial atoms' made from Cooper pairs [Text] / A.K. Geim, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos [et al.] // Physica B.— 1998.— Vol. 249–251. P. 445–452.

26. **Geim, A.K.** Resonant tunneling between edge states in mesoscopic wires [Text] A.K. Geim, P.C. Main, C.V. Brown [et al.] // Surface Science.— 1994.— Vol. 305.— P. 624–628.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 536.423

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

АПРОБАЦИЯ МОДЕЛИ ТЕПЛООБМЕНА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ДИСПЕРГИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ

Ключевым компонентом модели испарения диспергированной жидкости является испарение одиночной капли в газовом потоке. В свою очередь, численная модель испарения капли жидкости включает следующие составные части:

уравнения тепло- и массообмена поверхности капли и окружающего газа;

способ определения эффективных теплофизических свойств парогазовой смеси;

метод расчета теплопередачи (как кондуктивной, так и радиационной) внутри капли и циркуляции жидкости в ней;

закон сопротивления испаряющейся капли при движении в окружающем газе.

Каждая из перечисленных составных частей модели испарения капли является приближенной и содержит источник возможной погрешности, которая проявляется в численных расчетах диаметра, температуры, скорости испарения и скорости движения испаряющихся капель. В связи с этим возникает необходимость всесторонней проверки модели испарения капли путем сопоставления результатов расчета с имеющимися экспериментальными данными. При этом модель должна быть апробирована для жидкостей с существенно разными теплофизическими свойствами и в широком диапазоне параметров.

При построении и апробации модели следует отметить особое значение теплопередачи внутри капли и циркуляции жидкости в ней. В прикладных расчетах, как правило, используются модели, игнорирующие неравномерность распределения температуры внутри капель; их называют моделями «бесконечной» теплопроводности (см., например [1]). Однако в последние годы разработаны более точные модели, в которых поле температуры в капле определяется путем численного или аналитического решения уравнения теплопроводности [1–4]. В рамках таких моделей открывается возможность приближенно учесть циркуляцию жидкости в капле путем введения коэффициента эффективной теплопроводности. Вычислительные затраты на решение уравнения теплопроводности могут быть существенно сокращены при использовании приближенного подхода, в котором поле температуры внутри капли аппроксимируется параболическим профилем [5–7]. При этом, с одной стороны, учитывается возможная неравномерность поля температуры в капле, а с другой — не увеличиваются вычислительные затраты по сравнению с моделями «бесконечной» теплопроводности.

В данной работе рассматривается модель испарения одиночной капли, сформулированная в работе [8] с использованием параболического профиля температуры внутри капли и реализованная как составная часть вычислительного гидродинамического кода Fire3D [9]. Цель данной части работы — провести сравнение результатов расчетов с данными измерений, продемонстрировать работоспособность модели для разных жидкостей в разных режимах их испарения. Адекватность модели проверяется путем сравнения с результатами расчетов по более точной модели (использующей решение уравнения теплопроводности в капле), а также с результатами измерений среднеобъемной температуры, диаметра и скорости осаждения испаряющихся капель. При этом используются экспериментальные данные для легко- и труднолетучей жидкостей (ацетон и вода соответственно). Рассмат-

риваемые режимы испарения капли предусматривают как снижение, так и рост ее температуры. Для апробации модели использованы литературные данные и собственные результаты измерений авторов.

Моделирование теплопередачи внутри капли

Модель теплообмена и испарения капли, использованная в данной работе, подробно описана в статье [8]. В рамках данной модели теплопередача внутри капли описывается сферически симметричным уравнением теплопроводности:

$$c_l \rho_l \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \lambda_{l,eff} \frac{\partial T}{\partial r}, \qquad (1)$$

где $c_l = c_l(T)$, $\rho_l = \rho_l(T)$ и $\lambda_{l,eff} = \lambda_l(T)\chi(\mathrm{Pe})$ — теплоемкость, плотность и эффективный коэффициент теплопроводности жидкости с учетом ее циркуляции в капле; $\lambda_l(T)$ — коэффициент теплопроводности жидкости; $\chi(\mathrm{Pe})$ — множитель, учитывающий влияние циркуляции жидкости в капле; $\mathrm{Pe} = c_l \rho_l |\mathbf{u} - \mathbf{u}_g| d / \lambda_l$ — число Пекле, построенное по диаметру капли d и разности скоростей капли $\mathbf{u}$ и окружающего газа $\mathbf{u}_g$.

Поле температуры в капле удовлетворяет следующим граничным условиям:

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

$$-\lambda_l \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R(t)} = -\frac{q_{conv} + q_{vap}}{4\pi R^2(t)}, \qquad (2)$$

где q_{conv} — конвективный тепловой поток с учетом расходования тепла на нагрев образующегося пара; $q_{vap} = \Delta h_{vap} \dot{m}$ — расход тепла на испарение жидкости (Δh_{vap} — теплота испарения при температуре поверхности капли, $\dot{m}$ — скорость убыли массы испаряющейся капли).

Метод расчета q_{conv} и $\dot{m}$ приводится в работе [8].

Интегрирование уравнения (1) по объему капли приводит к уравнению баланса тепла:

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

где $q^*_{vap} = \left(\Delta h_{vap} - c_l\left(\bar{T} - T|_{r=R(t)}\right)\right)\dot{m}$, а среднеобъемная температура $\bar{T}$ определяется равенством

$$\bar{T} = \frac{3}{4\pi R^3(t)} \int_0^{R(t)} T(r) 4\pi r^2 dr.$$

Уравнение (3) является жестким из-за значительного различия времени релаксации температуры капли к равновесному значению и времени жизни капли. Экономичный метод численного решения, учитывающий эту особенность уравнения (3), также описан в работе [8].

В данной работе расчет нагрева (охлаждения) капли выполнен двумя способами. В первом из них используется численное решение уравнения (1) с помощью метода конечных объемов на равномерной сетке, движущейся с учетом изменения радиуса капли со временем. В результате определяется температура поверхности капли $T|_{r=R(t)}$, от которой зависит скорость испарения капли $\dot{m}$. Такой подход позволяет получить решение уравнения (1) с наперед заданной точностью. Однако при моделировании газокапельных струй с большим количеством вычислительных частиц (10^5–10^6) численное решение уравнения переноса тепла внутри капли приводит к недопустимо большому объему вычислений. В связи с этим в данной работе используется еще один (приближенный и более экономичный) подход, в рамках которого распределение температуры внутри капли аппроксимируется параболическим профилем [5, 8]. При этом среднеобъемная температура капли $\bar{T}$ определяется из численного решения уравнения (3), а температура поверхности вычисляется из приближенного равенства

$$T|_{r=R(t)} = \bar{T} + \left(q_{conv} + q^*_{vap}\right) \Big/ \left(10\pi d \lambda_{l,eff}\right),$$

полученного в работе [8].

Для демонстрации работоспособности приближенной модели на основе параболического профиля температуры в капле приведем сравнение с численным расчетом, включающим аналитическое [4] и численное (данная работа) решения уравнения теплопроводности, а также с результатами измерений, выполненных для капель чистого ацетона в работе [10]. В экспериментах [10] монодисперсные капли движутся вдоль одной и той же прямолинейной траектории на заданном расстоянии друг от друга. Поскольку капли движутся в следе, созданном их предшественниками, необходимо учесть снижe-

ние интенсивности тепло- и массообмена с окружающим воздухом. Как и в статьях [10, 4], в данной работе для этого использован эмпирический коэффициент η, на который умножаются числа Нуссельта и Шервуда, определяемые для изолированных капель, как описано в статье [8]. По данным работ [10, 4], зависимость указанного коэффициента от близости капель друг к другу выражается равенством вида $\eta(C)$, где C — отношение расстояния между каплями к их диаметру. Отметим, что в рассматриваемом диапазоне значений C коэффициент η существенно меньше единицы. В экспериментах [10] измерена зависимость скорости летящей капли от времени. Использование этой зависимости в расчетах позволяет исключить решение уравнений движения капли и благодаря этому дает возможность независимо оценивать адекватность модели нагрева и испарения капли. Условия эксперимента, приведенные в работе [10], использованные в расчетах, приводятся в таблице.

Сравнение результатов расчетов на основе численного решения уравнения (1) и при использовании параболического профиля температуры (рис. 1) показывает следующее. Существует начальный промежуток времени (порядка 1–2 мс), в течение которого параболический профиль температуры заметно отличается от точного решения уравнения (1), причем наибольшее рассогласование достигается в центре капли. Однако по истечении указанного промежутка параболический профиль с хорошей точностью воспроизводит точное решение. В работе [8] показано, что длительность данного промежутка времени определяется временем релаксации поля температуры в капле τ_l. Отметим, что в рассматриваемом случае имеем

$$\tau_l = \left(R_0^2 c_l \rho_l / \lambda_{l,eff} \right) / 15 = 1{,}4 \text{ мс},$$

где $R_0 = 0{,}0715$ мм — начальный радиус капли.

На рис. 2 приведено сравнение результатов расчетов по модели [8] с некоторыми результатами измерений, выполненных в работе [10] для двух режимов испарения капель (движение подогретой капли в холодном воздухе и движение холодной капли в горячем воздухе). Несмотря на значительную ошибку параболического профиля в центре капли, искусственное сглаживание зависимости температуры поверхности капли от времени при малых значениях t (подробнее см. в [5, 8]) позволяет с хорошей точностью рассчитать указанную зависимость даже на начальной стадии нагрева капли (рис. 2, *а*).

Помимо вычислительной экономичности, обоснованность и целесообразность использования параболического профиля температуры в используемой приближенной модели обусловлены следующими факторами. Во-первых, длительность указанной стадии такова, что за это время испаряется пренебрежимо малая часть массы капли. Во-вторых, приближенное сглаживание зависимости температуры поверхности от времени $T_s(t)$, предложенное в работах [5] и использованное в приближенной модели [8], позволяет значительно уменьшить ошибку в расчете $T_s(t)$ на начальной стадии испарения капли. Наконец, следует иметь в виду, что на начальной стадии модель, использующая решение уравнения

Условия эксперимента [10], использованные в расчетах

Параметр	Движение капли в воздухе	
	холодном	горячем
Начальный момент времени, мс	0,79	0
Начальный диаметр, мм	0,143	0,126
Начальная температура капли, °С	34,8	21,0
Изменение скорости капли, м/с (время t в мс)	$12{,}81-0{,}316t$	$9{,}85-0{,}261t$
Температура окружающей среды, °С	21,5	Зависит от расстояния, пройденного каплей [11, рис. 3]
Отношение расстояния между каплями к диаметру	7,1	7,6

теплопроводности, но не учитывающая нестационарность поля скорости в капле, по-прежнему неполна: она не учитывает конечное время релаксации поля скорости и связанную с ним зависимость эффективной теплопроводности (коэффициент χ) от времени.

Еще раз подчеркнем, что результат расчета по приближенной модели [8] на основе параболического профиля температуры в капле с хорошей точностью воспроизводит результат расчета по более точной модели, где поле температуры в капле определяется с использованием аналитического или численного решения уравнения теплопроводности. Кроме того, как следует из рис. 2, имеет место удовлетворительное согласие результатов расчета с измеренной температурой капли (предполагается, что измеренные в работе [10] значения соответствуют среднеобъемной температуре капли). Данный вывод оказывается справедливым как для случая подогретой капли, движущейся в холодном воздухе (рис. 2, *а*), так и для холодной капли, движущейся в горячем воздухе (рис. 2, *б*). С учетом изложенного далее в расчетах используется параболический профиль температуры в капле.

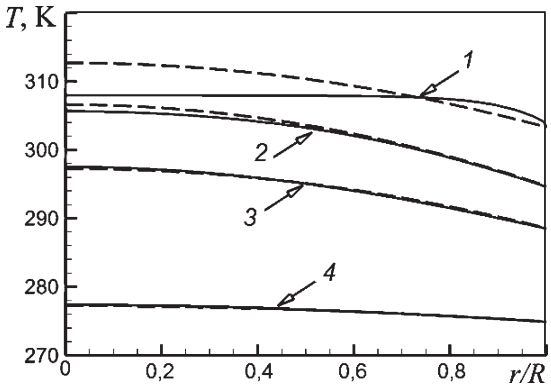


Рис. 1. Расчетные профили температуры в капле ацетона для условий эксперимента [10] (см. таблицу, движение в холодном воздухе). Время, мс: 0,17 (*1*); 1,8 (*2*); 4,3 (*3*); 15,3 (*4*). Сплошная линия — точное решение уравнения (1), пунктир — параболический профиль

Сравнение результатов расчетов с данными измерений

Дальнейшее сопоставление результатов расчетов по модели [8] выполнено для изолированных капель ацетона и воды. В частности, на рис. 3 использованы выполненные в работе [12] измерения диаметра неподвижной капли, находящейся в потоке воздуха, нагретого до 78–81 °C. Видно, что имеет место хорошее согласие расчетной и экспериментальной зависимостей $d(t)/d_0$ для воды (рис. 3, *а*). Для ацетона расчет предсказывает более высокую скорость испарения, чем эксперимент (отметим, что аналогичный вывод следует из результатов расчетов, приведенных в работе [12]).

На рис. 4 представлены результаты измерений и расчетов для неподвижных капель воды с разным начальным диаметром. Важно отметить, что даже для достаточно мелких капель, где можно ожидать увеличения роли неравновесных и кинетических эффектов в динамике испарения (в данной модели эти эффекты не учитыва-

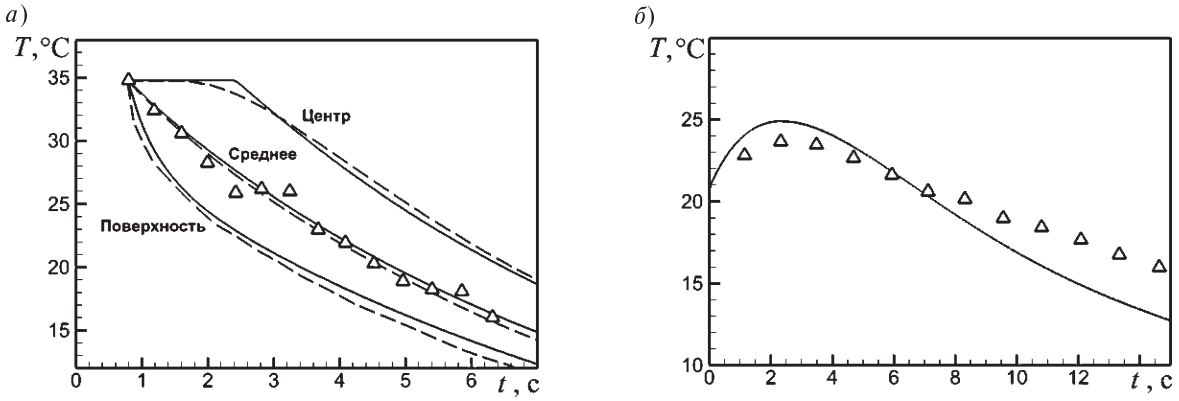


Рис. 2. Сравнение экспериментальных (символы) и расчетных (линии) зависимостей температуры капли ацетона от времени в условиях эксперимента [10] (см. таблицу):
а — движение подогретой капли в холодном воздухе;
б — движение холодной капли в горячем воздухе (показана среднеобъемная температура капли).
Расчеты выполнены по модели [8] (сплошные линии) и модели [4] (пунктир)

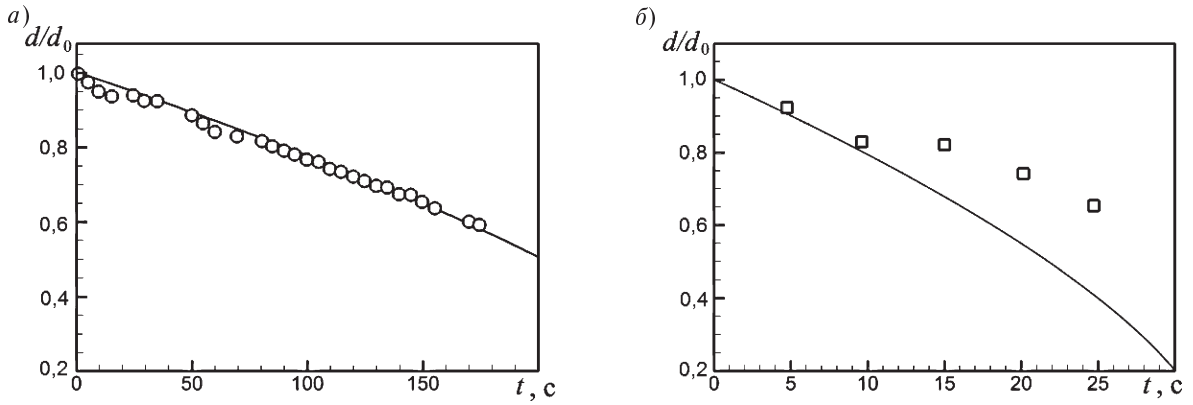


Рис. 3. Сравнение результатов расчетов (линии) испарения капель с экспериментальными данными (символы) из работы [12] (температура воздуха 351 K, скорость 5,1 м/с):
а — испарение капли воды, d_0 = 2,90 мм, T_0 = 20 °C;
б — испарение капли ацетона, d_0 = 2,29 мм, T_0 = 0 °C

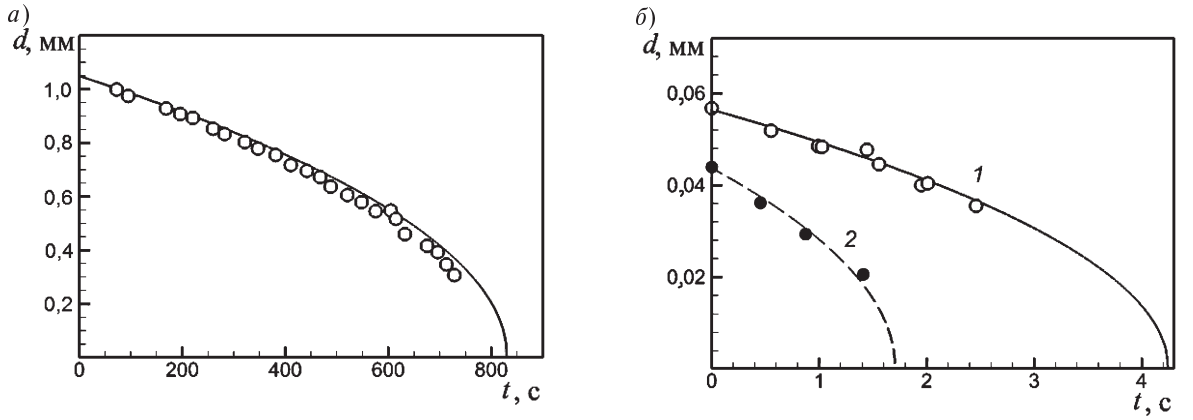


Рис. 4. Сравнение расчетных (линии) и измеренных (символы) диаметров капель воды:
а — испарение крупных капель (измерения [25], d_0 = 1,05 мм);
б — испарение мелких капель (измерения [15], *1* — d_0 = 0,0566 мм, *2* — d_0 = 0,044 мм)

ются), используемая модель позволяет получить достоверные зависимости диаметра капель от времени. Это хорошо видно на рис. 4, *б*, где показана динамика испарения капель с начальными диаметрами 0,0439 и 0,0566 мм. Отметим, что экспериментальные данные, приведенные на рис. 4, *б*, получены для изолированных неподвижных капель, подвешенных в электрическом поле в атмосфере сухого азота при атмосферном давлении [15].

В недавно опубликованной работе [13] приведены результаты измерений диаметра и температуры поверхности испаряющихся капель воды, выполненных при двух скоростях набегающего потока воздуха (0,8 и 2 м/с, что соответствует значениям числа Рейнольдса 60 и 150 для начального диаметра капель) и при разных значениях влажности окружающего воздуха (0 и 30 %).

Рис. 5, *а*, *б* показывает, что результаты расчета по рассматриваемой модели удовлетворительно согласуются с измеренными зависимостями диаметра капель от времени. Экспериментально установлено, что при выбранном соотношении начальной температуры капли и температуры окружающего воздуха увеличение влажности окружающего воздуха от 0 до 30 % приводит к смене направления изменения температуры капли в ходе ее испарения. Именно, при влажности 0 % наблюдалось снижение температуры капли, а при влажности 30 % — увеличение, что связано с соответствующим изменением равновесной температуры капли (температуры мокрого термометра). Как показано на рис. 5, *б*, *в*, численные

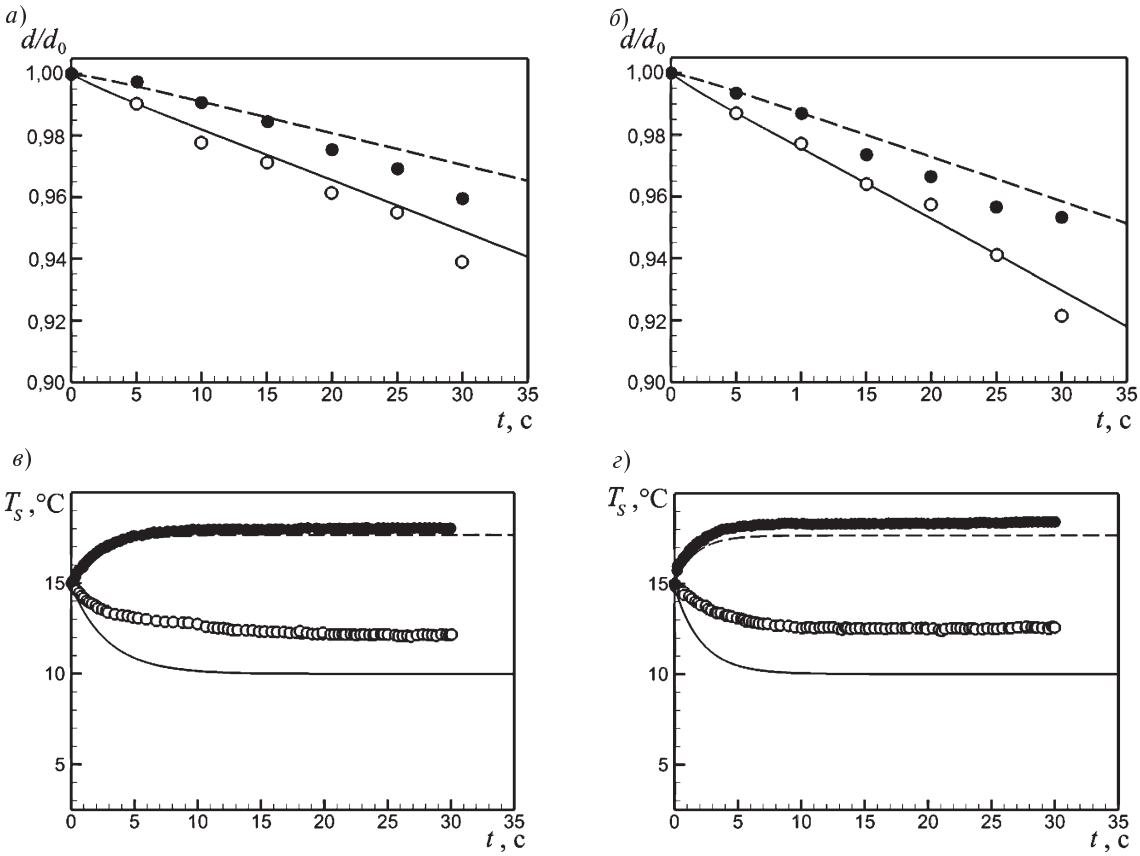


Рис. 5. Расчетные (линии) и измеренные (символы) зависимости относительного диаметра (*а*, *б*) и температуры поверхности (*в*, *г*) капли воды от времени (d_0 = 1,2 мм, T_0 = 30 °С, начальная температура капли 15 °С)

Влажность воздуха: 0 % (сплошные линии, незакрашенные символы); 30 % (пунктир, закрашенные символы). Скорость потока воздуха: 0,8 м/с (*а*, *в*); 2,0 м/с (*б*, *г*)

расчеты по рассматриваемой модели правильно воспроизводят это наблюдение, хотя и при несколько меньшей разнице значений равновесных температур, соответствующих разным значениям влажности воздуха.

Для того, чтобы исследовать влияние скорости набегающего потока газа и начального диаметра капель на скорость их испарения, в данной работе выполнены специальные измерения. Для одиночной капли, закрепленной на тонкой стеклянной нити на оси круглой трубы (диаметр 18 мм), продуваемой потоком осушенного воздуха, при комнатной температуре измерялась зависимость диаметра капли от времени. Значения диаметра капли определялись по видеозаписи, сделанной через окуляр микроскопа. Запись выполняли до тех пор, пока капля не теряла сферическую форму. Результаты измерений и расчетов по модели [8] приведены на рис. 6.

Влияние скорости набегающего потока при заданном начальном диаметре капли показано на рис. 6, *а* для воды и рис. 6, *в* для ацетона. Динамика испарения капель разного диаметра при заданной скорости набегающего потока представлена на рис. 6, *б* и *г* для воды и ацетона соответственно. Сравнение расчетных и экспериментальных данных указывает на их удовлетворительное согласие как для воды, так и для ацетона. Возможной причиной наблюдающегося рассогласования является неточное определение скорости воздуха в месте расположения капли (в расчетах использовано среднерасходное значение скорости в трубе) и влияние нити на теплообмен.

Приведенные выше расчеты выполнены для заданной скорости газа относительно испаряющейся капли. В этом случае уравнение движения капли не решается, а точность определения

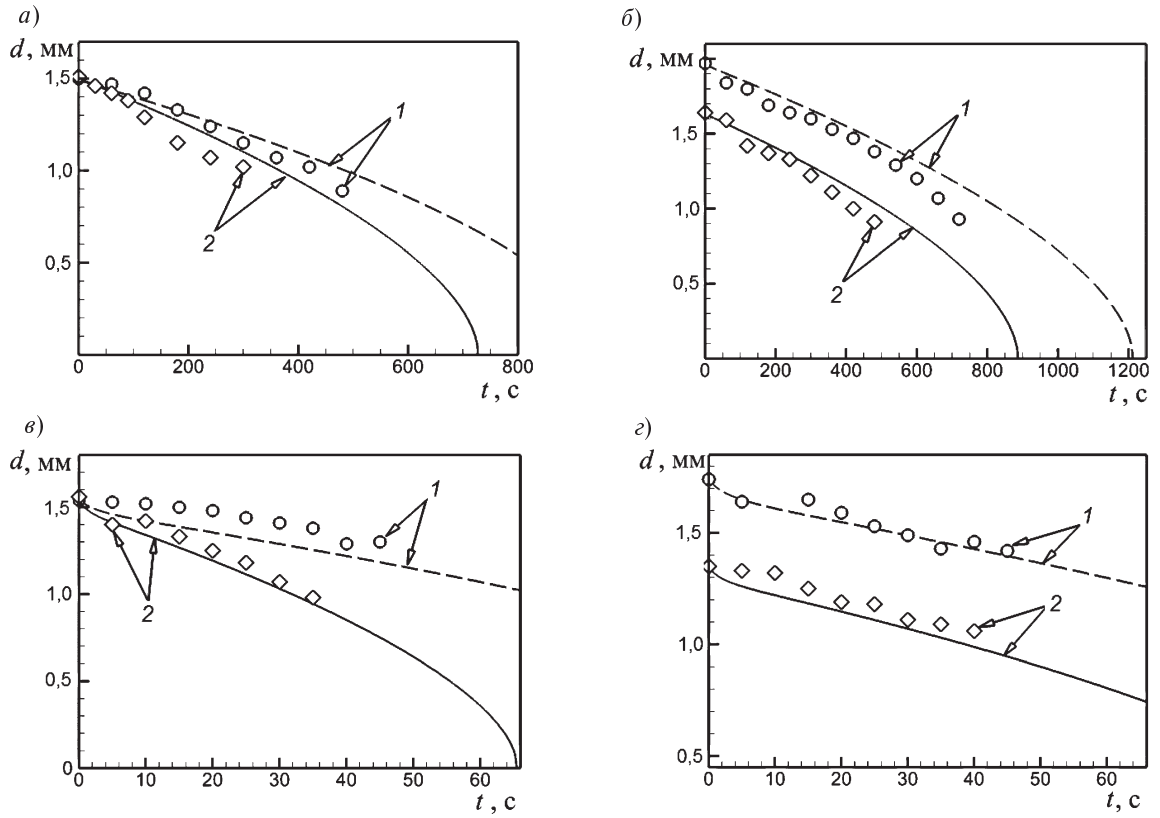


Рис. 6. Сравнение расчетных (линии) и измеренных (символы) диаметров испаряющихся капель воды (*а*, *б*) (T_0 = 21 °C, T_{air} = 23 °C) и ацетона (*в*, *г*) ($T_0 = T_{air}$ = 20 °C): *а* — d_0 = 1,5 мм (V_0, м/с: *1* — 0,20; *2* — 0,58); *б* — V_0 = 0,48 м/с (d_0, мм: *1* — 1,64; *2* — 1,97); *в* — d_0 = 1,55 мм (V_0, м/с: *1* — 0,04; *2* — 0,76); *г* — V_0 = 0,04 м/с (d_0, мм: *1* — 1,35; *2* — 1,74)

силы сопротивления и прогноз скорости не оказывает влияния на расчетную скорость испарения. Следовательно, адекватность закона сопротивления испаряющейся капли требует дополнительной проверки. Такая проверка выполнена путем сравнения расчетной скорости движения испаряющейся капли при свободном падении в воздухе с данными измерений скорости осаждения, приведенными в работе [16]. В рассматриваемой модели [8] коэффициент сопротивления определяется по формуле

$$C_D = \max\left(\left(24/\mathrm{Re}\right)\left(1+\mathrm{Re}^{2/3}/6\right); 0{,}424\right),$$

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).

Скорость капли изменяется от своего начального значения V_0 до значения установившейся скорости

$$V_\infty = \tau_{velo} g\left(1-\rho/\rho_l\right),$$

где τ_{velo} — характерное время релаксации скорости; $\tau_{velo} = \left(4d/3\right)\left(\rho_l/\rho C_D\left|\mathbf{u}-\mathbf{u}_g\right|\right)$.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных приведено на рис. 7, где показана скорость осаждения капель с разными начальными диаметрами в поле силы тяжести. В рассматриваемом случае начальные значения времени динамической релаксации составляют 0,29 и 0,22 с для капель с начальными диаметрами 0,769 и 0,557 мм (соответствующие начальные значения числа Рейнольдса равны 150 и 75). Таким образом, характерное время динамической релаксации намного меньше времени жизни капли (166 и 100 с соответственно). Это значит, что по истечении очень малого начального промежутка значения скорости рассматриваемых капель становятся равными установившимся значениям. Рис. 7 показывает, что расчет по модели [8]

удовлетворительно воспроизводит данные измерений [16], что указывает на приемлемую точность используемого закона сопротивления сферических капель.

Итак, в данной работе модель испарения капли [8] применена для расчета динамики испарения капель чистого ацетона и воды в условиях экспериментов, в которых были измерены зависимости от времени температуры, диаметра или скорости осаждения капли. Для рассматриваемых экспериментальных данных характерно использование двух жидкостей с существенно разной скоростью испарения (ацетон и вода) при разном соотношении начальной температуры капли и равновесной температуры, которая, в свою очередь, определяется температурой и влажностью окружающей среды, а также скоростью набегающего потока.

В работе выполнено сравнение результатов расчетов, выполненных с помощью приближенной модели теплопередачи внутри капли на основе параболического профиля температуры и при использовании численного решения уравнения теплопроводности в капле. Оказалось, что отличие исчезает по истечении начального временного интервала, длительность которого имеет порядок времени релаксации поля температуры в капле τ_l. Данный интервал составляет лишь малую часть времени релаксации среднеобъемной температуры капли к своему равновесному значению (температуре мокрого термометра), а указанное время релаксации, в свою очередь, намного меньше времени жизни испаряющейся капли. Это подтверждает обоснованность использования параболического профиля в качестве приближенного решения уравнения теплопроводности при расчете испарения капли.

Сравнение результатов расчетов с результатами измерений позволяет сделать следующие выводы. Имеет место удовлетворительное согласие расчетных и измеренных данных (среднеобъ-

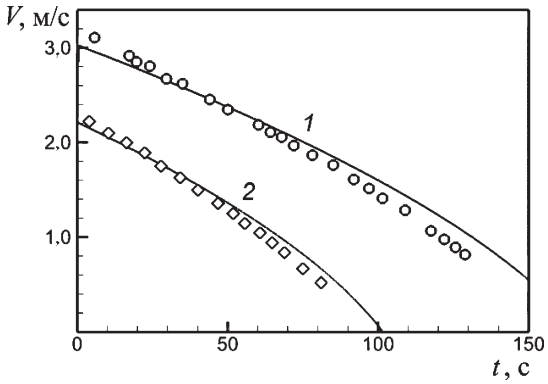


Рис. 7. Изменение скорости испаряющейся капли при свободном падении: *1* — d_0 = 0,769 мм (V_0 = 3,5 с, $T_0 = T_{air}$ = 23 °C, P_{air} = 99940 Па), *2* — d_0 = 0,557 мм (V_0 = 2,3 с, $T_0 = T_{air}$ = 24,3 °C, P_{air} = 99330 Па)

Линии — расчет, точки — измерения [16]

емная температура, диаметр, скорость осаждения капли) в рассмотренных режимах испарения. Модель испарения капли, сформулированная в [8], удовлетворительно воспроизводит динамику испарения капель как легколетучей (ацетон), так и труднолетучей (вода) жидкости, причем для воды согласие расчетных и измеренных данных получено как для крупнодисперсных (1–3 мм), так и мелкодисперсных (0,04–0,06 мм) капель.

С учетом сделанных выводов модель испарения капли [8] может быть рекомендована для использования в качестве модуля в модели Fire3D [9], разрабатываемой для численного прогнозирования динамики пожаротушения тонкораспыленными огнетушащими жидкостями.

Данная 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). Эксперименты по испарению капель ацетона и воды выполнены при участии К.А. Куфтырёва.

Приложение

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

Зависимость теплофизических свойств жидкостей (ацетон, вода) от температуры определяли по опубликованным данным [17–23] и аппроксимировали полиномами:

$$c_{P,liq}(T) = \sum_i c_{P,liq}^{(i)} T^i \text{ , Дж/(кг·К);}$$

$$\rho_{liq}(T) = \sum_i \rho_{liq}^{(i)} T^i \text{ , кг/м}^3\text{;}$$

$$\sigma_{liq}(T)=\sum_i \sigma_{liq}^{(i)} T^i \text{ , Н/м;}$$

$$\mu_{liq}(T)=\sum_i \mu_{liq}^{(i)} T^i \text{ , Па·с;}$$

$$\lambda_{liq}(T)=\sum_i \lambda_{liq}^{(i)} T^i \text{ , Вт/(м·К),}$$

где температура T выражена в К.

Численные значения полиномиальных коэффициентов приведены в табл. П.1 для ацетона и П.2 для воды.

Зависимость теплофизических свойств пара от температуры определяли по опубликованным данным [17–23] и аппроксимировали полиномами:

$$c_{P,vap}(T)=\sum_i c_{P,vap}^{(i)}\left(T-T^0\right)^i \text{ , Дж/(кг·К);}$$

$$\mu_{vap}(T)=\sum_i \mu_{vap}^{(i)} T^i \text{ , Па·с;}$$

$$\lambda_{vap}(T)=\sum_i \mu_{vap}^{(i)} T^i \text{ , Вт/(м·К),}$$

где температура T выражена в К и T^0 = 298,15 К. Численные значения полиномиальных коэффициентов приведены в табл. П.3 для ацетона и П.4 для воды.

Коэффициент диффузии пара в воздухе вычисляли по формуле [22]:

$$\mathscr{D}_{vap}(T)=1{,}8583\cdot 10^{-7}\times$$

$$\times\sqrt{T^3\left(\frac{1}{M_{vap}}+\frac{1}{M_{air}}\right)}\frac{1}{P\sigma_{vap-air}^2\Omega_{\mathscr{D}}} \text{ , м}^2\text{/с,}$$

где M_{air} = 28,85 г/моль; M_{vap} = 58,08 г/моль для ацетона и 18,015 г/моль для воды; P = 1 атм; $\sigma_{vap-air}=\left(\sigma_{vap}+\sigma_{air}\right)/2$ выражено в Å; T выражена в К. Интеграл столкновений для потенциала Леннарда — Джонса вычисляли по интерполяционной формуле [22]:

Таблица П.1

Численные значения полиномиальных коэффициентов (жидкий ацетон)

i	$c_{P,liq}^{(i)}$	$\rho_{liq}^{(i)}$	$\sigma_{liq}^{(i)}$	$\mu_{liq}^{(i)}$	$\lambda_{liq}^{(i)}$
0	2,221869E + 03	1,128519E + 03	6,064579E – 02	1,165992E – 03	2,720543E – 01
1	–1,540310E + 00	–1,153500E + 00	–1,260000E – 04	–2,831074E – 06	–3,755591E – 04
2	–1,548394E – 03	0	0	0	0
3	2,0747544E – 05	0	0	0	0

Таблица П.2

Численные значения полиномиальных коэффициентов (вода)

i	$c_{P,liq}^{(i)}$	$\rho_{liq}^{(i)}$	$\sigma_{liq}^{(i)}$	$\mu_{liq}^{(i)}$	$\lambda_{liq}^{(i)}$
0	1,056524E + 04	2,483620E + 02	1,161726E–01	4,808200E–01	–4,613208E–01
1	–5,549487E + 01	6,632476E–00	–1,476881E–04	–5,581131E–03	5,729264E–03
2	1,588475E–01	–1,839273E–02	0	2,440365E–05	–7,159082E–06
3	–1,493784E–04	1,532476E–05	0	–4,754580E–08	0
4	0	0	0	3,478704E–11	0

Таблица П.3

Численные значения полиномиальных коэффициентов (газообразный ацетон)

i	$c_{P,vap}^{(i)}$	$\mu_{vap}^{(i)}$	$\lambda_{vap}^{(i)}$
0	1,351604E + 03	2,267423E – 06	–1,012E – 02
1	2,682825E + 00	1,487149E – 08	5,290E – 05
2	–9,218182E – 04	1,206107E – 11	5,780E – 08

Таблица П.4

Численные значения полиномиальных коэффициентов (водяной пар)

i	$c_{P,vap}^{(i)}$	$\mu_{vap}^{(i)}$	$\lambda_{vap}^{(i)}$
0	1,864424E + 03	−1,724378E − 06	−5,302160E − 04
1	2,694378E − 01	3,442102E − 08	4,132031E − 05
2	1,087549E − 03	7,832654E − 12	7,205514E − 08
3	−1,454627E − 06	−3,806505E − 15	−1,595361E − 11
4	1,206020E − 09	0	0
5	−6,597280E − 13	0	0
6	1,997766E − 16	0	0
7	−2,464166E − 20	0	0

$$\Omega_{\mathscr{D}} = \frac{A}{T_*^B} + \sum_{i=1}^{3} C_i \exp\left(-\frac{D_i}{T_*}\right),$$

где $A = 1{,}0636$: $B = 0{,}1561$, $C_1 = 0{,}193$; $D_1 = 0{,}47635$; $C_2 = 1{,}03587$; $D_2 = 1{,}52996$; $C_3 = 1{,}76474$; $D_3 = 3{,}89411$; $T_* = T\Big/\left(\varepsilon_{vap-air}/k_{\text{B}}\right)$, $\varepsilon_{vap-air} = \sqrt{\varepsilon_{vap}\varepsilon_{air}}$.

Для воздуха использовали данные [22]: $\varepsilon_{air}/k_{\text{B}} = 97$ K; $\sigma_{air} = 3{,}617$ Å; для газообразного ацетона — данные [23]: $\varepsilon_{vap}/k_{\text{B}} = 560{,}2$ K; $\sigma_{vap} = 4{,}600$ Å; для водяного пара — данные [23]: $\varepsilon_{vap}/k_{\text{B}} = 809{,}1$ K; $\sigma_{vap} = 2{,}641$ Å.

Вычисленную зависимость $\mathscr{D}_{vap}(T)$ аппроксимировали степенной функцией вида:

$$\mathscr{D}_{vap}(T) = \mathscr{D}_{vap,0}\left(\frac{T}{273{,}15}\right)^{n_{\mathscr{D}}},$$

где для диффузии газообразного ацетона в воздухе получено $\mathscr{D}_{vap,0} = 0{,}0915\cdot10^{-4}$ м^2/с, $n_{\mathscr{D}} = 1{,}745$; а для диффузии водяного пара в воздухе — $\mathscr{D}_{vap,0} = 0{,}1922\cdot10^{-4}$ м^2/с; $n_{\mathscr{D}} = 1{,}767$.

Давление насыщенного пара вычисляли по формуле Антуана:

$$P_{sat}(T) = 10^5 \cdot 10^{A-\frac{B}{T+C}}, \text{ Па}$$

где для ацетона принимали $A = 4{,}24448$; $B = 1312{,}253$; $C = -32{,}445$, а для воды использовали данные табл. П.5 [19].

Теплоту испарения вычисляли по формуле

$$\Delta h_{vap}(T) = \Delta h_{vap}^{boil} + c\left(T_{boil} - T\right), \text{ Дж/кг},$$

где для ацетона принимали $\Delta h_{vap}^{boil} = 0{,}501\cdot10^6$ Дж/кг; $T_{boil} = 329{,}3$ K; $c = 991{,}638$ Дж/(кг·K) [19], а для воды — $\Delta h_{vap}^{boil} = 2{,}26\cdot10^6$ Дж/кг; $T_{boil} = 373{,}15$ K; $c = 2500$ Дж/(кг·K).

Аппроксимация свойств жидкой фазы выполнена в диапазоне температур от температуры плавления до температуры кипения при давлении 1 атм. Аппроксимация свойств жидкой фазы выполнена в диапазоне температур от 200 до 2000 K.

Вязкость и теплопроводность смеси пара и воздуха определяли по формулам [24]:

$$\mu = \sum_{i,i\neq j} \frac{\mu_i}{1 + \varphi_{ij}\, X_j / X_i};$$

Таблица П.5

Значения констант в формуле Антуана для воды [19]

T, K	A	B	C
273–303	5,40221	1838,675	−31,737
304–333	5,20389	1733,926	−39,485
334–363	5,07680	1659,793	−45,854
344–373	5,08354	1663,125	−45,622

$$\lambda = \sum_{i,i\neq j} \frac{\lambda_i}{1+1{,}065\varphi_{ij}\, X_j/X_i},$$

где $\varphi_{ij} = \dfrac{\left(1+\sqrt{\mu_i/\mu_j}\sqrt{M_j/M_i}\right)}{\sqrt{8\left(1+M_i/M_j\right)}}$.

Отметим, что для смеси водяного пара и воздуха оказалось допустимым использование упрощенных соотношений $\mu = \sum_i \mu_i X_i$ и $\lambda = \sum_i \lambda_i X_i$, а для смеси газообразного ацетона и воздуха — равенств $\mu = 1\Big/\sum_i X_i/\mu_i$ и $\lambda = 1\Big/\sum_i X_i/\lambda_i$. В указанных случаях отклонение от более точных формул, приведенных выше, не превышало нескольких процентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

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

3. **Miliauskas, G.** Interaction of transfer processes during unsteady evaporation of water droplets [Текст] / G. Miliauskas, V. Sabanas // International Journal of Heat and Mass Transfer.— 2006.— Vol. 49.— No. 11–12.— P. 1790–1803.

4. **Sazhin, S.S.** A simplified model for bi-component droplet heating and evaporation. Original Research Article [Текст] / 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 [Текст] / L.A. Dombrovsky, S.S. Sazhin // ASME Journal of Heat Transfer.— 2003.— Vol. 125.— P. 535–537.

6. **Sazhin, S.S.** New approaches to numerical modelling of droplet transient heating and evaporation [Текст] / S.S. Sazhin, W.A. Abdelghaffar, P.A. Krutitskii, E.M. Sazhina [et al.] // International Journal of Heat and Mass Transfer.— 2005.— Vol. 48.— No. 19–20.— P. 4215–4228.

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

8. **Снегирёв, А.Ю.** Модель и алгоритм расчета теплообмена и испарения капель диспергированной жидкости [Текст] / А.Ю. Снегирёв, С.С. Сажин, В.А. Талалов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.— 2011.— № 1.— С. 44–55.

9. **Snegirev, A.** Flame suppression by water sprays: flame-spray interaction regimes and governing criteria [Текст] / 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.

10. **Maqua, C.** Bicomponent droplets evaporation: Temperature measurements and modeling [Текст] / C. Maqua, G. Castanet, F. Lemoine // Fuel.— 2008.— Vol. 87.— No. 13–14.— P. 2932–2942.

11. **Maqua, C.** Monodisperse droplet heating and evaporation: Experimental study and modeling [Текст] / C. Maqua, G. Castanet, F. Grisch [et al.] // International Journal of Heat and Mass Transfer.— 2008.— Vol. 51.— No 15–16.— P. 3932–3945.

12. **Терехов, В.И.** Тепломассообмен при испарении капель бинарных растворов [Текст] / В.И. Терехов, Н.Е. Шишкин // Труды 5-й Российской национальной конференции по тепломассообмену РНКТ-5.— М.: Изд-во МЭИ.— 2010.— Т. 4.— С. 302–305.

13. **Fujita, A.** Experimental study on effect of relative humidity on heat transfer of an evaporating water droplet in air flow [Текст] / A. Fujita, R. Kurose, S. Komori // International Journal of Multiphase Flow.— 2010.— Vol. 36.— No 3.— P. 244–247.

14. **Miller, R.S.** Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations [Текст] / R.S. Miller, K. Harstad, J. Bellan // International Journal of Multiphase Flow.— 1998.— Vol. 24.— No 6.— P. 1025–1055.

15. **Taflin, D.C.** Measurement of droplet interfacial phenomena by light-scattering techniques [Текст] / D.C. Taflin, S.H. Zhang, T. Allen, E.J. Davis // A.I.Ch.E. Journal.— 1988.— Vol. 34.— P. 1310–1320.

16. **Gavin, P.M.** Program DROP: A computer program for prediction of evaporation from freely falling multicomponent drops [Текст] / P.M. Gavin // Report No. SAND96-2878.— Sandia National Laboratories.— 1996.

17. **Варгафтик, Н.Б.** Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей [Текст] / Н.Б. Варгафтик. М.: Наука.— 1972.— 721 с.

18. **Варгафтик, Н.Б.** Справочник по теплопроводности жидкостей и газов [Текст] / Н.Б. Варгафтик.— М.: Энергоатомиздат.— 1990.— 316 с.

19. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс] http://webbook.nist.gov

20. **Dean, J.A.** Lange's handbook of chemistry [Текст]: 15th ed. / J.A. Dean.— New York: McGraw-Hill.— 1999.— 345 p.

21. **Бабичев, А.П.** Физические величины [Текст]: Справочник. / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский [и др.]. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова.— М.: Энергоатомиздат.— 1991.— 1232 с.

22. **Bird, R.B.** Transport phenomena. [Текст]: 2nd ed. / R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot.— New York: Wiley, Sons, Inc.— 2002.— 895 p.

23. **Reid, R.C.** The properties of gases and liquids. [Текст]: 4th ed. / R.C. Reid, J.M. Prausnitz, B.E. Poling.— New York: McGraw-Hill.— 1987.— 741 p.

24. **Бретшнайдер, С.** Свойства газов и жидкостей. Инженерные методы расчета [Текст] / С. Бретшнайдер.— М.: Химия.— 1966.— 536 с.

25. **Ranz, W.E.** Evaporation from drops: II [Текст] / W.E. Ranz, W.R. Marshall // Chemical Engineering Progress.— 1952.— Vol. 48. P. 173–180.

УДК 536.423

И.Я. Шейнман, А.Ю. Снегирёв

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ КАПЕЛЬ В ГАЗОКАПЕЛЬНОЙ СТРУЕ

Струйные течения распыленной жидкости встречаются в важных технологических приложениях: при смесеобразовании в двигателях внутреннего сгорания, в топках котлов, работающих на жидком топливе, в системах пожаротушения и охлаждения, в технологиях сушки суспензий, порошковой металлургии, при аварийных выбросах сжиженных газов, а также в атмосферных явлениях. Для понимания особенностей и прогнозирования поведения подобных течений наряду с экспериментальными исследованиями необходимо развитие математических моделей тесно взаимодействующих физических процессов в газокапельной струе. Среди них одним из наименее исследованных является столкновение капель жидкости, которое характерно для плотных спреев и непосредственно влияет на распределение капель по размерам и скоростям, а также (опосредованно) на скорость их испарения и течение парогазовой смеси. Несмотря на значительное количество опубликованных работ и разнообразие теоретических моделей исходов столкновений [1], на сегодняшний день отсутствуют параметрические исследования, указывающие область характеристик распыла жидкости, в которой роль столкновений значительна или, наоборот, пренебрежимо мала. Кроме того, подавляющее большинство работ по моделированию столкновений в газокапельных струях ориентировано на область параметров, характерных для задач ввода топлива и смесеобразования в дизельных двигателях, а приложениям в области пожаротушения посвящены лишь единичные публикации, например статья [2].

В представленной работе приводится модель столкновений капель, программно реализованная авторами в коде Fire3D [3], предназначенном, в частности, для расчета турбулентных газокапельных струй огнетушащих жидкостей. Обсуждаются результаты численного тестирования двух используемых моделей подсчета частоты столкновений капель. Описанная модель столкновений капель применена для расчета турбулентной газокапельной струи испаряющейся жидкости, что позволило продемонстрировать влияние столкновений на расчетную концентрацию пара в струе.

Модель газокапельной струи

Для моделирования турбулентного течения газа используется метод крупных вихрей [4, 5]. Для расчета подсеточной вязкости применяется модель Смагоринского — Лилли, позволяющая учесть снижение указанной вязкости по мере приближения к твердой поверхности [5]. Влияние дисперсной фазы на подсеточную модель не учитывается, что представляется допустимым при условии малости энергии подсеточных пульсаций скорости по сравнению с энергией разрешенного поля.

Предполагается, что атомизация струи жидкости происходит внутри форсунки и на корот-

ком участке вблизи среза сопла, длиной которого можно пренебречь. Вторичный распад капель в потоке газа из-за возникающих неустойчивостей не рассматривается. Распределение капель распыленной жидкости по диаметрам у среза сопла описывается комбинированной функцией [6], включающей логнормальное распределение для капель с диаметром, меньшим медианного объемного диаметра, и распределение Розина — Раммлера для остальных капель.

Для моделирования движения, теплообмена и испарения капель жидкости используется дискретно-траекторный (Лагранжев) подход, в рамках которого численно решаются уравнения баланса импульса, энергии и массы для отдельных капель совместно с уравнениями, определяющими их положение в пространстве. Реальное количество капель настолько велико, что не позволяет проследить эволюцию каждой из них, поэтому вместо отдельных капель рассматриваются вычислительные частицы (parcels). Вычислительная частица представляет собой совокупность капель с близкими характеристиками (размером, температурой, скоростью движения).

Модель нагрева и испарения капель учитывает неравномерность поля температуры внутри капли и циркуляцию жидкости в ней. Описания модели и соответствующего численного алгоритма приводятся в работе [7].

Взаимное влияние дисперсной фазы и течения газа осуществляется за счет присутствия в отфильтрованных уравнениях Навье — Стокса источниковых слагаемых, описывающих межфазный обмен и зависящих, в свою очередь, от масс, скоростей и температур капель жидкости в выбранном элементарном объеме и температуры и скорости течения газовой смеси. Кроме того, учтено влияние подсеточных турбулентных пульсаций на движение капель [3].

Модель столкновений капель

Традиционно [1] для моделирования столкновения капель в спреях используются методы, основанные на статистическом моделировании (метод Монте-Карло). При этом задача учета столкновений капель разбивается на две подзадачи: установление факта столкновения двух капель и моделирование исхода такого столкновения.

Решение о том, произошло ли столкновение, принимается на основе оценки вероятности этого события. В данной работе наступление события столкновения капель определяется с помощью двух методов: O'Рурка (O'Rourke) [8] и NTC (No Time Counter) [9].

Метод O'Рурка получил широкое распространение и к настоящему времени реализован в большинстве коммерческих (например, в Fluent) и открытых свободно распространяемых программ (например, в KIVA). Метод NTC — более новый и позволяет уменьшить объем вычислений по сравнению с методом O'Рурка.

Оба метода базируются на расщеплении алгоритма по физическим процессам (концепция дробных шагов). Пусть на заданной расчетной сетке выполнен «газодинамический» дробный шаг вычислительного алгоритма и получены поля скорости, температуры и концентрации парогазовой смеси, а также выполнен шаг для уравнений движения, нагрева и испарения капель. Моделирование столкновений капель выделяется в отдельный дробный шаг. При этом учитываются только бинарные столкновения, для которых делаются следующие допущения.

Во-первых, считается, что столкновения могут происходить только между частицами, находящимися в одной и той же ячейке пространственной сетки. Отметим, что в общем случае эта сетка может не совпадать с пространственной сеткой, на которой решаются уравнения для газовой фазы. Во-вторых, несмотря на то, что в результате первого шага алгоритма, моделирующего перенос газовой и дисперсной фаз, координаты частиц известны, при моделировании столкновений предполагается, что вычислительные частицы с равной вероятностью могут располагаться в любой точке внутри занимаемой ими ячейки пространственной сетки. Это позволяет вместо расчета траекторий капель и определения их возможного пересечения рассматривать вероятности столкновений капель.

Вероятность столкновения p_{ij} двух капель с номерами i и j в течение заданного промежутка времени Δt пропорциональна их относительной скорости $v_{ij} = \left|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j\right|$ и сечению соударения $\sigma_{ij} = \pi(r_i + r_j)^2$:

$$p_{ij} = \frac{\sigma_{ij} v_{ij} \Delta t}{\Delta V}, \qquad (1)$$

где ΔV — объем ячейки пространственной сетки; r_i, r_j — радиусы капель.

Средняя частота столкновений одной капли из вычислительной частицы номер i с каплями, принадлежащими вычислительной частице номер j, равна

$$n_{ij} = \frac{p_{ij} q_j}{\Delta t}, \qquad (2)$$

где q_j — количество капель в вычислительной частице номер j.

Метод О'Рурка. Рассмотрим произвольную пару капель, принадлежащую вычислительным частицам с номерами i и j. Частицу номер i, содержащую капли большего радиуса, назовем коллектором. В алгоритме О'Рурка определяется факт столкновения выбранной капли из частицы-коллектора, с произвольной каплей, принадлежащей второй вычислительной частице (номер j) из рассматриваемой пары. Вероятность того, что капля из частицы-коллектора за время Δt испытает k соударений, определяется распределением Пуассона:

$$P(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \qquad (3)$$

где $\lambda = n_{ij}\Delta t = p_{ij} q_j$.

Следовательно, вероятность того, что капля, принадлежащая коллектору, не испытает ни одного соударения, равна

$$P(0) = e^{-p_{ij} q_j}. \qquad (4)$$

В методе О'Рурка по очереди перебираются все возможные пары вычислительных частиц, находящихся в одной ячейке пространственной сетки, и для каждой пары вычисляется вероятность отсутствия столкновения по формуле (4). При этом генерируется случайная величина X, равномерно распределенная в интервале [0, 1]. Если оказывается, что $X > P(0)$, то принимается, что капля из частицы-коллектора испытала столкновение с хотя бы одной каплей из второй вычислительной частицы в паре, иначе считается, что столкновений не происходит. Тем самым решается первая подзадача (установление факта столкновения).

Число всех возможных пар, которые необходимо рассмотреть в методе О'Рурка при подсчете числа столкновений, составляет $N(N-1)/2$, где N — количество частиц в ячейке пространственной сетки. Это означает, что объем вычислений быстро растет с увеличением N. Рассматриваемый ниже метод NTC вместо полного перебора использует выборку пар-кандидатов, причем число тестируемых на столкновение пар растет медленнее, чем в случае полного перебора, и пропорционально первой степени количества частиц в ячейке.

Метод NTC. Идея метода детально описана в [9] и заключается в следующем. Зная среднюю частоту столкновений между каплями (2), принадлежащими двум различным частицам, можно найти среднее ожидаемое число столкновений в ячейке сетки:

$$M_{coll} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} q_i \sum_{j=1}^{N} q_j \frac{v_{ij}\sigma_{ij}\Delta t}{V}. \qquad (5)$$

Введем параметр $(qv\sigma)_{\max}$, гарантирующий для любой пары вычислительных частиц выполнение условия $q_i v_{ij}\sigma_{ij} / (qv\sigma)_{\max} < 1$. Используя этот параметр, преобразуем выражение (5) для числа столкновений на шаге по времени:

$$M_{coll} = a\sum_{i=1}^{N} q_i a\sum_{j=1}^{N} \frac{q_j v_{ij}\sigma_{ij}}{(qv\sigma)_{\max}}, \qquad (6)$$

где $a = \sqrt{(qv\sigma)_{\max}\Delta t / (2V)}$.

Для большой совокупности частиц ($N >> 1$) выполняется равенство [9]:

$$\sum_{i=1}^{aN} x_i = a\sum_{i=1}^{N} x_i, \qquad (7)$$

где $a < 1$.

Используем данное соотношение и предполагаем выполнение неравенства $a < 1$; тогда можно преобразовать равенство (6) к следующему виду:

$$M_{coll} = \sum_{i=1}^{aN} q_i \sum_{j=1}^{aN} \frac{q_j v_{ij}\sigma_{ij}}{(qv\sigma)_{\max}}. \qquad (8)$$

Важно отметить, что в этом равенстве число перебираемых при суммировании пар-кандидатов определяется как

$$M_{cand} = (aN)^2 = \frac{N^2}{2}\frac{(qv\sigma)_{\max}\Delta t}{V}, \qquad (9)$$

которое при $a < 1$ становится меньше полного числа пар, рассматриваемых при суммировании в равенстве (5). На основании равенства (8) делается вывод о том, что при оценке числа столкновений достаточно рассмотреть не полное чис-

ло пар (как это делается в методе О'Рурка), а лишь число пар, равное M_{cand}. Поскольку для числа капель в вычислительной частице имеет место соотношение $q \sim 1/N$, то для числа пар-кандидатов в методе NTC будем иметь $M_{cand} \sim N$ (в отличие от N^2 в методе О'Рурка).

Процедура моделирования столкновения капель в методе NTC состоит из следующих этапов.

Для рассматриваемой ячейки пространственной сетки, содержащей N вычислительных частиц, оценивается величина $(qv\sigma)_{\max}$ по следующему приближенному соотношению:

$$(qv\sigma)_{\max} \approx \max_k(q_k)2\max_k(v_k)4\pi\max_k(r_k^2),$$

$$k = \overline{1, N}.$$

1. Случайным образом в рассматриваемой ячейке сетки выбираются две вычислительные частицы: i и j. Среди них определяется вычислительная частица с наибольшим числом капель q_g.

2. Генерируется случайное число X, равномерно распределенное в интервале [0, 1].

3. Если выполняется неравенство $X < \dfrac{q_g v_{ij}\sigma_{ij}}{(qv\sigma)_{\max}}$, то предполагается, что столкновение между каплями, принадлежащими рассматриваемым частицам, произошло.

Шаги 1–3 выполняются до тех пор, пока не будет перебрано число пар-кандидатов, заданное равенством (9).

В случае больших значений объемной концентрации капель может оказаться, что $a = \sqrt{(qv\sigma)_{\max}\Delta t/(2V)} > 1$. В этом случае метод NTC не позволяет сократить число пар-кандидатов и следует использовать метод О'Рурка. В связи с этим в алгоритме, реализованном в Fire3D, выполняется проверка указанного условия и делается выбор между двумя методами.

Тестирование алгоритма подсчета числа столкновений. Для тестирования методов подсчета числа столкновений рассмотрим цилиндрическую область, в которой находятся движущиеся капли. Пусть радиусы и осевые проекции скорости капель — случайные величины, равномерно распределенные в диапазонах $(0, r_{\max}]$ и $(0, v_{\max}]$ соответственно. Радиальная проекция скорости равна нулю. В этом случае число столкновений за время $\Delta\tau$ можно рассчитать аналитически:

$$M_{coll} = \frac{1}{2}\int_0^{r_{\max}}\int_0^{r_{\max}}\int_0^{u_{\max}}\int_0^{u_{\max}} \frac{|u_1 - u_2|\pi(r_1 + r_2)^2\Delta t}{\Delta V} \times$$

$$\times Nf_u(u_1)f_r(r_1)du_1dr_1\,Nf_u(u_2)f_r(r_2)du_2dr_2 =$$

$$= \frac{7\pi\Delta t N^2 u_{\max} r_{\max}^2}{36V}, \qquad (10)$$

где f_r, f_u — функции распределения капель по размеру и осевой проекции скорости.

Приведенная тестовая задача решалась в данной работе с помощью описанных в предыдущем разделе алгоритмов (методы О'Рурка и NTC) для следующих числовых параметров: $\Delta V = 3{,}75\cdot10^{-6}$ м^3; полное число капель в ячейке $N = 7{,}5\cdot10^5$; $r_{\max} = 0{,}050$ мм; $v_{\max} = 20$ м/с; $\Delta t = 10^{-4}$ с. Данные значения соответствуют режиму плотной газокапельной струи с объемной долей дисперсной фазы около 10 %. Объем пространственной ячейки ΔV и временной шаг Δt являются характерными для расчетов турбулентной газокапельной струи методом крупных вихрей. Отметим, что приведенные параметры существенно отличаются от использованных в работе [9], где тестирование выполнено для максимальных значений скорости капель 100 м/с, характерных для ДВС.

В расчетах фиксировали количество вычислительных частиц, причем число капель во всех вычислительных частицах принималось одинаковым. На рис. 1 приведена зависимость относительной погрешности расчетов от количества вычислительных частиц N_p, определяемой по формуле

$$\Delta = \frac{M_{calc} - M_{theor}}{M_{theor}} \cdot 100\,\%,$$

где M_{calc} — число столкновений, полученное в результате численного моделирования, M_{theor} — число столкновений, рассчитанное по точному аналитическому решению (10).

Каждая точка на графике соответствует значению, осредненному по 50 независимым расчетам.

Отметим, что с увеличением количества вычислительных частиц оба метода дают сходимость к точному решению с примерно одинаковой скоростью. При этом, как видно из рис. 2, количество рассматриваемых пар частиц в методе NTC может быть на порядок меньше, чем

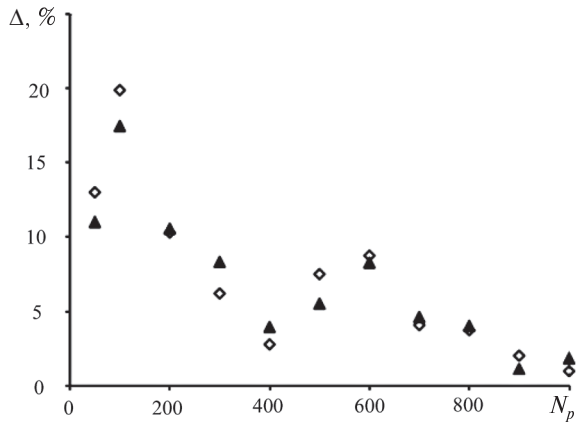


Рис. 1. Зависимость относительной погрешности расчета числа столкновений от количества вычислительных частиц: ▲ — метод О'Рурка, ◊ — метод NTC

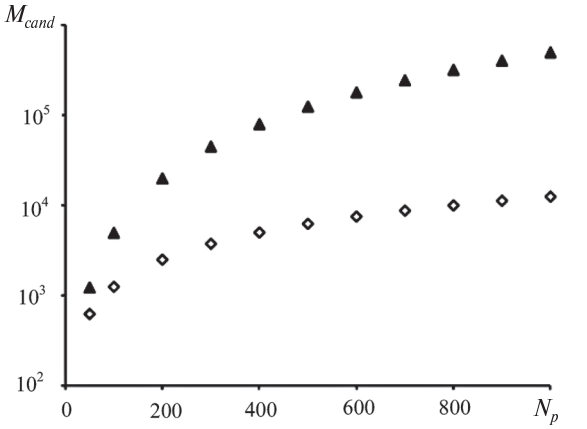


Рис. 2. Зависимость числа рассматриваемых пар-кандидатов от количества вычислительных частиц: ▲ — метод О'Рурка, ◊ — метод NTC

при полном переборе, что особенно важно при большом количестве вычислительных частиц, используемых в расчетах газокапельных струй.

Модель исхода столкновения капель

В данной работе используется приближенная модель исходов столкновений, предложенная Бразье-Смитом (Brazier-Smith) в работах [10, 11]. Данная модель широко применяется в коммерческих и открытых вычислительных кодах и является базовым компонентом более детальных моделей исходов столкновений. Многочисленные эксперименты позволили установить, что на исход столкновения двух капель влияют три безразмерных параметра: число Вебера

$$\mathrm{We} = \rho_l \left(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j\right)^2 \left(r_i + r_j\right) \Big/ \sigma_l ,$$

прицельный параметр (impact factor) B и отношение радиусов сталкивающихся капель $\gamma = r_i / r_j$.

Число Вебера в данном случае строится по относительной скорости капель, плотности ρ_l и коэффициенту поверхностного натяжения σ_l жидкости.

Смысл прицельного параметра поясняется на рис. 3, где показано столкновение двух капель, рассматриваемое в системе их центра масс.

Прицельный параметр определяется как

$$B = \frac{b}{r_i + r_j} = \sin\theta, \qquad (11)$$

где b — длина перпендикуляра, опущенного из центра одной капли на линию вектора скорости другой капли. В некоторых работах под прицельным параметром понимается размерная величина b.

Модель Бразье-Смита предусматривает два возможных исхода столкновения: слияние двух капель с образованием одной устойчивой общей (коалесценция, coalescence) или образование короткоживущей неустойчивой капли, быстро распадающейся на две (grazing collision). Выбор одного из двух возможных исходов осуществляется на основе расчета критического прицельного параметра:

$$\frac{b_{crit}^2}{\left(r_i + r_j\right)^2} = \min\left(2{,}4\frac{\gamma^3 - 2{,}4\gamma^2 + 2{,}7\gamma}{\mathrm{We}},\ 1\right). \qquad (12)$$

Прицельный параметр для пары сталкивающихся капель является случайной величиной. Для определения исхода столкновения разыгрывается случайная величина Y, равномерно распределенная в интервале от 0 до 1. Если выполняется условие

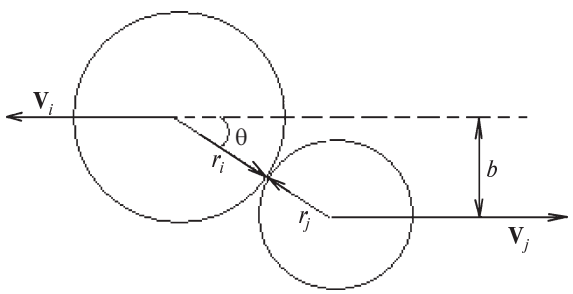


Рис. 3. Схема к определению прицельного параметра

$$\sqrt{Y}(r_i + r_j) < b_{crit}, \qquad (13)$$

то принимается, что исходом столкновения является коалесценция. В этом случае радиус образовавшейся капли определяется законом сохранения массы, а скорость — законом сохранения импульса.

Капли, образовавшиеся в результате коалесценции, принадлежат вычислительной частице, содержавшей капли большего радиуса. При этом предполагается, что все капли из данной частицы поглощают одинаковое количество малых капель.

В методе О'Рурка допускается, что капля большего радиуса может поглотить несколько малых капель. Количество этих капель n определяется соотношением

$$\sum_{k=0}^{n-1} P_k \le X < \sum_{k=1}^{n} P_k,$$

где X — случайная величина, разыгранная при установлении факта столкновения пары вычислительных частиц, а вероятность P_k вычисляется по формуле (3).

Если малых капель оказывается недостаточно, то число n пересчитывается таким образом, чтобы обеспечить участие в коалесценции всех крупных капель, а вычислительная частица, содержавшая малые капли, исчезает. В методе NTC рассматривается попарная коалесценция ($n = 1$). При этом полагается, что в столкновении участвуют $q_l = \min(q_i, q_j)$ пар капель, где q_i, q_j — количества капель в рассматриваемых вычислительных частицах. Оставшиеся капли не изменяют своих параметров.

Если условие (13) не выполняется, то считается, что образовавшаяся общая промежуточная капля неустойчива и распадается на две с размерами, совпадающими с исходными каплями. Детальное изложение модели распада промежуточной капли приведено в работах [8, 10]. Там же показано, что направления движения капель, образовавшихся после распада, совпадают с исходными, а модули скоростей изменятся:

$$v_i' = C + m_j\left(v_i - v_j\right)D;$$

$$v_j' = C + m_i\left(v_j - v_i\right)D, \qquad (14)$$

где $C = \dfrac{m_i v_i + m_j v_j}{m_i + m_j}$;

$$D = \frac{b - b_{crit}}{\left(r_j + r_i - b_{crit}\right)\left(m_i + m_j\right)};$$

m — масса капли, v_i', v_j' — модули скорости после соударения и разлета капель.

В этом случае в методе О'Рурка, так же, как и в методе NTC, взаимодействуют q_l пар капель. При этом для частицы с меньшим числом капель скорости определяются по формуле (14). Для частицы с большим числом капель q_g проводится коррекция скоростей $\mathbf{v}$ всех капель по формуле

$$\mathbf{v} = (q_l \mathbf{v}_1 + (q_g - q_l)\mathbf{v}_0) / q_g, \qquad (15)$$

где $\mathbf{v}_1$ — скорость, полученная по формуле (14), $\mathbf{v}_0$ — скорость капель до соударения.

Благодаря этому количество вычислительных частиц не возрастает.

Численный расчет турбулентной газокапельной струи испаряющейся жидкости с учетом столкновений капель

К настоящему времени влияние столкновений капель на динамику испарения и концентрацию пара в струе остается неисследованным. Для того чтобы оценить значимость столкновений капель, была выполнена серия расчетов с учетом и без учета столкновений для следующей модельной задачи.

Рассмотрим газокапельную струю летучей жидкости (ацетон), распространяющуюся в камере, заполненной воздухом и имеющей форму прямоугольного параллелепипеда с габаритами $L_x = L_y = 0{,}15$ м, $L_z = 0{,}40$ м. Струя создается односопловой форсункой, расположенной на нижнем торце камеры (рис. 4). Боковая поверхность камеры и ее нижний торец образованы твердыми стенками, верхний торец открыт.

В начальный момент времени воздух в камере неподвижен, его температура равна температуре вне камеры и составляет 27 °C. Стенки камеры являются изотермическими, температура стенок равна начальной температуре воздуха в камере. Начальная температура капель жидкости также равна 27 °C. Задача решалась в трехмерной постановке на неравномерной прямоугольной пространственной сетке.

Расчеты показали, что количество столкновений капель на заданном малом промежутке

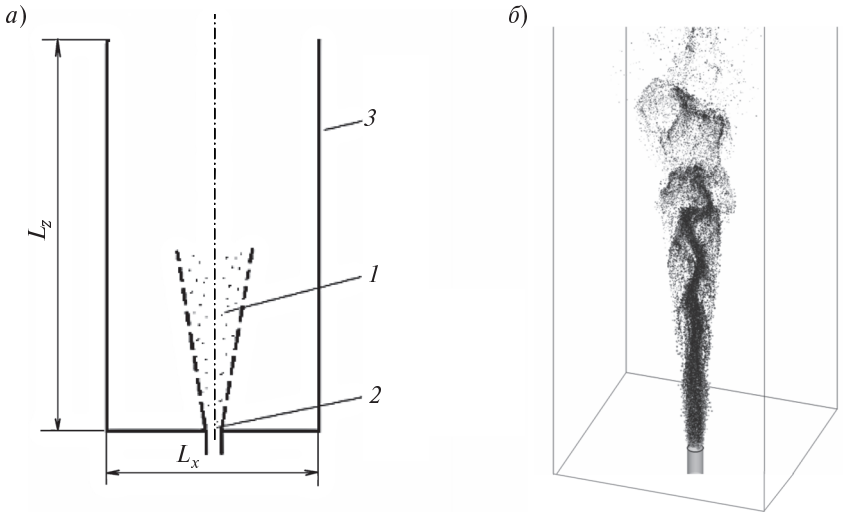


Рис. 4. Распространение газокапельной струи летучей жидкости в камере:
а — схема расположения форсунки в камере;
б — пример численного моделирования (визуализация вычислительных частиц);
1 — газокапельная струя; *2* — срез сопла форсунки; *3* — стенки камеры

времени (например на одном шаге по времени) достаточно велико вблизи сопла, где велики как концентрация, так и относительные скорости капель, и быстро падает по мере удаления от среза сопла (рис. 5).

Дальнейший анализ выполнен для одной из важных характеристик газокапельной струи — массовой доли пара. Отметим, что эта величина представляет практический интерес как для анализа смесеобразования в цилиндрах двигателей внутреннего сгорания, так и при выборе режимов пожаротушения распыленными огнетушащими жидкостями.

На рис. 6 приведены расчетные распределения массовой доли пара вдоль вертикальной оси камеры для одинаковых значений расхода жидкости через форсунку и средней начальной скорости капель, но при двух различных значениях начального медианного диаметра капель d_{v50} .

Приведенные результаты расчетов показывают, что в данном случае учет столкновений приводит к заметному снижению массовой доли пара. Это можно объяснить коалесценцией капель, приводящей к увеличению их диаметра и уменьшению скорости испарения. Уменьшение начального медианного диаметра капель (более тонкий распыл жидкости, см. рис. 6, *б*) при неизменных остальных параметрах газокапельной струи может приводить к усилению влияния столкновений капель.

Увеличение средней начальной скорости капель (рис. 7, *а*) или уменьшение расхода через форсунку (рис. 7, *б*) при неизменных остальных параметрах распыла приводит к снижению влияния столкновений на распределение массовой доли пара вдоль вертикальной оси.

Отметим, что значимость столкновений капель может как возрастать, так и убывать при

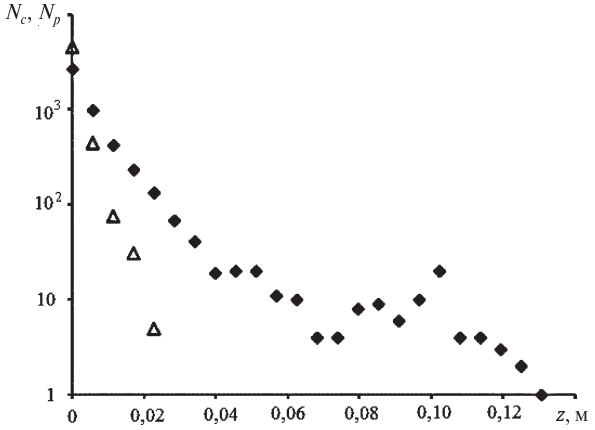


Рис. 5. Распределение количества вычислительных частиц (■) и числа пар частиц, испытавших столкновения (△), вдоль оси камеры в момент времени $t = 0{,}019$ с после начала истечения жидкости
Расход жидкости $Q = 2{,}46 \cdot 10^{-5}$ м^3/с, скорость истечения из сопла $U = 10{,}2$ м/с, начальный объемный медианный диаметр капель $d_{v50} = 0{,}1$ мм

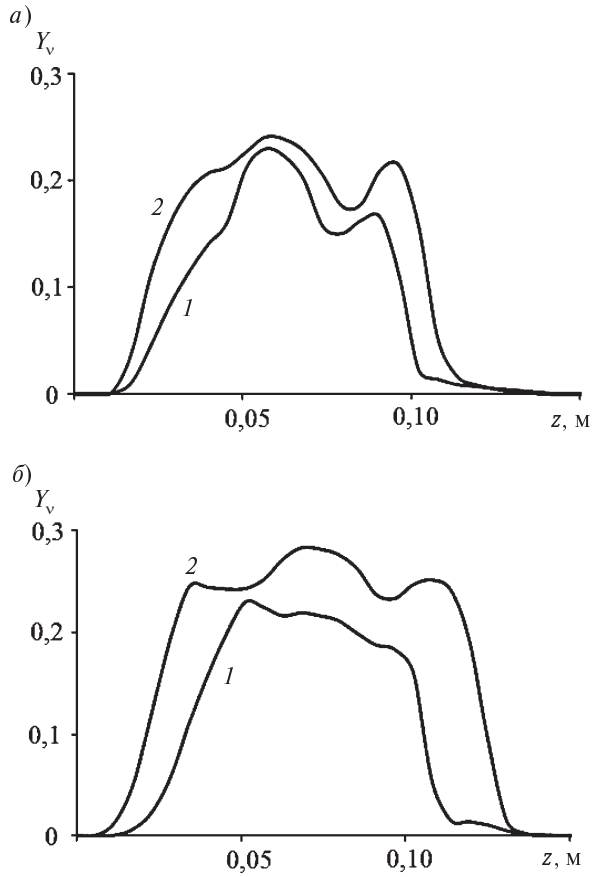


Рис. 6. Расчетные распределения массовой доли пара вдоль вертикальной оси газокапельной струи, полученные для двух значений начального объема медианного диаметра капель с учетом (*1*) и без учета (*2*) столкновений: *а* — d_{v50} = 0,2 мм, *t* = 0,017 с; *б* — d_{v50} = 0,1 мм, *t* = 0,019 с

Расход жидкости и скорость истечения из сопла совпадают с условиями на рис. 5

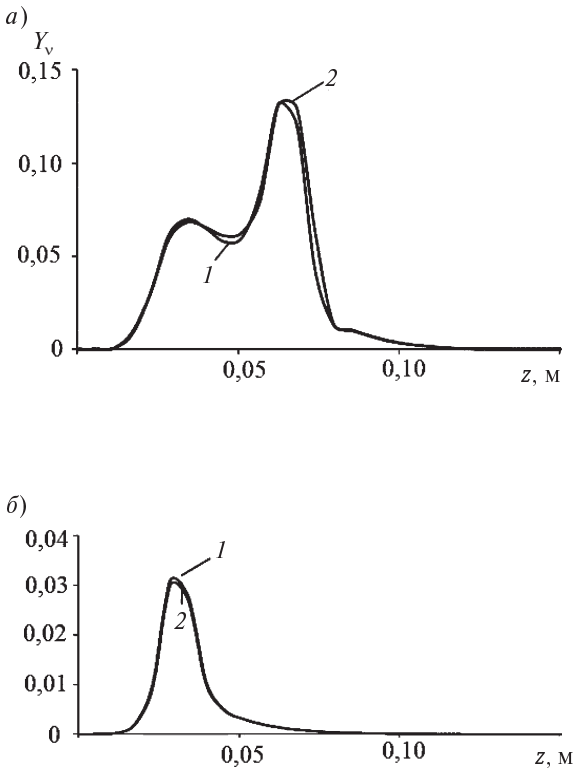


Рис. 7. Расчетные распределения массовой доли пара вдоль вертикальной оси камеры, полученные для d_{v50} = 0,2 мм и различных значений расхода жидкости и скорости истечения из сопла с учетом (*1*) и без учета (*2*) столкновений: *а* — $Q = 2{,}46 \cdot 0^{-5}$ м^3/с, *U* = 40 м/с, *t* = 0,004 с; *б* — $Q = 2{,}46 \cdot 10^{-7}$ м^3/с, *U* = 10,2 м/с, *t* = 0,017 с

изменении начального медианного диаметра и средней начальной скорости капель. Выяснение характера этой зависимости требует дополнительного анализа и дальнейших расчетов.

Таким образом, в данной работе сформулирована и протестирована модель столкновения капель, предназначенная для использования в расчетах турбулентных газокапельных струй испаряющихся жидкостей. Данная модель была программно реализована в гидродинамическом вычислительном коде Fire3D. Численные расчеты струи распыленного ацетона, выполненные на основе описанной модели, показали, что существует область параметров распыла, в которой столкновения капель существенно влияют на распределение массовой доли пара в струе.

Дальнейшее развитие модели газокапельной струи предполагает учет неустойчивости крупных капель, приводящей к их распаду, а также расширение набора исходов столкновений [12], которое заключается в уточнении условий и режимов распада капли, образовавшейся в результате коалесценции.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jiang, X**. Physical modeling and advanced simulations of gas-liquid two-phase jet flows in atomization and sprays [Text] / X. Jiang, G.A. Siamas, K. Jagus [et al.] // Progress in Energy and Combustion Science. – 2010.— Vol. 36.— № 2.— P. 131— 167.

2. **Yoon, S.S**. Numerical modeling and experimental measurements of a high speed solid-cone water spray for use in fire suppression applications [Text] / S.S.Yoon, J.C. Hewson, P.E. DesJardin [et al.] //Int. J. of Multiphase Flow. –2004.— Vol. 30.— № 11.— P. 1369— 1388.

3. **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. London: Interscience Comm.,— 2010.— Vol. 1.– P. 189–199.

4. **Снегирёв, А.Ю.** Высокопроизводительные вычисления в технической физике. Численное моделирование турбулентных течений [Текст] / А.Ю. Снегирёв.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009.— 143 с.

5. **Волков, К.Н.** Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений [Текст] / К.Н. Волков, В.Н. Емельянов.— М.: Физматлит, 2008.— 368 с.

6. **Chan, T.-S.** Measurements of water density and droplet size distributions of selected ESFR sprinklers [Text] / T.-S. Chan // Journal of Fire Protection Engineering.— 1994— Vol. 6.— № 2— P. 79–87.

7. **Снегирёв, А.Ю.** Модель и алгоритм расчета теплообмена и испарения капель диспергированной жидкости [Текст] / А.Ю. Снегирёв, С.С. Сажин, В.А. Талалов // Научно-технические ведомости СПбГПУ.— 2011.— № 1(116).— С. 44–55.

8. **O'Rourke, P.J.** Collective drop effects on vaporizing liquid sprays [Text] / P.J. O'Rourke // Princeton: Ph.D. Thesis, Princeton University, 1981.— 320 p.

9. **Schmidt, D.P.** A new droplet collision algorithm [Text] / D.P. Schmidt, C.J. Rutland // Journal of Computational Physics.— 2000.— Vol. 164. –№ 1.— P. 62–80.

10. **Brazier-Smith, P.** The interaction of falling rain drops: coalescence [Text] / P. Brazier-Smith, S. Jennings, J. Latham // Proc. of the Royal Society of London (A).— 1972.— Vol. 326.— P. 393— 408.

11. **O'Rourke, P.** Modeling of drop interactions in thick sprays and a comparison with experiments [Text] / P. O'Rourke, F. Bracco // Proc. of the Institution of Mechanical Engineers.— 1980.— Vol. 9.— P. 101— 106.

12. **Post, S.L.** Modeling the outcome of drop-drop collisions in diesel sprays [Text] / S.L. Post, J. Abraham // Int. J. of Multiphase flow.— 2002. –Vol. 28. –№ 6.— P. 997–1019.

УДК 538.971

П.Ю. Григорьев, Е.Е. Журкин

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ КАРБИДА КРЕМНИЯ ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ И КЛАСТЕРАМИ

Облучение пучками кластерных (многоатомных) ионов с энергией в диапазоне до нескольких кэВ/атом рассматривается в настоящее время как перспективный метод модификации и анализа поверхности на субмикронном масштабе расстояний [1–3], обладающий преимуществами по сравнению с традиционными методами ионной имплантации и травления, в которых используются пучки ускоренных одноатомных ионов. Так, в частности, использование кластерных пучков позволяет уменьшить радиационное повреждение мишени (за счет снижения энергии бомбардирующих ионов) при сохранении качества фокусировки пучка ионов и достаточно высокой эффективности распыления поверхности мишени [4, 5].

В настоящее время накоплено очень мало данных о характере взаимодействия многоатомных кластеров и фуллеренов с поверхностью твердых тел, что не позволяет проводить надежные количественные оценки соответствующих эффектов. Физическая модель эрозии поверхности при кластерной бомбардировке до сих пор не создана. Фундаментальные исследования в данной области, как правило, базируются либо на эксперименте, либо на численном моделирова-

нии [6]. Необходимо отметить, что проведение реальных экспериментов в данной области исследований представляет собой достаточно непростую задачу. В связи с этим имеющиеся результаты экспериментальных исследований носят отрывочный и несистематический характер. В частности, в целом ряде экспериментов было показано, что бомбардировка кластерами может приводить к неаддитивному (нелинейному) возрастанию коэффициента распыления, а также к образованию микрократеров на облучаемой поверхности [3–7]. Подобные эффекты обусловлены высокой локальной плотностью энергии, поглощаемой в приповерхностной области мишени, в результате чего может возникать нелинейный каскад атомных соударений (так называемый «столкновительный пик»), трансформирующийся в «тепловой пик», представляющий собой относительно долгоживущую локально расплавленную область вещества. В настоящее время ни одна из существующих теорий не позволяет количественно описать подобные сложные явления, имеющие термодинамически неравновесный характер. Поэтому на практике для их теоретического изучения чаще всего применяют численное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики. Данный метод был использован в ряде работ с целью изучения распыления и первичных структурных нарушений в мишени при кластерной бомбардировке [6, 8–10]. В работе [3] дан обширный обзор публикаций, посвященных изучению различных аспектов взаимодействия кластеров с поверхностью твердых тел, из которого очевидно, что в настоящее время невозможно сформулировать универсальные законы, описывающие взаимодействие ускоренных кластеров с поверхностью. При этом процессы эрозии поверхности твердотельных мишеней при кластерной бомбардировке остаются малоизученными как экспериментально, так и теоретически.

Цель данной работы — изучение особенностей и физических механизмов распыления поверхности карбида кремния SiC при низкоэнергетической бомбардировке одноатомными ионами (C_1, Si_1) и многоатомными кластерами (C_N и Si_N; $N = 5, 12, 60$) при одинаковой энергии, приходящейся на один атом бомбардирующей частицы (E/N = 0,2 и 1 кэВ/атом). Исследования проведены с помощью метода компьютерного моделирования на атомарном масштабе расстояний. Карбид кремния был выбран ввиду того, что он является перспективным радиационно-стойким материалом для использования в микроэлектронике и ядерных технологиях.

Методика исследования

В качестве метода исследования использовалось компьютерное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики (МД), который позволяет отслеживать индивидуальные траектории каждой из частиц изучаемой системы путем решения системы уравнений движения Ньютона [11]. Для проведения вычислений использовался алгоритм, ранее использованный в работах [8–10]. При расчетах для вычисления сил взаимодействия между атомами использовался многочастичный потенциал Терсова, адаптированный для описания свойств кубического карбида кремния *c*-SiC [12]. Данный потенциал был сопряжен с потенциалом Циглера — Бирсака — Литтмарка (ZBL) [13] в области малых межатомных расстояний с целью корректного учета высокоэнергетических соударений атомов. Были проведены расчеты имплантации ионов и кластеров с энергией 0,2 и 1 кэВ/атом в модельный кристалл SiC, содержащий от 32000 до 250000 атомов со свободными поверхностями, перпендикулярными направлению {111} и с периодическими граничными условиями в поперечных направлениях. Кроме того, на всех границах, за исключением свободной поверхности, применялись дополнительные демпфирующие силы с целью отвода избытка энергии. Исходная температура модельного кристалла составляла $T = 0$ K. Выбиралось наклонное направление удара (под углом 7° относительно нормали к поверхности мишени) для исключения эффекта каналирования. Каждая история отслеживалась на временах до 20–30 пс. Для достижения статистически приемлемых результатов число рассмотренных событий составило около 100 историй на каждый внедренный атом. Атом считался распыленным, когда он покидал поверхность и выходил за пределы области сил взаимодействия с атомами кристалла. Для оценки корреляции между характером каскадных процессов и величиной коэффициента распыления дополнительно отслеживались параметры, характеризующие эволюцию каскада атомных соударений в мишени.

Результаты и их обсуждение

Характеристики каскадных процессов. Для оценки влияния размера налетающего кластера на характер каскадных процессов в мишени нами вычислялись энергетические спектры атомов мишени в различные моменты времени, а также размер и температура области каскада. Кроме того, вычислялось распределение отношения N_{mov}/N (в пересчете на один внедренный атом снаряда) во времени (отсчитываемого от момента удара частицы-снаряда о поверхность мишени) для «движущихся» атомов мишени. При этом «движущимися» считаются те атомы, которые имеют кинетическую энергию выше величины E_{coh} — энергии когезии (связи) вещества мишени (для карбида кремния она составляет $E_{coh} = 6{,}2$ эВ). На основе данных распределений была произведена оценка времени жизни каскада τ_{casc1} и τ_{casc2} по двум критериям (как интервала времени, когда $N_{mov}/N > 1$ и $N_{mov}/N > 0$, соответственно). В качестве примера на рис. 1 показаны распределения N_{mov}/N при внедрении кластеров Si_N и C_N с энергией 1 кэВ/атом. Значения величин τ_{casc1} и τ_{casc2} приведены в табл. 1. Видно, что относительное число движущихся атомов мишени (в пересчете на один внедренный атом кластера) неаддитивно увеличивается с ростом размера N кластера-снаряда; при этом полная продолжительность каскадной стадии находится в пределах примерно 0,3 пс при $N = 1$, 5 и 1–2 пс при $N = 12$, 60. Таким образом, очевидно, что при внедрении кластеров ($N > 5$) уже на стадии развития каскада соударений проявляются нелинейные (неаддитивные) эффекты.

Кроме того, были вычислены характерные размеры каскадной области, которые определялись как одно среднеквадратичное отклонение координат точек соударения движущихся атомов в каскаде σ_x, σ_y, σ_z (по каждому из декартовых направлений). Соответствующие значения величин продольного размера σ_z и радиального размера $\sigma_r = \left(\sigma_x^2 + \sigma_y^2\right)^{1/2}$ приведены в табл. 1 (ось Z была выбрана перпендикулярно к свободной поверхности мишени). Далее вычислялась характерная «температура» каскадной области (исходя из пересчета средней кинетической энергии всех атомов мишени, находящихся внутри данной области, в градусы Кельвина). На рис. 2 показана зависимость температуры области каскада T_{core} от времени. Видно, что характерная температура каскадной области систематически растет с увеличением размера внедряемого кластера. Время жизни теплового пика τ_{spike} определялось как интервал времени, в течение которого «температура» области каскада превышала точку плавления материала мишени ($T_{core} > T_m = 3103$ K).

Значения величин τ_{spike} для кластеров различного размера N приведены в табл. 1. Видно, что в случае внедрения кластерных ионов ($N > 1$) в мишени, как правило, возникает посткаскадный

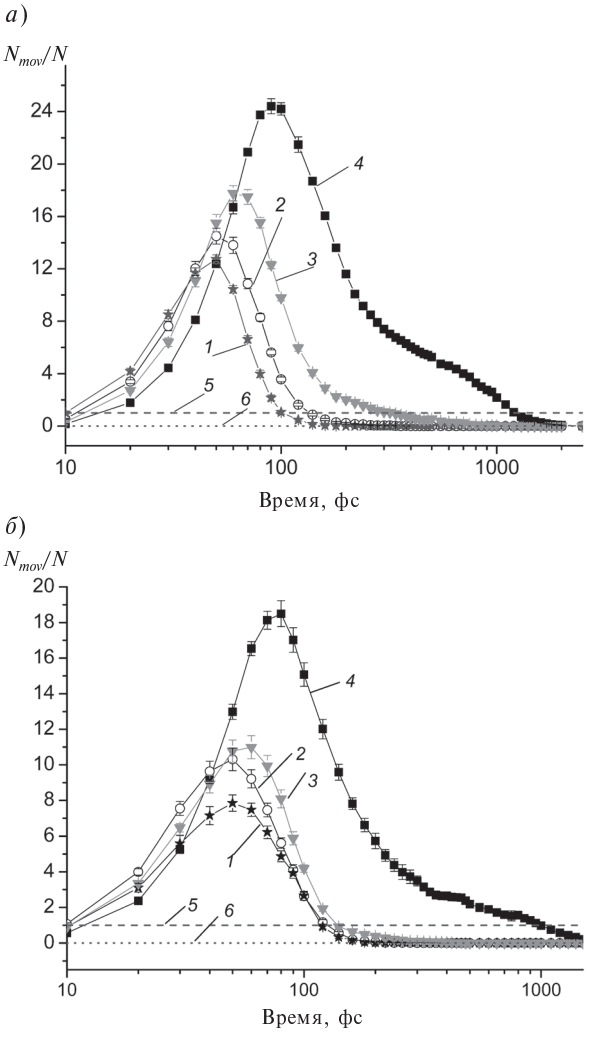


Рис. 1. Распределение во времени относительного числа движущихся атомов мишени N_{mov}/N (на один атом налетающего кластера) в SiC при бомбардировке кластерами Si_N (*а*) и C_N (*б*);
$N = 1$ (*1*); 5 (*2*); 12 (*3*); 60 (*4*);
Горизонтальные линии: $N_{mov}/N = 1$ (*5*); $N_{mov}/N = 0$ (*6*).
Начальная энергия кластера — 1 кэВ/атом

Таблица 1

Характеристики каскада соударений при бомбардировке карбида кремния одноатомными ионами и многоатомными кластерами Si_N и C_N

Тип снаряда	E, кэВ/атом	N	τ_{casc1}	τ_{casc2}	τ_{spike}	σ_r	σ_z
			фс			Å	
Si	0,2	1	60	220	168	3,6	2,7
		5	85	300	770	5,3	3,9
		60	190	1300	2360	9,5	7,3
C	0,2	1	58	220	48	3,6	3,2
		5	70	400	577	6,0	5,0
		60	157	1200	2195	9,2	6,7
Si	1	1	100	200	67	7,7	6,7
		5	136	380	1025	9,7	9,6
		12	340	1100	2785	9,2	10,3
		60	1285	2512	2380	15,2	12,2
C	1	1	120	200	0	10,3	12,5
		5	125	296	99	14,0	16,2
		12	136	480	875	15,9	17,8
		60	1050	2100	3195	16,7	16,3

Обозначения: E — энергия налетающего кластера, приходящаяся на 1 атом; N — число атомов в налетающем кластере, τ_{casc1}, τ_{casc2} — длительности каскадов по критериям $N_{mov}/N = 1$, $N_{mov}/N = 0$ соответственно; τ_{spike} — длительность теплового пика (промежуток времени, при котором температура области каскада превышает температуру плавления SiC, равную 3103 K); σ_r, σ_z — радиальный и продольный размеры каскада (стандартные отклонения).

тепловой пик (поскольку $\tau_{spike} \geq \tau_{casc2}$), причем его продолжительность растет с увеличением N.

Для анализа происходящих процессов оценивались энергетические спектры частиц, находящихся в каскадной области мишени в различные моменты времени. Так, в качестве примера на рис. 3, *а* приведены энергетические спектры частиц в момент времени, соответствующий максимуму распределения движущихся атомов: $t = \tau_{mcasc}$ после внедрения кластеров различного размера. Видно, что доля атомов с энергией $E > E_{coh}$ растет с увеличением количества атомов N в налетающем снаряде и достигает максимума при $N = 60$. Таким образом, можно говорить о том, что характер развития каскада соударений при внедрении N-атомного кластера существенно изменяется с ростом N, при этом в энергетическом спектре возрастает доля «быстрых» атомов, что может быть обусловлено высокой вероятностью соударений между движущимися атомами каскада.

На рис. 3, *б* изображены энергетические спектры частиц каскадной области в момент времени $t = \tau_{casc2}$, который соответствует окончанию каскадной стадии. Для сравнения там же показаны кривые, описывающие распределение Максвелла для двух температур: $T = 3103$ K (точка плавления SiC) и $T = 5750$ K, которые соответствуют средним температурам каскадной области в момент времени $t = \tau_{casc2}$ после внедрения кластеров Si_{60} и Si_{12}, соответственно. Видно, что спектры, полученные в случае внедрения тяжелых кластеров Si_{60} и Si_{12}, хорошо согласуются с распределениями Максвелла при соответствующих температурах. Это может свидетельствовать о наличии локальной расплавленной зоны (теплового пика) после окончания каскадной стадии, поскольку $T \geq T_m$. Из данных, приведенных в табл. 1, видно, что нелинейное возрастание (с ростом N) времен τ_{casc1}, τ_{casc2} и возникновение посткаскадного теплового пика наблюдаются при бомбардировке фуллеренами C_{60}, Si_{60} и кластерами Si_5, Si_{12} и C_{12}. В случае бомбардировки одноатомными ионами и легкими кластерами C_5 посткаскадный тепловой пик не возникает.

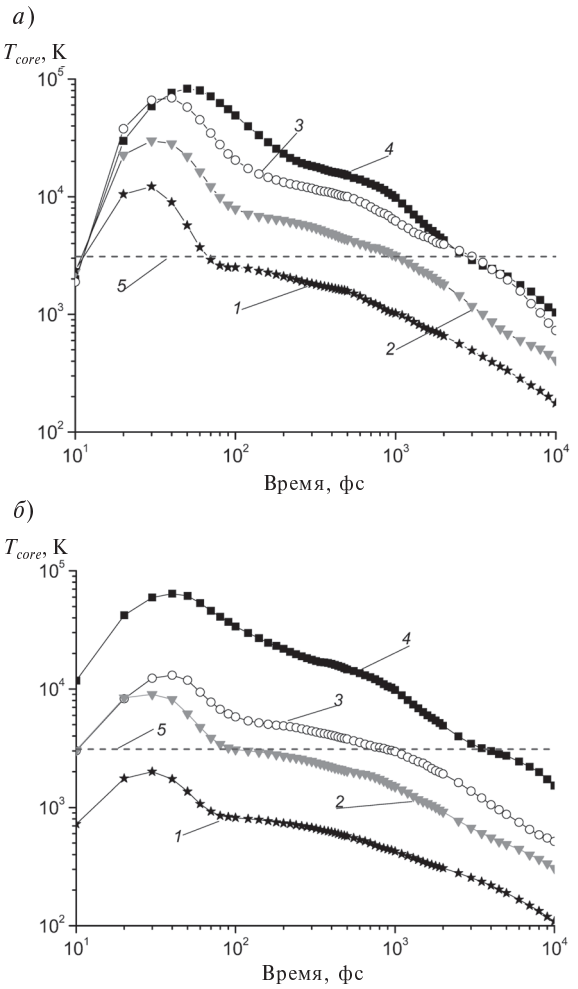


Рис. 2. Зависимость температуры области каскада T_{core} от времени при бомбардировке кластерами Si_N (*а*) и C_N (*б*); $N = 1$ (*1*); 5 (*2*); 12 (*3*); 60 (*4*) ; Горизонтальная линия соответствует температуре плавления SiC — $T = 3103$ K (*5*) ; Начальная энергия кластера 1 кэВ/атом

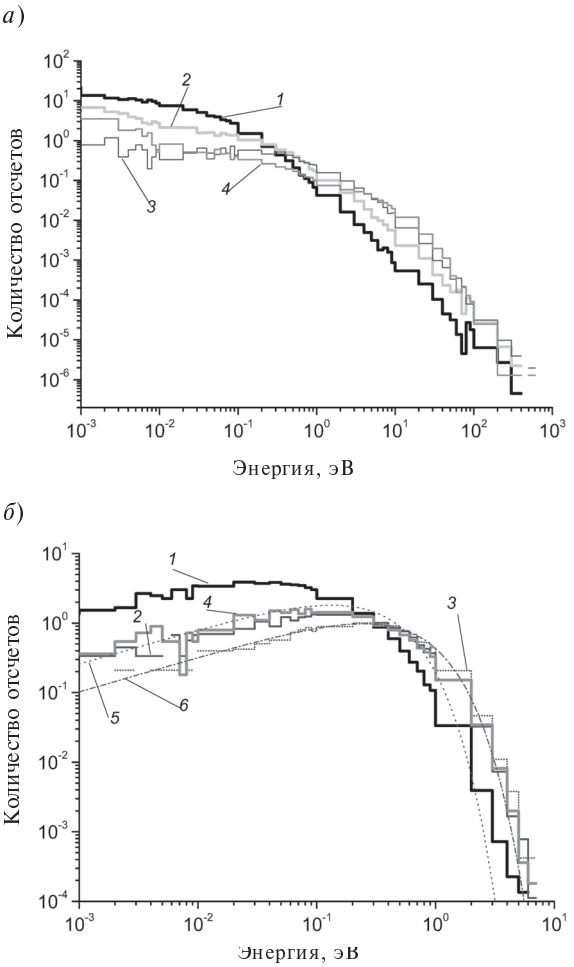


Рис. 3. Энергетические спектры (нормированные) частиц каскадной области мишени в различные моменты времени: $t = \tau_{mcasc}$ (*а*), когда достигается максимальное число движущихся частиц; $t = \tau_{casc2}$ (*б*), когда $N_{mov}/N = 0$ (окончание каскада соударений) при бомбардировке SiC кластерами Si_N с энергией 1 кэВ/атом. *а*, *б* — $N = 1$ (*1*); 5 (*2*); 12 (*3*); 60 (*4*); *а* — *t*, фс : 50 (*1,2*); 60 (*3*); 90 (*4*); *б* — *t*, фс : 200 (*1*); 380 (*2*); 1100 (*3*); 2500 (*4*); *5*, *6* — распределения Максвелла для $T = 3103$ и 5750 K

Характеристики распыления облучаемой мишени

Для анализа характера распыления мишени фиксировались интегральные коэффициенты распыления Y_{tot}, их относительные флуктуации δ_{Ytot}, а также парциальные коэффициенты распыления кремния и углерода Y_{Si} и Y_C. Для оценки влияния размера налетающего кластера N на относительную эффективность эрозии поверхности все указанные величины пересчитывались на один атом налетающего кластера. Кроме того, вычислялись энергетические спектры распыленных частиц, характеризуемые средней энергией E_{sp} распыленных атомов и ее относительной флуктуацией δ_{Esp}, а также среднее время распыления t_{sp} и его относительная флуктуация δ_{tsp}. Относительные флуктуации всех величин вычислялись из отношения стандартного отклонения заданной величины к ее среднему значению, что позволяло охарактеризовать относительную ширину соответствующего спектра.

Таблица 2

Характеристики распыления карбида кремния при бомбардировке одноатомными ионами и многоатомными кластерами Si_N и C_N

Тип снаряда	E, кэВ/атом	N	$\langle t_{sp} \rangle$, фс	δ_{tsp}, %	$\langle E_{sp} \rangle$, эВ	δ_{Esp}, %	Y_{tot}	δ_{Ytot}, %	$Y(\tau_{casc1})$, %	$Y(\tau_{casc2})$, %	Y_{Si}/Y_C
Si	0,2	1	177 ± 21	78	6,2 ± 0,6	61	0,42 ± 0,08	190	<2	87	2,50
		5	830 ± 250	221	7,0 ± 0,9	96	0,54 ± 0,10	89	5	82	3,00
		60	1500 ± 115	191	3,9 ± 0,2	144	3,40 ± 0,15	7	12	73	1,46
C	0,2	1	131 ± 11	51	10,6 ± 1,3	76	0,39 ± 0,07	174	5	85	1,79
		5	133 ± 62	100	9,8 ± 1,5	97	0,40 ± 0,07	85	8	98	2,64
		60	1413 ± 82	140	3,3 ± 0,3	130	3,3 ± 0,3	5	11	70	1,47
Si	1	1	130 ± 10	59	14 ± 2	129	0,6 ± 0,1	200	45	89	2,37
		5	559 ± 172	266	14 ± 3	164	0,7 ± 0,1	92	61	90	2,50
		12	2032 ± 144	158	4,4 ± 0,3	177	4,1 ± 0,6	49	30	55	1,63
		60	1995 ± 42	161	3,77 ± 0,06	127	32,4 ± 1,1	6	60	82	1,20
C	1	1	271 ± 135	296	15 ± 3	127	0,38 ± 0,08	211	50	85	3,75
		5	235 ± 60	169	26 ± 7	192	0,5 ± 0,1	108	75	87	2,50
		12	705 ± 183	272	11,0 ± 2,6	248	0,9 ± 0,2	57	60	75	2,41
		60	2159 ± 57	143	3,1 ± 0,1	161	16,0 ± 0,2	3	45	75	1,27

Обозначения: E — энергия налетающей частицы в пересчете на один атом; N — количество атомов в кластере-снаряде; $\langle t_{sp} \rangle$ — среднее время распыления; $\langle E_{sp} \rangle$ — средняя энергия распыления; Y_{tot} — суммарный коэффициент распыления (количество распыленных атомов на один атом налетающего кластера); δ_{tsp}, δ_{Esp}, δ_{Ytot} — относительные стандартные отклонения величин t_{sp}, E_{sp}, Y_{tot}; $Y(\tau_{casc1})$ и $Y(\tau_{casc2})$ — доли распыленных атомов к моментам времени τ_{casc1} и τ_{casc2}; Y_{Si}/Y_C — отношение парциальных коэффициентов распыления Si и C.

Характеристики распыления зависят от размера налетающего кластера N и его энергии (табл. 2). Видно, что с ростом N наблюдается заметное нелинейное (неаддитивное) возрастание коэффициента распыления Y_{tot} в 1,2–50 раз (в пересчете на один атом внедренного кластера-снаряда), а также существенное уменьшение относительных флуктуаций коэффициента распыления. Одновременно наблюдается возрастание (с ростом N) среднего времени распыления и уменьшение энергии распыленных частиц. Все эти эффекты наиболее отчетливо проявляются в случае бомбардировки кластерами C_N и Si_N при $N \geq 12$, что коррелирует с отмеченными выше нелинейными эффектами в каскаде атомных соударений. Помимо этого отметим некоторое увеличение флуктуаций величин энергии и времени распыления (т. е. уширение соответствующих спектров) с ростом N для энергии 0,2 кэВ/атом.

С целью анализа корреляций отмеченных выше особенностей распыления с характером эволюции каскада соударений в мишени нами были вычислены доли (в процентном соотношении) выхода распыленных частиц $Y(t_0)$ за время $t < t_0$, где t_0 соответствует временам τ_{casc1} либо τ_{casc2}. Соответствующие величины $Y(t_0)$ приведены в табл. 2 для всех рассмотренных случаев. Видно, что основная доля распыленных атомов (70–90 %) покидает мишень в течение каскадной стадии (причем на стадии затухания каскада, т. е. при $t > \tau_{measc}$). Оставшаяся часть распыляется на пост-каскадной стадии, которая в случае тяжелых налетающих кластеров ($N \geq 12$) сопровождается возникновением теплового пика. Таким образом, можно сделать вывод о том, что основной причиной возникновения нелинейных эффектов при распылении SiC являются нелинейность стадии каскада соударений (долгоживущий «столкновительный пик», приводящий к высокой пространственной плотности смещенных из узлов решетки атомов). Помимо этого при бомбардировке тяжелыми кластерами и фуллеренами дополнительный

вклад (≈ 10–30 %) в неаддитивный выход распыления дает возникновение посткаскадного теплового пика (из расплавленной области которого возможна «поздняя» вторичная эмиссия низкоэнергетических атомов на временах, превышающих время жизни каскада соударений).

Как видно из анализа соотношений парциальных коэффициентов распыления кремния и углерода Y_{Si}/Y_C, приведенных в табл. 2, наблюдается преимущественное распыление кремния. Однако главным образом это связано с тем, что поверхностный слой (откуда с наибольшей вероятностью происходит эмиссия атомов) модельного кристалла, использованного в расчетах, состоит из атомов кремния. При увеличении размера налетающих кластеров N в мишени происходит интенсивное перемешивание атомов, находящихся в нескольких приповерхностных слоях, что приводит к ослаблению эффекта преимущественного распыления. При этом величина Y_{Si}/Y_C постепенно приближается к единице.

Таким образом, в результате проведенного исследования был выявлен ряд закономерностей распыления поверхности (111) кубического карбида кремния при низкоэнергетической бомбардировке ионами и кластерами кремния и углерода (содержащими до 60 атомов) с начальной энергией 0,2 и 1 кэВ/атом:

интенсивность нелинейных эффектов на каскадной стадии при внедрении кластеров возрастает с ростом размера имплантируемого кластера, при этом увеличивается время жизни каскада и число смещенных атомов мишени в пересчете на один внедренный атом кластера;

при имплантации кластеров, содержащих более пяти атомов, происходит неаддитивное (по сравнению с имплантацией одноатомного иона при той же энергии на один внедряемый атом) возрастание коэффициентов распыления;

бóльшая часть атомов распыляется в течение каскадной стадии, т. е. основной причиной возникновения нелинейных эффектов при распылении карбида кремния являются нелинейность стадии каскада соударений (долгоживущий «столкновительный пик», приводящий к высокой пространственной плотности смещенных из узлов решетки атомов мишени).

Работа поддержана Минобрнауки Российской Федерации в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Yamada, I.** Nano-processing with gas cluster ion beams [Text] / I. Yamada, J. Matsuo, Z. Insepov [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B.— 2000.— Vol. 164–165.— P. 944–959.

2. **Wucher, A.** Molecular depth profiling using a C_{60} cluster beam: The role of impact energy [Text] / A. Wucher, J. Cheng, N.Winograd // J. Phys. Chem. C.— 2008.— Vol. 112.— P. 16550–16555.

3. **Popok, V.N.** Beams of atomic clusters: Effects on impact with solids [Text] / V.N. Popok, E.E.B. Campbell // Rev. Andv. Mater. Sci.— 2006.— Vol. 11.— P. 19–45.

4. **Insepov, Z.** Computer modeling and electron microscopy of silicon surfaces irradiated by cluster ion impacts [Text] / Z. Insepov, L.P. Allen, C. Santeufemio [et al.] // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B.— 2003.— Vol. 202.— P. 261–268.

5. **Dobeli, M.** Sputtering and defect production by focused gold cluster ion beam irradiation of silicon [Text] / M. Dobeli, P.W. Nebiker, R. Miihle, [et al.] / / Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. –1997.— Vol. 132.— P. 571–577.

6. **Behrisch, R.** Sputtering by particle bombardment: Experiments and computer calculations from threshold to MeV energies (topics in Applied Physics) [Text] / R. Behrisch, W. Eckstein.— Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2007— 508 p.

7. **Brauchle, G.** Etching nanometer sized holes of variable depth from carbon cluster impact induced defects on graphite surfaces [Text] / G. Brauchle, S. Richard-Schneider, D. Illig, [et al.] // Appl. Phys. Lett.— 1995.— Vol. 67.— P. 52–55.

8. **Zhurkin, E.E.** Atomic scale modelling of Al and Ni(111) surface erosion under cluster impact [Text] / E.E. Zhurkin, A.S. Kolesnikov // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B.— 2003.— Vol. 202.— P. 269–277.

9. **Журкин, Е.Е.** Компьютерное моделирование процессов эрозии поверхности металлов при бомбардировке N-атомными кластерами (N = 1–55) [Текст] / Е.Е. Журкин, В.Ф. Космач, А.С. Колесников // Поверхность.—2005.— № 3.— С. 51–56.

10. **Бакаев, А.В.** Моделирование первичных радиационных дефектов в карбиде кремния при бомбардировке ионами и кластерами углерода [Текст] / А.В. Бакаев, Е.Е.Журкин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.— 2010.— № 2(98).— С. 17–23.

11. **Allen, M.P.** Computer simulation of liquids [Text] / M.P. Allen, D.J. Tildesley.— Oxford: Clarendon Press, 1987.— 387 p.

12. **Tersoff, J.** Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems [Text] / J. Tersoff // Phys. Rev. B. –1989. –Vol. 39.— P. 5566–5568.; 1990.— Vol. 41.— P. 3248.

13. **Ziegler, J.F.** The stopping and range of ions in solids [Text] / J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark / / The Stopping and Range of Ions in Matter.— 1995.— Vol. 1.— New York : Pergamon, 1985.— 321 p.

УДК 519.711.3

И.А. Судаков

ДИНАМИКА ПРОТАИВАНИЯ МЕРЗЛОТНЫХ ОЗЕР И ИЗМЕНЕНИЯ КЛИМАТА

Деградация вечной мерзлоты и дестабилизация мегапула газовых гидратов, захороненных в ней, представляет собой единственный возможный механизм быстрого вовлечения огромных количеств метана в современный цикл углерода, что может привести к климатической катастрофе.

Установлено, что выброс метана в атмосферу из вечной мерзлоты, как минимум, соизмерим с эмиссией метана из морей всего Мирового океана. Летом 2010 года в отдельных районах Арктического региона было обнаружено резкое увеличение атмосферного содержания метана, по сравнению с предыдущими наблюдениями (2006–2009 гг.) до 3,5 мд ($3{,}5\cdot10^{-5}$ %), что в два раза выше среднепланетарного значения. Первоочередная задача — это выявление масштабов деградации вечной мерзлоты и количественная оценка потоков метана в атмосферу.

Для решения проблемы прежде всего необходимо разработать эффективные модели процессов протаивания вечной мерзлоты на основании которых становится возможной оценка эмиссии метана в атмосферу и прогноз поведения климатической системы в будущем. Очевидно, что при этом возникает сложная задача: связать микроскопические процессы, приводящие к таянию вечной мерзлоты (например фазовые переходы), с макроскопическими, происходящими в климатической системе (например явление положительной обратной связи, приводящее к «парниковому эффекту»).

В зависимости от вида мерзлотных образований существуют различные географические типы источников мерзлотного метана: мерзлые грунты, торфяники, мерзлотные озера, подводная мерзлота на шельфе.

К мерзлотным относятся озера, имеющие в своем основании многолетнемерзлые грунты и расположенные преимущественно в зоне тундры; они слабо изучены в плане моделирования эмиссии мерзлотного метана [1]. В настоящее время существует ряд моделей, описывающих процессы таяния мерзлоты в таких озерах на основе уравнений переноса тепла. Однако эти модели реализуются только с использованием трудоемких и времязатратных численных методов и не содержат связи микроскопических процессов протаивания мерзлоты с макроскопическими процессами, происходящими в климатической системе планеты.

Основная цель данной статьи — представить модель динамики радиуса мерзлотного озера, разработанную автором на основе теории фазовых переходов Гинзбурга — Ландау с применением асимптотических методов. Кроме того, в статье показана возможность применения данной модели к задаче прогнозирования эмиссии мерзлотного метана в атмосферу.

Модель динамики радиуса мерзлотного озера

При моделировании многолетнемерзлых грунтов (например, в мерзлотных озерах) часто предполагают, что они состоят всего из двух фаз — твердой и жидкой, на границе которых происходит фазовый переход «промерзание — оттаивание» [1]. Термический режим многолетнемерзлых грунтов в таких моделях описывается моделями на основе задач типа задачи Стефана.

Рассмотрим цилиндрическую область $D = \Omega \times [0, h]$, где Ω — подобласть двухмерной сферы соответствующей поверхности вечной мерзлоты; (x, y) — координаты в подобласти Ω; $z \in [0, h]$ — вертикальная координата, соответствующая глубине озера h. Неизвестная функция температуры определяется как $u = u(x, y, z, t)$. Предположим, что $h << L$, где $L = \mathrm{diam}(\Omega)$ и граница подобласти Ω — гладкая кривая. Определим положение фронта протаивания как $l(x, y, t)$.

Таким образом, уравнение теплопроводности соответственно для жидкой и твердой (ледяной) фаз, имеет вид:

$$\begin{aligned} u_t &= K_1 \Delta u, \quad 0 < z < l(t); \\ \tilde{u}_t &= K_2 \Delta \tilde{u}, \quad l(t) < z < h; \end{aligned} \tag{1}$$

граничное условие на глубине

$$\tilde{u}_z(x, y, h, t) + b(x, y)\tilde{u}(x, y, h, t) = V(x, y, t); \tag{2}$$

на поверхности —

$$u(x, y, 0, t) = U(x, y, t); \tag{3}$$

условие на границе раздела фаз —

$$\mathbf{n}(\nabla(u(x, y, z, t) - \tilde{u}(x, y, z, t))|_{(x, y, z) \in \Gamma}) = Qv. \tag{4}$$

Здесь $\mathbf{n}$ — вектор нормали к фронту протаивания; v — скорость фронта; Q — безразмерная скрытая теплота; $V(x, y, t)$, $U(x, y, t)$ — граничные функции температуры; K_1, K_2 — коэффициенты теплопроводности жидкой и твердой фаз соответственно; b — феноменологический параметр.

Поверхность раздела фаз Γ описывается следующим уравнением:

$$u(x, y, l(x, y, t), t) = \theta, \tag{5}$$

где θ — температура фазового перехода.

Жидкую фазу будем определять как $\{u(x, y, z, t) > \theta\}$, а твердую — $\{u(x, y, z, t) < \theta\}$.

Обратимся теперь к неклассической схеме моделирования движения границы раздела фаз твердое тело — жидкость, впервые предложенной в работе [2]. Будем рассматривать границу раздела фаз как область конечной толщины. Далее, как было ранее сделано в [2], представим единую для всех точек рассматриваемой физической системы «твердое тело — граница раздела фаз (конечной толщины) — жидкость» систему двух дифференциальных уравнений в частных производных для двух неизвестных полей:

$$u_t = K\Delta u - \frac{b}{2}\varphi_t; \tag{6}$$

$$\alpha\xi^2\varphi_t = \xi^2\Delta\varphi + a^{-1}g(\varphi) + 2(u - \theta), \tag{7}$$

где $\varphi = \varphi(x, y, z, t)$ — параметр порядка; $g = 0{,}5(\varphi - \varphi^3)$ — производная симметричного двухъямного потенциала с минимумами при $\varphi = \pm 1$ (подробнее см. в статье [2]), α, ξ, a, b, K — безразмерные постоянные, которые должны быть физически интерпретированы в ходе экспериментов [2].

Неизвестные поля в указанной системе уравнений — это поле температуры $u = u(x, y, z, t)$ и (гладкое) поле параметра порядка $\varphi = \varphi(x, y, z, t)$, интерпретируемое в [2] как «локальная средняя фаза». Уравнение (6) является строгим в приближении бесконечно тонкой границы раздела фаз, предполагающемся в классической задаче Стефана. Следуя работе [2], будем использовать уравнение (6) и для описания границы раздела фаз конечной толщины при гладком поле параметра порядка $\varphi = \varphi(x, y, z, t)$. Если приравнять нулю правую часть уравнения (7), то получится уравнение Эйлера — Лагранжа, которое можно вывести в рамках решения вариационной задачи о минимизации функционала свободной энергии системы, если выбрать для указанного функционала форму, аналогичную предложенной в теории фазовых переходов Гинзбурга — Ландау [2]. Переход к неравновесному приближению обуславливает появление в левой части уравнения (7) частной производной по времени от параметра порядка. Упомянем, что теория фазовых переходов Гинзбурга — Ландау была первоначально развита для фазовых переходов нормальный металл — сверхпроводник, хотя впоследствии она применялась и для других физических систем, например фазовых переходов «порядок — беспорядок» в ферромагнетиках.

В работе [2] было показано, что в ряде предельных случаев описываемый подход, основанный на теории Гинзбурга — Ландау, сводится к трем известным формулировкам задачи о движении границы раздела фаз, а именно, к классической задаче Стефана и двум ее модификациям. Остановимся на одной из таких модификаций.

Пусть в уравнении (7) параметр α фиксирован, параметры $a, \xi \to 0$ и $\xi a^{-1/2} = \mathrm{const}$; тогда при

$K_1 = K_2 = K$ приходим к формулировке задачи Стефана в следующем виде [2]:

$$(\nabla u(x, y, z, t) - \nabla \breve{u}_L(x, y, z, t)) \cdot \mathbf{n}|_\Gamma = \\ = bv(x, y, l, t); \qquad (8)$$

$$\Delta S((u(x, y, z, t)|_\Gamma - \theta)) = -\sigma k - \alpha\sigma v, \qquad (9)$$

где ΔS — разность энтропий жидкой и твердой фаз; σ — поверхностное натяжение; $k(t, x)$ — параметр, описывающий полную кривизну в точке на межфазной границе.

Первое условие (уравнение (8)) совпадает с условием непрерывности теплового потока на границе раздела фаз в классической задаче Стефана. Второе (уравнение (9)) описывает эффект переохлаждения на границе раздела фаз, обусловленный двумя вкладами различной природы:

эффектом кривизны границы, описанным еще в работах Гиббса и отвечающим за первое слагаемое в правой части условия (8);

добавочным переохлаждением, описываемым эмпирической поправкой, предложенной в [2], второе слагаемое в правой части уравнения (9).

Применим вышеописанную модель к задаче о динамике радиуса озера в тундре. Рассматриваемая модель математически эквивалентна модели вытаивания «тонкого жидкого диска» на поверхности ледяного полупространства (рис. 1).

Рассмотрим случай, когда в условии (9) разность энтропий жидкой и твердой фаз $\Delta S = 0$. При этом оказывается, что нормальная составляющая скорости движения границы раздела фаз v пропорциональна средней кривизне k указанной границы:

$$v(x, y, z, t) = -\mu k(x, y, z, t), \qquad (10)$$

где μ — положительная феноменологическая константа.

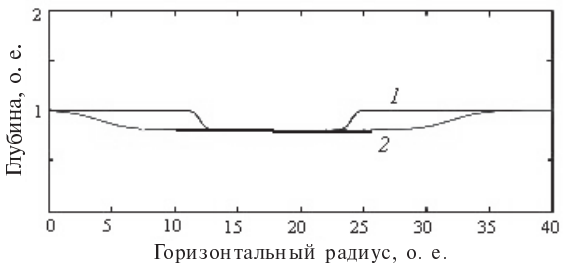


Рис. 1. Фронт протаивания грунта в мерзлотном озере:
1 — исходный; *2* — через 300 лет

Для дальнейшего анализа напомним, как вычисляется средняя кривизна произвольной поверхности в какой-либо ее точке [3–6]. Для каждой точки поверхности существует два нормальных сечения с взаимно перпендикулярными плоскостями, которым соответствует наибольшая кривизна нормального сечения $k_1 = 1/R_1$ и наименьшая — $k_2 = 1/R_2$ (так называемые главные нормальные сечения; R_1, R_2 — соответствующие радиусы кривизны). По определению, средняя кривизна дается формулой

$$H = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right). \qquad (11)$$

Чтобы получить модель расширения (или сужения) озера в горизонтальном направлении, будем исходить из следующих соображений. Поскольку глубина озера много меньше его радиуса, озеро можно моделировать квазидвумерным кругом (точнее, тонким жидким диском) радиуса R, на образующей которого (вертикальный берег озера) в соответствии с формулой (10) будем иметь выражения: $k_1 = 1/R$, $k_2 = 0, H = 1/2R$, а на плоском дне — $k_1 = k_2 = H = 0$.

Соответственно, граница раздела фаз движется в горизонтальном направлении (движение вертикального берега), радиус озера увеличивается (или уменьшается). Используем результаты работы [7]; тогда можно получить следующее дифференциальное уравнение для радиуса озера:

$$\frac{dR}{dt} = -\mu R^{-1}. \qquad (12)$$

По аналогии с работами [7–9] модифицируем уравнение динамики изменения радиуса озера (12), добавляя в его правую часть феноменологическую положительную константу δ (это возможно при не равной нулю разности ΔS энтропий жидкой и твердой фаз):

$$\frac{dR}{dt} = \delta - \mu R^{-1}. \qquad (13)$$

Возвращаемся к граничному условию (9) модифицированной задачи Стефана и предполагаем теперь, что $\Delta S \neq 0$ при большой кривизне фронта; тогда можно положить δ постоянной величиной. Физический смысл этого параметра состоит в том, что он описывает плоский фронт протаивания при ненулевой разности энтропий в жидкой и твердой фазах и определяется через микроскопические параметры a, b, которые мо-

гут быть найдены в ходе экспериментальных исследований динамики протаивания озер в тундре. Фактически теперь соотношение (9) связывает микроскопические процессы, происходящие при фазовом переходе в озере, с макроскопическими процессами роста озер.

Для более реалистичного описания процесса роста озера (в действительности в тундре часть озер испытывает разрастание, а часть — схлопывание) учтем стохастические эффекты при помощи уравнения Фоккера — Планка:

$$\frac{\partial(f(R)\rho)}{\partial R} = d\frac{\partial^2\rho}{\partial R^2}, \qquad (14)$$

где $\rho = \rho(R,t)$ — функция, определяющая изменение радиуса озера с течением времени ($R > 0$); d — параметр; $f = -m/R$ (m — постоянная).

Модифицированное уравнение Фоккера — Планка в случае $d = 0$ сводится к детерминистическому уравнению (13) динамики радиуса озера. Из уравнения (14) находим вид функции $\rho(R) = \eta R^{-k/d}$, где η — константа.

Такое описание функции $\rho(R)$ близко к наблюдаемому распределению озер в тундре, которое можно определить на основании распределения Парэто:

$$\rho(A) = kA_{\min}^{m} A^{-(m+1)}, \quad A \in [A_{\min}, \infty). \qquad (15)$$

Здесь $A_{\min}$ — минимальный радиус озера, k — положительная константа.

Численные расчеты по стандартным алгоритмам для распределения Парэто соответствуют результатам наблюдений. Последние показывают, что величина максимального наблюдаемого радиуса озера в районе Центральной Якутии за период 1976–2000 гг. лежит в интервале 1000 — 2000 м [10], а по результатам численных расчетов по формулам (8), (9), (13), (14) эта величина составляет в среднем 1600 м.

Применение модели динамики мерзлотного озера к задаче об эмиссии метана из вечной мерзлоты

Теперь на основе полученных результатов построим полуэмпирическое соотношение, описывающие эмиссию метана из системы озер. Действительно, из известных данных наблюдений [11] система озер в тундре претерпевает изменение за счет различных процессов, прежде всего из-за протаивания вечной мерзлоты, следовательно, радиус таких озер изменяется, как и количество метана, поступающего из озера в атмосферу, в зависимости от его площади.

Скорость эмиссии метана определяется соотношением

$$V_{met} = \rho_0 \int_{D_M} \exp\left(-\frac{U_0}{k_B u}\right) dxdydz, \qquad (16)$$

где $u = u(x, y, z, t)$ — абсолютная температура в точке в данный момент времени; ρ_0 — плотность метана в объеме, изменяющемся с течением времени; $k_в$ — постоянная Больцмана; U_0 — энергия активации.

Уравнение (16) основано на классических представлениях о том, что вероятность продуцирования молекулы метана в процессе реакции разложения метана определяется как

$$p = \exp\left(-\frac{U_0}{k_B u}\right).$$

Используя уравнение (13), описывающее динамику изменения радиуса озера, и предполагая, что средний радиус системы озер определяется как

$$\bar{R} = N^{-1}\sum_{i=1}^{N} R_i,$$

а общая площадь озер — как $S = \sum_{i=1}^{N} R_i^2$, получим соотношение для потоков метана из озера:

$$V_{met} = C\frac{dS}{dT} = 2CN(-\mu + \delta\bar{R}). \qquad (17)$$

Здесь коэффициент C зависит от температуры u и определяется как больцмановская экспонента; N — количество озер на всей исследуемой площади.

Усредняя температуру u по некоторому периоду времени с учетом того, что рост озер происходит гораздо медленнее, чем изменения в атмосфере, получим простое соотношение

$$V_{met} = \beta(B\bar{R} - 1)\exp(-b_0/\bar{u}(t)), \qquad (18)$$

где β — некоторая постоянная, определяемая из экспериментальных данных, b_0, B — положительные константы.

Феноменологические уравнения для эмиссии метана, полученные в работах [12, 13] как из результата эксперимента, так и путем моделирования, имеют вид:

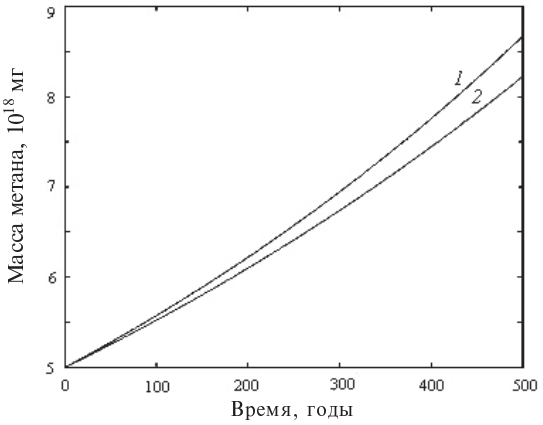


Рис. 2. Прогнозируемое количество метана в атмосфере Земли на 500 лет с учетом (*1*) и без учета (*2*) эмиссии из мерзлотных озер

$$F_{met} = \exp(0,492 + 0,126(T - 273) - 0,057W), \quad (19)$$

где F_{met} — поток метана с поверхности озера в районе станции Бочкаревская, T — температура на глубине озера 12 см, W — уровень воды в озере.

При разложении подэкспоненциального выражения формулы (18) в ряд Тейлора по отклонениям температуры от некоторого усредненного ее значения, полученное выражение имеет ту же структуру, что и уравнение (19). Это подтверждает соответствие полуэмпирического соотношения (18), полученного в рамках теории о динамике изменения радиуса озера, соотношениям, полученным экспериментально.

Применим развитый здесь подход для описания динамики радиуса озера к поиску решения важнейшей задачи об увеличении количества метана в атмосфере. Известно, что резкое увеличение концентрации метана в атмосфере за короткий период времени может привести к «парниковому эффекту» и усилить положительную обратную связь в климатической системе [14, 15].

Учитывая влияние внешних условий на поверхности озера (глобального климата) на температуру воды в озере, предположим, что усредненная температура озера *и* линейно зависит от общего содержания метана в атмосфере; тогда на основании численных расчетов по уравнениям (13), (18) получим, что при типичном значении коэффициента положительной обратной связи $\gamma = 0,8 \cdot 10^{-18}$ К/мг в климатической системе количество метана в атмосфере с учетом эмиссии из мерзлотных озер будет увеличиваться в ближайшие триста лет с большей скоростью, по сравнению с ситуацией, когда метан из озер практически не выделяется (рис. 2).

Таким образом, в данной статье предлагается модель динамики радиуса мерзлотного озера, которая может быть использована для прогнозирования эмиссии метана в атмосферу при таянии вечной мерзлоты. Представленная модель является аналитической и не требует сложных численных расчетов. Она базируется на методах теории фазовых переходов Гинзбурга — Ландау и асимптотической теории радиуса средней кривизны, т. е. основывается на фундаментальных физических теориях, что делает ее более надежной, по сравнению с простыми численными моделями протаивания мерзлотных озер. Кроме того, в рассматриваемой модели используется уравнение Фоккера — Планка, позволяющее учитывать случайные эффекты.

В результате последовательного применения аналитических методов получено явное соотношение, описывающие динамику радиуса озера, которое в дальнейшем использовано для расчетов потоков метана из мерзлотного озера. Показано, что это соотношение согласуется с имеющимися данными наблюдений и простыми эмпирическими моделями, предложенными ранее. Следует отметить, что в полученное соотношение входит ряд эмпирических параметров, которые могут быть найдены из данных наблюдений или эксперимента, поэтому модель может использоваться для анализа таких параметров, получаемых при мониторинге состава атмосферы. В статье рассмотрено использование модели для описания положительной обратной связи в климатической системе. Из представленных расчетов следует, что резкое увеличение концентрации метана в атмосфере может произойти в ближайшие триста лет.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Комаров, И.А.** Термодинамика и тепломассообмен в дисперсных мерзлых породах [Текст] / И.А. Комаров.— М.: Научный мир, 2003.— 608 с.

2. **Caginalp, G.** Stefan and Hele — Shaw type problems as asymptotic limits of the phase field equations [Text] / G. Caginalp // Phys. Rev. A.— 1989.— Vol. 39.— P. 128–146.

3. **Angenent, S.** A computed example of non-uniqueness of mean curvature [Text] / S. Angenent, D.L. Chopp, T. Ilmanen // Comm. Partial Differential Equations.— 1995.— Vol. 20.— № 11–12.— P. 1937–1958.

4. **Angenent, S.** Some recent results on mean curvature flow [Text] / S. Angenent // RAM Res. Appl. Math. –1994.— Vol. 30.— P. 1–18.

5. **Ecker, K.** Mean curvature evolution of entire graphs [Text] / K. Ecker, G. Huisken // Ann. of Math. –1989.— Vol. 130.— № 3.— P. 453–71.

6. **Ecker, K.** Interior estimates for hyper surfaces moving by mean curvature [Text] / K. Ecker, G. Huisken // Invent. Math.— 1991.— Vol. 105.— № 3.— P. 547–569.

7. **Молотков, И.А**. Сосредоточенные нелинейные волны [Текст] / И.А. Молотков, С.А. Вакуленко.– Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1988.— 240 с.

8. **Gage, M.** The heat equation shrinking convex plane curves [Text] / M. Gage, R. S. Hamilton // J. Differential Geom.— 1986. –Vol. 23.— № 1.— P. 69–96.

9. **De Mottoni, P.** Geometrical evolution of developed interfaces [Text] / P. de Mottoni, M. Schatzman // Trans. Amer. Math. Soc.— 1995.— Vol. 347.— № 5.— P. 1533–1589.

10. **Downing, J.A.** The global abundance and size distribution of lakes, ponds, and impoundments [Text] / J.A. Downing, Y.T. Prairie, J.J. Cole, [et al.] // Limnol. Oceanogr.— 2006.— Vol. 51.— № 5.— P. 2388–2397.

11. **Matthews, E.** Methane emissions from natural wetlands: global distribution, area, and environmental characteristics of sources [Text] / E. Matthews, I.Y. Fung // Global Biogeochemical Cycles.— 1987.— Vol. 1.— P. 61–86.

12. **Frolking, G.** Climate controls on temporal variability of methane flux from a poor fen in southeastern New Hampshire: Measurement and modeling [Text] / G. Frolking, P. Grill //Global Biogeochem. Cycles.— 1994.— Vol. 8.— P. 385–387.

13. **Cao, M.K.** Global carbon exchange and methane emissions from natural wetlands: Application of a process-based model [Text] / M.K. Cao, S. Marshall, K. Gregson // J. Geophys. Res.— 1996.— Vol. 101.— P. 14399–14414.

14. **Kerr, R.** Arctic 'Armageddon' needs more science less hype [Text] / R. Kerr // Science.— 2010.— Vol. 8.— P. 620–621.

15. **Kiehl, J.T.** Earth's annual global mean energy budget [Text] / J. T. Kiehl, K.E. Trenberth //Bulletin of the Am. Meteorol. Soc.— 1997.— Vol. 78.— No. 2.— P. 197–208.

ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

УДК 539.23, 537.311.322,535.343.2, 615.47-114:616-07-08

Л.Е. Воробьев, А.Н. Софронов, Д.А. Фирсов, Д.М. Демидов, Р.В. Леус, М.А. Свердлов, А.Л. Тер-Мартиросян

ЛАЗЕРНЫЕ ДИОДЫ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ

Мощные полупроводниковые лазерные диоды все более широко используются в разных областях науки, техники, медицины. В последние годы они находят применение в медицинских технологиях, в частности для лечения онкологических заболеваний методом фотодинамической терапии. В этом случае используется фотосенсибилизатор и мощный (более 1 Вт) лазерный диод, настроенный по длине волны излучения на пик спектра поглощения фотосенсибилизатора. Одним из наиболее эффективных является фотосенсибилизатор на основе водорастворимой формы хлорина E_6 с пиком поглощения в области длины волны 665 нм. Облучение фотосенсибилизатора лазером в этой спектральной области приводит с вероятностью 89 % к регрессу злокачественных новообразований. При этом лазерный диод должен обладать следующими характеристиками:

длина волны излучения в максимуме спектра — примерно 665 ± 5 нм;

ширина линии — менее 3 нм;

мощность излучения — более 1 Вт;

непрерывный режим работы при комнатной температуре;

приемлемая диаграмма направленности в случае ввода излучения в световод или фокусировки излучения;

срок службы — более 1000 часов;

желательны также высокий кпд и слабая зависимость параметров от температуры.

В настоящей работе сообщается о разработке такого лазерного диода. Такое устройство изготавливается на основе фосфорсодержащих двойных наногетероструктур с раздельным электронным и оптическим ограничением и со встроенной в центре структуры квантовой ямой GaInP шириной 70–100 Å (рис. 1). Предлагаемая схема позволяет варьировать длину волны излучения как благодаря изменению состава x твердого раствора $In_{1-x}Ga_xP$, так и благодаря изменению ширины квантовой ямы L_{QW} и, следовательно, изменению энергетических уровней размерного квантования электронов E_{e1} и дырок E_{hh1}. Напомним, что энергия кванта излучения

$$h\nu(x, L_{QW}) = E_g(x) + E_{e1}(L_{QW}) + E_{hh1}(L_{QW}).$$

Структура выращивалась методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке арсенида галлия GaAs. Более детальное описание аналогичных по зонной диаграмме структур и условий их выращивания дано в работе [1].

Конструкция лазерного диода схематично показана на рис. 2; она имеет преимущества по сравнению с конструкцией, имеющей широкий полосковый контакт. В указанном аналоге возможно образование так называемых «филаментов» [2], связанных с различного типа неоднородностями. Как результат в процессе стимулированного излучения возможно резкое изменение условий генерации и переключение ее областей, что приводит к низкочастотным осцилляциям интенсивности излучения, профиля излучения в ближнем и дальнем полях. Описанное явление ухудшает пространственно-временную стабильность излучения. Предлагаемая конструкция лазерного диода (см. рис. 2) улучшает характеристики лазера. Вместо обычного широко-

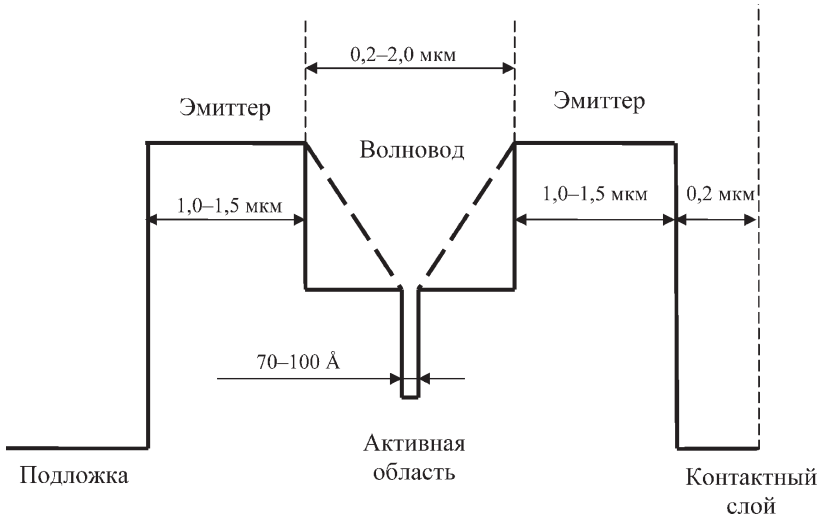


Рис. 1. Зонная диаграмма двойных наногетероструктур с квантовой ямой для лазерных диодов на длину волны генерации 665 нм

го полоскового контакта предложена конструкция типа «мелкая меза с дополнительной изоляцией» с более узким полосковым контактом. Контактную область со стороны *p*-слоя можно рассматривать как систему связанных полосковых излучателей с коэффициентом связи, который может регулироваться изменением глубины травления мезы. Травление структуры до нужной глубины осуществлялось с помощью пучка ионов аргона с энергией до 1 кэВ через маску фоторезиста. Многослойное покрытие задней грани обеспечивало коэффициент отражения более 95 %, передняя грань лазерного диода просветлялась так, что коэффициент отражения был равен 10 %. В предложенной конструкции формируются стабильные во времени каналы протекания тока, что позволяет получить пространственно-временную стабильность характеристик излучения лазерного диода.

Распределение интенсивности в дальнем поле в плоскости, перпендикулярной плоскости *p*—*n*-перехода, представляет собой гладкую кривую с угловой полушириной примерно 32°, в то время как в плоскости этого перехода полуширина диаграммы направленности составляет примерно 6° (рис. 3).

Типичный спектр стимулированного излучения лазерного диода показан на рис. 4. Видно, что полуширина линии излучения не превышает значения 1 нм.

Зависимость мощности излучения от тока показана на рис. 5. Пороговые токи для лазерного диода составляют 1,3 и 2,0 А при 20 и 50 °С соответственно, а плотности пороговых токов — 244 и 375 А/см^2 для двух указанных температур. Характеристическая температура T_0, определяющая рост порогового тока $j_{\text{пор}}$ с ростом температуры

$$j_{\text{пор}} \propto \exp\left(T/T_0\right),$$

равна 70 °С. Мощность излучения в 1 Вт достигается при токе 2,5 А (см. рис. 5).

Изучение шумовых характеристик лазерных диодов с системой полосковых излучателей

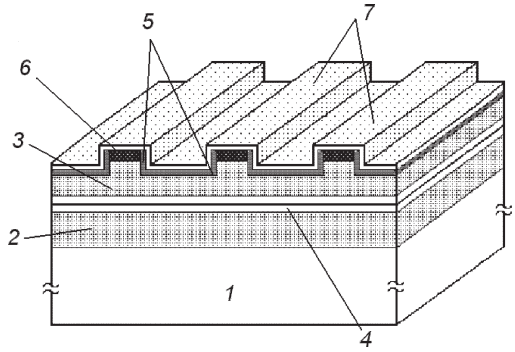


Рис. 2. Конструкция лазерного диода со связанными полосковыми излучателями типа «мелкая меза с дополнительной изоляцией»:

1 — подложка *n*-GaAs; *2,3* — *n*-AlGaInP и *p*-AlGaInP соответственно, *4* — активная область AlGaInP/GaInP/AlGaInP с квантовой ямой шириной ~ 10 нм; *5* — SiO_2 изоляция; *6* — контактный слой *p*-GaAs; *7* — металлический контакт

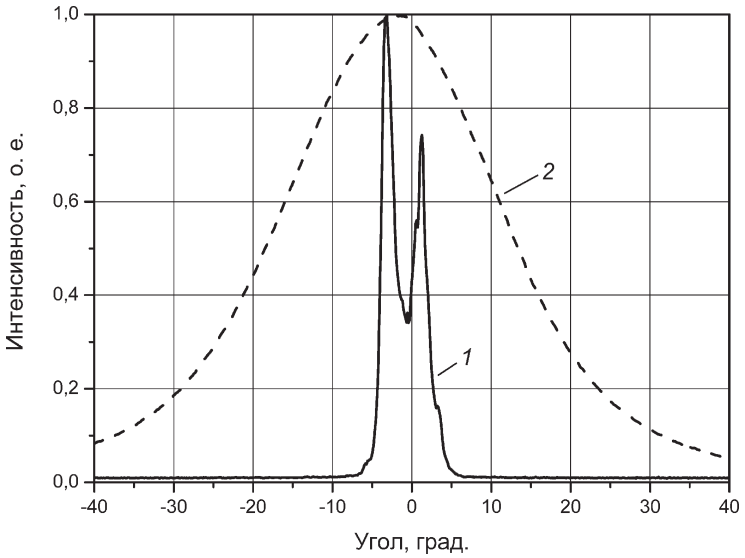


Рис. 3. Распределение интенсивности излучения лазера в дальнем поле в плоскостях, параллельных (*1*) и перпендикулярных (*2*) плоскости *p—n*-перехода. Температура $T = 20$ °C

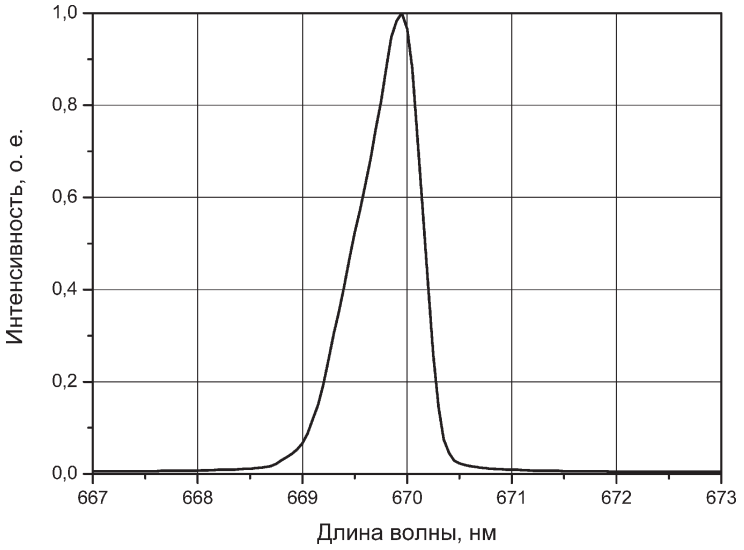


Рис. 4. Спектр излучения лазерного диода; $T = 20$ °C

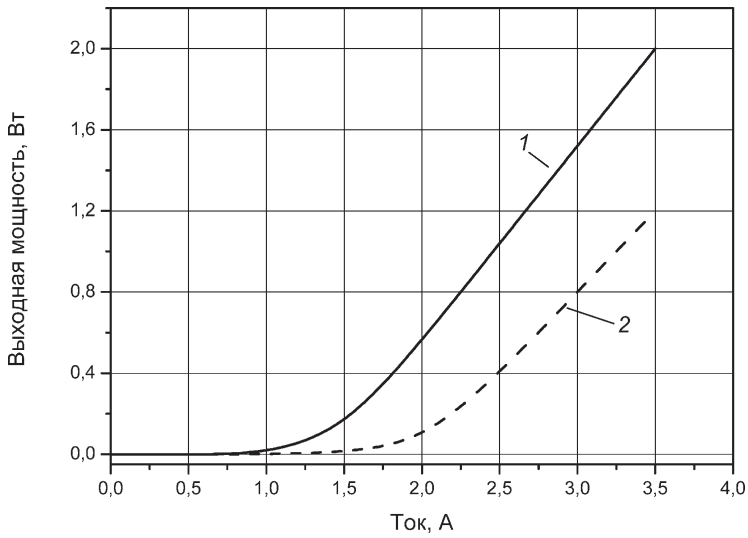


Рис. 5. Зависимость мощности излучения
лазерного диода от тока
при температурах 20 °С (*1*) и 50 °С (*2*)

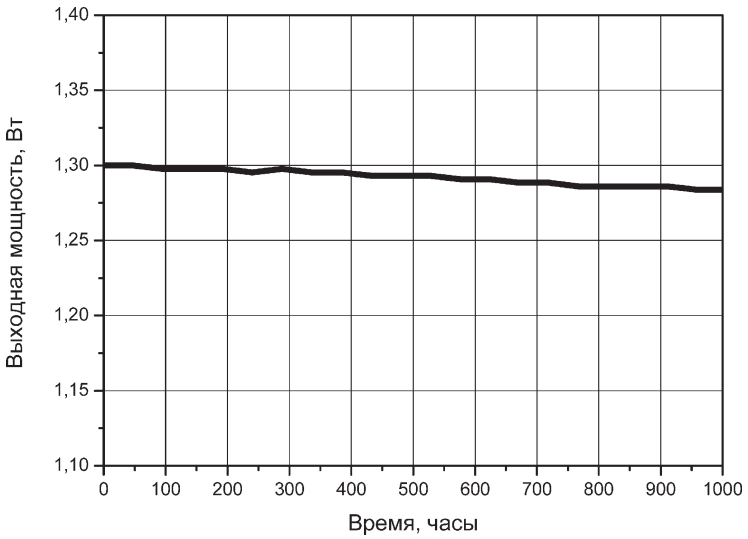


Рис. 6. Зависимость выходной оптической мощности
от времени наработки лазерного диода;
ток лазера 2,77 А, время деградации 1000 ч, падение мощности 1,3 %

позволило установить, что в диапазоне частот 30 Гц — 30 Мгц оптические шумы, связанные с указанными выше осцилляциями, не превышают 0,5 %. В то же время шумы для лазеров с широким полосковым контактом значительно больше и достигают значений 5–10 %.

Благодаря фиксации каналов протекания тока и отсутствию флуктуаций распределение оптической мощности по зеркалу является более однородным, чем в случае лазера с широким полосковым контактом, что увеличивает срок службы лазерных диодов. Было изучено изменение оптической мощности лазерного диода от времени в интервале до 1000 часов при плотности оптической мощности 10 мВт на 1 мкм ширины излучающей площадки при рабочей температуре 20 °С (рис. 6). Анализ данных показал, что ожидаемый срок службы лазерных диодов составляет более 10000 часов.

На основе лазерных диодов с системой связанных полосковых излучателей были также разработаны лазерные системы, включающие лазерный диод с микролинзой, фотодиод обратной связи, радиатор воздушного охлаждения, набор фокусирующей оптики, программируемый драйвер на основе микропроцессора.

Таким образом, разработанные в настоящей работе лазерные диоды с системой полосковых излучателей по своим характеристикам выгодно отличаются от аналогов с широким полосковым контактом. Они имеют высокую температурную и пространственно-временную стабильность излучения в ближнем и дальнем полях, большой срок службы, меньший уровень шумов. Разработанные полупроводниковые приборы удовлетворяют требованиям, предъявляемым к источникам излучения для фотодинамической терапии с использованием фотосенсибилизатора второго поколения.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации в рамках реализации комплексного проекта по созданию высокотехнологичного производства (договор №13.G25.31.0055 с Министерством образования и науки Российской Федерации).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Карпов, С.Ю.** Линейки мощных полупроводниковых лазеров, изготовленных методом молекулярно-пучковой эпитаксии [Текст] / С.Ю. Карпов, Г. де ла Круз, В.Е. Мячин [и др.] // Письма в ЖТФ.— 1991.— Т. 17.— № 7.— С. 31.

2. **Chow, W.W.** Filamentation in conventional double heterostructure and quantum well semiconductor lasers [Text]/ W.W. Chow, D. Depatie // IEEE J. Quantum Electron.— 1988.— Vol. 24— Iss. 7.— P. 1297–1301.

УДК 537.533.79; 537.534.79

Н.К. Краснова, О.А. Абрамёнок

СЕМЕЙСТВО ПОЛЕВЫХ СТРУКТУР С ПЛОСКОСТЬЮ СИММЕТРИИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОГРАФИИ

Большую роль в изучении физических и химических свойств материалов играют методы электронной спектроскопии. Информация, заключенная в энергетических и угловых спектрах вторичных электронов, позволяет провести качественный и количественный анализ изучаемых объектов. Несомненно, существующий арсенал приборов — спектрометров, может с легкостью справиться с этими задачами анализа. Другое дело, если объектом изучения становятся процессы, протекающие на поверхности и в приповерхностной области в режиме реального времени. В этом случае важно фиксировать полный энергетический спектр со скоростью, сравнимой со скоростью наблюдаемого процесса. Для решения такой задачи подходят спектрографы — приборы, которые одномоментно регистрируют весь диапазон энергий и/или углов.

На протяжении нескольких последних лет в лаборатории «Корпускулярная оптика» радиофизического факультета СПбГПУ строится идеология синтеза таких устройств. Важно, чтобы полевая структура, реализуемая в спектрографе, разделяла бы поток исследуемых частиц на струи, группируя их по энергиям. Тогда на позиционно-чувствительном детекторе (ПЧД), совмещенном с микроканальной пластиной, фиксировался бы сигнал от каждой такой группы. Чтобы воплотить данную схему, нами были выработаны подходы к синтезу таких электростатических полей, и это нашло отражение в наших публикациях [1, 2]. Если полевая структура представляет собой функцию, однородную по Л. Эйлеру, которая удовлетворяет тождеству

$$\varphi(cx, cy, cz) = c^n \varphi(x, y, z), \qquad (1)$$

где c = const, n — показатель однородности, то требуемое разделение потока обеспечено.

Траектории частиц с разными энергиями в таких полях подобны, и коэффициент подобия зависит от соотношения энергий двух сравниваемых пучков. Еще одно уникальное свойство данных полей состоит в том, что линия фокусов есть прямая и значит легко совмещается с плоским ПЧД.

Общий класс полевых структур, являющихся однородными функциями, может быть представлен иначе в виде

$$\varphi = \rho^n g\left(\frac{x}{\rho}, \frac{y}{\rho}\right), \qquad (2)$$

где $\rho = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — радиус, $g\left(\frac{x}{\rho}, \frac{y}{\rho}\right)$ — произвольная функция двух переменных.

Если в тождестве (1) положить $c = 1/\rho$, то легко видеть, что представление (2) является его следствием. С другой стороны, аналитическую форму класса рассматриваемых полей (2) можно представить как произведение двух функций: одна зависит от радиуса или координат, а вторая — от отношений координат или от углов. Первая из функций является однородной функцией степени n, а вторая — однородной функцией нулевой степени. Выбор последней и делает класс полевых структур достаточно разнообразным как при практическом воплощении в виде электродных конфигураций, так и при моделировании различных режимов работы прибора.

Безразмерная модель

Для удобства изложения и упрощения записи результатов исследования мы использовали безразмерную, или унифицированную модель движения [3], которую здесь кратко опишем.

Задаются характерные величины — длина l и потенциал Φ_0, которые выбираются для каждой конкретной задачи, например, l — база прибора, Φ_0 – потенциал настройки. Размерные величины X, Y, Z, Φ и безразмерные величины x, y, z, φ связаны друг с другом через следующие соотношения:

$$X = lx, \qquad Y = ly, \qquad Z = lz; \tag{3}$$

$$\Phi = \Phi_0 \varphi(x, y, z), \tag{4}$$

где $\varphi(x, y, z)$ — математическая форма потенциальной структуры.

Кроме того, вводится характерное время T по формуле

$$t = T\tau. \tag{5}$$

Функция Лагранжа будет иметь вид

$$L = m\frac{\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2}{2} + q\Phi, \tag{6}$$

где m — масса частицы, q — ее заряд.

Если ввести безразмерные величины с учетом выражений (3)–(5) и наложить условие

$$\frac{ml^2}{T^2} = q\Phi_0, \tag{7}$$

то в функции Лагранжа (6) выделится общий множитель, который можно сократить, и функция Лагранжа сохранит свой вид, но уже в новых безразмерных координатах:

$$L = \frac{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}{2} + \varphi. \tag{8}$$

Размерному набору начальных данных будет соответствовать свой безразмерный набор

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{X_0}{l}, \qquad \dot{x}_0 = \frac{T}{l}\dot{X}_0; \\ y_0 &= \frac{Y_0}{l}, \qquad \dot{y}_0 = \frac{T}{l}\dot{Y}_0; \\ z_0 &= \frac{Z_0}{l}, \qquad \dot{z}_0 = \frac{T}{l}\dot{Z}_0; \end{aligned} \tag{9}$$

а энергии — свой безразмерный аналог:

$$W = \frac{\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2 + \dot{z}_0^2}{2} = \frac{E}{|q\Phi_0|}, \tag{10}$$

который приобретает свой особый смысл: это есть энергия частицы, выраженная в долях характерной энергии прибора.

Постановка задачи

Класс однородных функций, в которых можно реализовать спектрографическое разделение потока частиц, обширен, поэтому ограничимся рассмотрением полей, имеющих плоскость симметрии $y = 0$. Кроме того, будем изучать свойства полей, описываемых аналитическим выражением (2), где разделены координатная и угловая части. Само исследование мы построим следующим образом. Определив потенциал в плоскости симметрии, в подробности изучим движения пучков, выведем основные закономерности и характеристики режима. Затем, используя методы математического аппарата [2], аналитически продолжим поле в пространство и рассмотрим уже пространственные характеристики данного поля.

Итак, будем изучать свойства поля, задаваемого как

$$\varphi(x, z) = \frac{x^2}{z} = x\mathrm{tg}\gamma. \tag{11}$$

Координатная часть — это плоское поле, а угловая — тангенс угла γ относительно оси z. Сечения эквипотенциалей плоскостью симметрии этого поля есть параболы, симметричные относительно оси z. Точка $(x = 0, z = 0)$ является особой точкой поля — полюсом, и все эквипотенциали — и положительные, и отрицательные проходят через эту точку. На всей оси z поле равно нулю, поэтому очень удобно выбрать эту ось в качестве старта пучка и детектирования. Идеальная ситуация со спектрографической точки зрения получилась бы, если запуск частиц осуществить из начала координат — из центра подобия. Однако из-за неопределенности потенциала в этой точке положение источника следует сместить либо вдоль оси z, либо вниз вдоль оси x.

Анализ движения заряженных частиц в плоскости $y = 0$

Уравнения движения в плоскости $y = 0$ запишутся в виде

$$\begin{cases} \ddot{x} = -\dfrac{2x}{z}; \\ \ddot{z} = \dfrac{x^2}{z^2}, \end{cases} \tag{12}$$

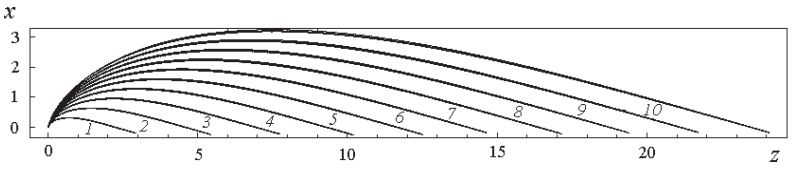


Рис. 1. Реализация спектрографического принципа разделения потока заряженных частиц в поле $\varphi = x^2/z$

Траектории частиц с разной энергией W:
1 (*1*); 2 (*2*); 3 (*3*); 4 (*4*); 5 (*5*); 6 (*6*); 7 (*7*); 8 (*8*); 9 (*9*); 10 (*10*)

а начальные данные

$$x_0 = -h, \quad \dot{x}_0 = \sqrt{2W}\sin\theta; \qquad z_0 = 0, \quad \dot{z}_0 = \sqrt{2W}\cos\theta, \tag{13}$$

где h – варьируемый параметр.

Интегрирование системы (12) с учетом данных (13) проводилось численно по методу Рунге — Кутта 6-го порядка.

Моноэнергетический пучок $W = 1$, стартующий из точечного источника ($x_0 = -0{,}001$, $z_0 = 0$), фокусируется на ось z, если осевая траектория пучка составляет с этой осью угол $\theta_0 = 73{,}5^\circ$. Размер пятна на границе поля от пучка с разбросом $71^\circ < \theta_0 < 76^\circ$ составляет $\Delta z = 0{,}0072$. Увеличивая диапазон энергий до 10, мы получаем набор тонких струек, разнесенных вдоль оси z (рис. 1). Размер пятна от каждой такой струйки растет с увеличением энергии: для $W = 10$ размер пятна увеличивается в пять раз и составляет $\Delta z = 0{,}036$ (рис. 2). Небольшое смещение источника из точки центра подобия нарушает предсказанное подобие траекторий [2], однако отклонение это небольшое.

Выходной угол осевой траектории составляет приблизительно 16°. Поле фактически превращает электронный пучок в параллельный: при угловом разбросе на входе в 5–6° на выходе разброс снижается до 0,4–0,5°.

Энергетическая дисперсия спектрографа, которая выражается как

$$D = \frac{\Delta z}{\Delta W} W, \tag{14}$$

— небольшая и растет линейно с ростом энергии. В этом случае более показательной оказывается другая характеристика — приведенная дисперсия

$$D^* = \frac{D}{S}, \tag{15}$$

где S – расстояние между источником и центром пятна данной энергии.

Чем больше энергия W, тем дальше точки прилета, и, кроме того, растет и само пятно, тогда приведенная дисперсия D^* практически остается неизменной во всем исследуемом диапазоне энергий $(1 < W < 10)$ и составляет около единицы (рис. 3).

Удельная дисперсия δ_W, характеризующая эффективность работы спектрографа, зависит от смещения струек друг относительно друга, т. е. дисперсии, и от качества фокусировки, т. е. размера пятна. Энергетическое разрешение как обратная величина удельной дисперсии $r = 1/\delta_W$, которое может быть достигнуто в спектрографе, уменьшается с ростом энергии и имеет значение не хуже 0,003 (рис. 4).

Траекторный расчет был проведен и для энергий, меньших $W < 1$. Для диапазона энергий $0{,}1 < W < 1$ характерен сильно нелинейный характер всех величин (см. рис. 1–4). Такое поведение

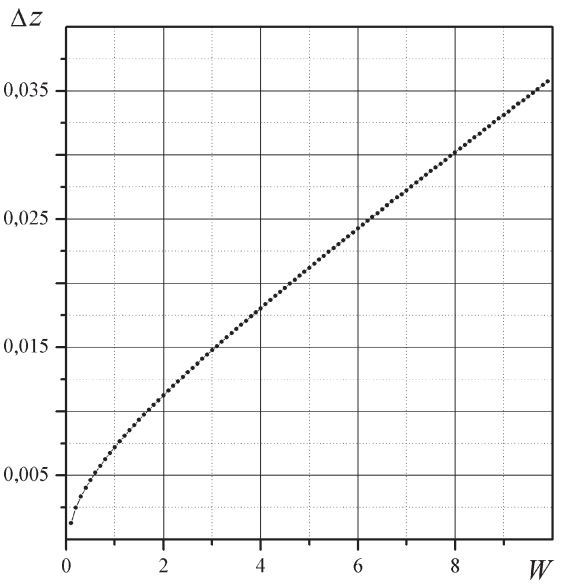


Рис. 2. Зависимость размера пятна изображения Δz от энергии пучка частиц W

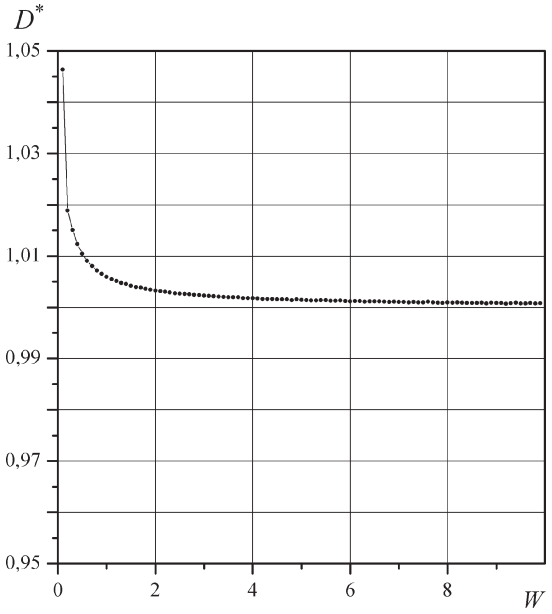


Рис. 3. Зависимость приведенной энергетической дисперсии от энергии в поле $\varphi = x^2/z$

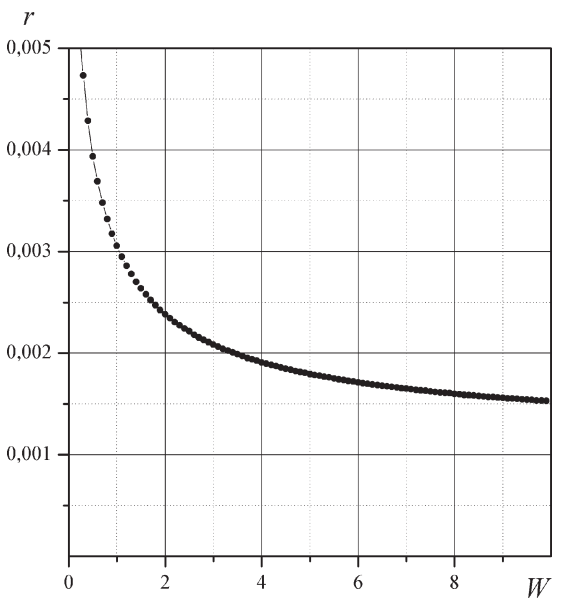


Рис. 4. Энергетическое разрешение спектрографа на основе поля $\varphi = x^2/z$ в зависимости от энергии

объясняется тем фактом, что медленные частицы, влетая в поле вблизи сильной неоднородности поля ($x = 0$, $z = 0$), большее время оказываются под воздействием сил, чем частицы с энергиями $W > 1$, которые быстро покидают эту область.

Можно оценить число энергетических каналов, которые могут быть разрешимы на ПЧД, если иметь сведения о размытии пятна от точечного источника и расстояний между отдельными струями. Их число с ростом энергии уменьшается в несколько раз: например, для энергий $W > 5$ число каналов не превышает 10, а для $1 < W < 2$ составляет несколько десятков.

Для того чтобы исследовать возможности данного класса полевых структур и найти оптимальный режим работы спектрографа, на следующем этапе мы рассмотрели поле

$$\varphi(x, z) = x\left(\frac{x}{z} + \mu\frac{x^2}{z^2}\right), \qquad (17)$$

где μ — произвольная константа, которая может принимать и положительные и отрицательные значения.

Мы провели полный траекторный анализ в этом поле (17), варьируя параметр μ. Условия ввода-вывода пучка были выбраны те же, что и ранее.

На границе поля пучок энергией $W = 1$ и разбросом $\Delta\theta = 4{-}5^\circ$ хорошо фокусировался в небольшое пятно при наклоне осевой траектории $\theta_0 = 73^\circ$ независимо от тех значений параметра μ, которые изучались в работе. Более острая фокусировка получилась при $\mu = 0{,}001$ для пучков с энергией из всего исследуемого диапазона. Чуть хуже пучок фокусировался в поле с $\mu = -0{,}001$. Гораздо большее размытие пучка наблюдалось в полях с большим значением параметров $\mu = 0{,}01$ и $\mu = -0{,}01$.

Энергетическая дисперсия остается на прежнем уровне для всех рассмотренных вариантов.

Характер зависимости энергетического разрешения от энергии меняется: во всем диапазоне $1 < W < 10$ для $\mu = 0{,}001$ и $\mu = -0{,}001$ не превышает 0,0015 (рис. 5), и при положительном значении параметра разрешение немного лучше (см. кривая *1*, рис. 5).

В целом все основные электронно-оптические характеристики поля (17) мало отличаются от таковых полевой структуры (11); по-видимому, модификации полевых структур с добавлением таких членов, как $\frac{x^4}{z^4}$, $\frac{x^6}{z^6}$ и т. д., кардинально не изменят электронно-оптическую ситуацию, поскольку являются членами

более высокого порядка малости. Поэтому теперь перейдем к изучению пространственных свойств поля. Для этого нам необходимо по ходу потенциала в плоскости симметрии восстановить структуру потенциала в пространстве. Сформулируем задачу Коши для исследуемого потенциала (11).

Задача Коши

Мы ищем аналитическую гармоническую функцию, являющуюся решением уравнения Лапласа

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 0; \qquad (18)$$

однородную, удовлетворяющую тождеству Л. Эйлера

$$x\frac{\partial\varphi}{\partial x} + y\frac{\partial\varphi}{\partial y} + z\frac{\partial\varphi}{\partial z} = n\varphi, \qquad (19)$$

если $n = 1$, и заданную в плоскости симметрии $y = 0$:

$$\varphi\big|_{y=0} = \frac{x^2}{z}. \qquad (20)$$

Известно, что совместное решение уравнения Лапласа (18) и уравнения Эйлера (19) с показателем однородности $n = 0$ дает решение в виде потенциалов Донкина [4]:

$$\Omega(\omega) = \psi(x, y, z) + i\varphi(x, y, z); \qquad (21)$$

$$\omega = \frac{x + iy}{z + \rho}, \qquad \rho = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \qquad (22)$$

где $\Omega(\omega)$ — произвольная аналитическая функция от аргумента ω, комплексный потенциал; ψ — функция потока; φ — скалярный потенциал.

Если потенциал симметричен относительно плоскости $y = 0$, а в самой плоскости задается функцией, зависящей от отношения координат или полярного угла, например $\lambda\left(\frac{z}{x}\right)$, то полный комплексный потенциал в пространстве может быть найден как

$$\Omega(\omega) = if(\omega), \qquad (23)$$

где ω – аргумент Донкина (22); f — произвольная аналитическая функция, которая вещественна, если аргумент также вещественен, и удовлетворяет следующему условию:

$$f(\omega)\big|_{y=0} = \lambda\left(\frac{x}{z}\right). \qquad (24)$$

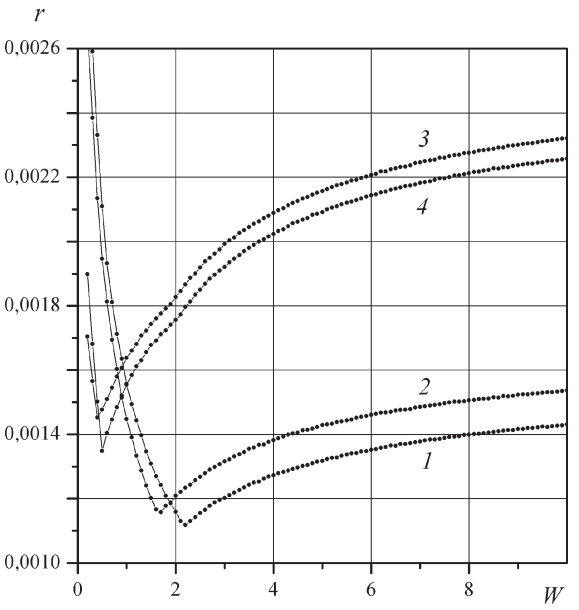


Рис. 5. Энергетическое разрешение как функция от энергии для различных конфигураций спектрографа на основе поля, выраженного формулой (17), при следующих значениях параметра μ: 0,001 (*1*); –0,001 (*2*); 0,01 (*3*); –0,01 (*4*)

Эти потенциалы Донкина (21), (22) и послужат нам для поиска полей с определенными выше свойствами.

В работе [2] разработан и описан генезис класса спектрографических структур через потенциалы Донкина. «Прародителем» этого класса является потенциал, равный произведению потенциала кулоновского центра $\frac{1}{\rho}$ и функции от аргумента Донкина $\Omega(\omega)$. Каждая из этих функций в отдельности является гармоничной, но поскольку их поверхности постоянного уровня взаимно перпендикулярны, то их произведение — также гармоническая функция, что следует из леммы, сформулированной в работе [2]. Используя процедуру дифференцирования по z, примененную к потенциалу $\frac{\Omega(\omega)}{\rho}$, мы можем

получить бесконечную цепочку однородных функций с отрицательными степенями. Далее, если воспользоваться преобразованием Кельвина [5], то класс функций расширится столь же обширным рядом функций с положительными степенями. Кроме того, в этой работе описан подробно алгоритм решения задачи Коши, если известен ход потенциала в плоскости симметрии. Для решения задачи Коши, сформулированной в начале раздела, мы и применим данный подход.

Сначала перепишем условие (20), разделив радиальную и угловую части:

$$\varphi_1\big|_{y=0} = r\frac{x^2}{rz} = r\xi\left(\frac{z}{x}\right), \quad r=\sqrt{x^2+z^2}\,. \qquad (25)$$

Поскольку радиальная часть представляет собой функцию, однородную кратности $n=1$, то искомый полный потенциал Ω_1 также есть однородная функция первой степени кратности, и его можно получить из потенциала Ω_{-2}, применив преобразование Кельвина. Угловые части обоих потенциалов Ω_1 и Ω_{-2} идентичны; различаются лишь радиальные, определяющие собственно степень однородности функции. Поэтому на данном этапе мы будем искать потенциал Ω_{-2}, для которого условие задачи Коши переформулируется следующим образом:

$$\varphi_{-2}\big|_{y=0} = \frac{1}{r^2}\xi\left(\frac{z}{x}\right) = \frac{1}{r^2}\frac{x^2}{z\sqrt{x^2+z^2}}\,. \qquad (26)$$

Полный комплексный потенциал Ω_{-2} есть результат дифференцирования Ω_{-1} по z, и построение будет выглядеть как

$$\Omega_{-2} = \frac{\partial\Omega_{-1}}{\partial z} = i\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{f(\omega)}{\rho}\right). \qquad (27)$$

Неизвестная функция $f(\omega)$ есть функция, четная относительно y и не содержащая мнимости, кроме своего аргумента ω. Эта функция должна удовлетворять условию задачи Коши (26):

$$\left.\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{f(\omega)}{\rho}\right)\right|_{y=0} = \frac{\xi\left(\frac{z}{x}\right)}{x^2+z^2}. \qquad (28)$$

В правой части уравнения (28) фигурирует лишь вещественная часть аргумента Донкина:

$$\omega = \frac{x}{z+\sqrt{x^2+z^2}}\,. \qquad (29)$$

Введем новую переменную $p=\frac{z}{x}$ и найдем связь между p и ω из последнего соотношения (29). Получим формулу

$$\omega = \frac{1}{p+\sqrt{1+p^2}}\,. \qquad (30)$$

Теперь преобразуем с учетом (30) выражение (28):

$$\frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{f\left(\frac{1}{p+\sqrt{1+p^2}}\right)}{\sqrt{1+p^2}}\right) = \frac{1}{p\left(1+p^2\right)^{3/2}}.$$

Интегрируя обе части обыкновенного дифференциального уравнения, получим вид функции f, выраженной через переменную p:

$$f\left(\frac{1}{p+\sqrt{1+p^2}}\right) = 1-\sqrt{1+p^2}\,\ln\frac{1+\sqrt{1+p^2}}{p}\,. \qquad (31)$$

Теперь необходимо привести найденную функцию к виду, который бы представлял зависимость от аргумента ω; для этого используем связь между p и ω (30) и выполним обратную подстановку:

$$f(\omega) = 1-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega}-\omega\right)\ln\frac{1+\frac{1}{\omega}+\omega}{\frac{1}{\omega}-\omega}\,. \qquad (32)$$

Заменяем вещественную часть аргумента Донкина (или укороченный аргумент) на полный и вычисляем комплексный потенциал, подставив найденное выражение (32) в (27):

$$\Omega_{-2} = i\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{f(\omega)}{\rho}\right) = i\frac{1}{\rho}\frac{\partial f(\omega)}{\partial z} - i\frac{z}{\rho^3}f(\omega)\,. \qquad (33)$$

Далее, выполняя дифференцирование и проведя некоторые тривиальные математические преобразования, имеем выражение:

$$\Omega_{-2} = \frac{i}{\rho^2}\left[i\frac{y}{\rho}\ln\frac{2+\frac{1}{\omega}+\omega}{\frac{1}{\omega}-\omega} + \frac{\frac{1}{\omega}-\omega}{\frac{1}{\omega}+\omega} - \frac{z}{\rho}\right], \qquad (34)$$

где в квадратных скобках представлена угловая часть искомого потенциала, выраженная через аргумент Донкина.

Далее следует выразить аргумент ω через декартовы координаты, воспользовавшись (22), и выделить мнимую часть полученного выражения. Тогда

$$\varphi_{-2} = \frac{1}{\rho^2}\left[\frac{x^2 z}{\rho\left(z^2+y^2\right)} - \frac{y}{\rho}\operatorname{arctg}\frac{y}{z}\right]. \qquad (35)$$

Чтобы перейти к потенциалу, являющемуся однородной функцией первой степени, выполним преобразование Кельвина. Оно трансформирует лишь множитель, стоящий перед квадратной скобкой. Окончательно мы имеем решение задачи Коши, поставленной в начале раздела, в виде

$$\varphi_1\left(x, y, z\right) = \frac{x^2 z}{z^2+y^2} - y\operatorname{arctg}\frac{y}{z}. \qquad (36)$$

Форма эквипотенциальных поверхностей поля $\varphi_1 = \text{const}$ — квазиконическая. Ось x есть местоположение особых точек, где поле не определено, вблизи нее проходят все эквипотенциали. Относительно плоскостей $x = 0$ и $y = 0$ поверхности симметричны, а плоскость $z = 0$ есть плоскость антисимметрии. В изучаемой области движения $\{x > 0, z > 0\}$ эквипотенциальные поверхности с неотрицательными номерами есть незамкнутые, расширяющиеся от начала координат квазиконуса, вложенные друг в друга, не имеющие общих точек; эквипотенциальные поверхности с отрицательными номерами разбиваются на два крыла. Вид эквипотенциальной поверхности $\varphi = 1$ представлен на рис. 6.

Движение частиц в поле с потенциалом, выраженным формулой (36)

Рассмотрим движение заряженных частиц в пространстве, ограниченном двумя эквипотенциальными поверхностями $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_1 = C\,(C > 0)$, выбрав ту часть, где $x > 0$ и $z > 0$. Уравнения движения частицы запишутся в виде

$$\begin{cases} \ddot{x} = -\dfrac{\partial\varphi}{\partial x}; \\ \ddot{y} = -\dfrac{\partial\varphi}{\partial y}; \\ \ddot{z} = -\dfrac{\partial\varphi}{\partial z}; \end{cases} \qquad (37)$$

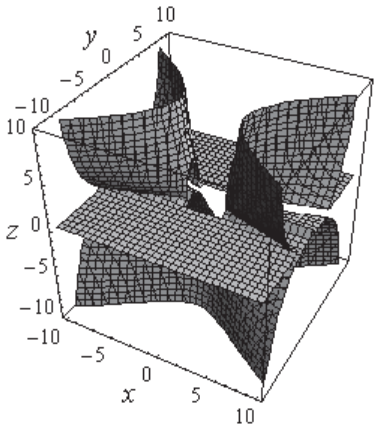


Рис. 6. Пространственный вид полевой структуры, выраженной формулой (17). Эквипотенциальная поверхность $\varphi^* = -1$

набор начальных условий определяется выражениями

$$\begin{aligned} x_0 &= -h, \quad \dot{x}_0 = \sqrt{2W}\sin\theta\cos\delta; \\ y_0 &= 0, \quad\;\; \dot{y}_0 = \sqrt{2W}\sin\theta\sin\delta; \\ z_0 &= 0, \quad\;\; \dot{z}_0 = \sqrt{2W}\cos\theta. \end{aligned} \qquad (38)$$

Запускаем конический пучок с вариацией углов $-2° \le \delta \le 2°$ (относительно плоскости симметрии) и $71° \le \theta \le 75°$ (относительно оси z). Численное моделирование показало, что режимов поперечной фокусировки в этом поле нет и плоскость $y = 0$ является плоскостью расталкивания частиц. Так, в области поля до $\varphi_1 = 0$ максимальный уход от плоскости симметрии для пучка с энергией $W = 1$ составляет $\Delta y = 0{,}45$, а пучка $W = 10$ — $\Delta y = 3{,}2$; встреча частиц с плоскостью $x = 0$, в дрейфовой части пространства, соответственно — $\Delta y = 2{,}65$ и $\Delta y = 136{,}46$.

Обсуждение результатов

В данном исследовании мы рассмотрели семейство полевых структур, в которых поток заряженных частиц разделяется по спектрографическому принципу. Выбор данного семейства структур обусловлен несколькими причинами.

Во-первых, изучаемое поле в плоскости $y = 0$ есть модификация плоского зеркала (ПЗ). Плоское зеркало является «идеальным» спектрографом. Местоположение фокусов на нижней пластине линейно зависит от энергии частиц. Однако поперечной фокусировки в поле нет,

и расходящийся из точечного источника пучок создает изображение в виде отрезка, длина которого растет с ростом энергии. В нашем случае мы получили достаточно хорошую фокусировку по углу для широкого диапазона энергий, что обеспечивает высокое разрешение. Так, для варианта $\mu = 0$ разрешение не более 0,002 практически во всем диапазоне энергий $1 < W < 10$, в то время как в ПЗ $r \cong 0{,}004$. Приведенная энергетическая дисперсия в обоих случаях почти одна и та же: $\frac{D}{S} \approx 1$. Размер пятна изображения от точечного источника с начальным разбросом углов растет гораздо медленнее и в два раза меньше для больших энергий $W \geq 6$.

Вторая причина выбора — проверка теории синтеза спектрографических структур на основе потенциалов Донкина и анализ дисперсионных и фокусирующих свойств этих структур. Хотя изученные структуры и не обладают поперечной фокусировкой пучка, однако демонстрируют достаточно хорошие фокусирующие свойства по углу в направлении движения.

Представленное исследование хорошо иллюстрирует и расширяет класс электростатических спектрографов с плоскостью симметрии на основе однородных потенциалов с применением потенциалов Донкина, а также открывает новые перспективные возможности применения методов синтеза для спектрографических сред.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Голиков, Ю.К.** Обобщенный принцип подобия и его применение в электронной спектрографии [Текст] / Ю.К. Голиков, Н.К. Краснова // Прикладная физика.— 2007.— № 2.— С. 5–11.

2. **Голиков, Ю.К.** Электрические поля, однородные по Л. Эйлеру, для электронной спектрографии [Текст] / Ю.К. Голиков, Н.К. Краснова // ЖТФ.— 2011.— Т. 81.— № 2.— С. 9–15.

3. **Голиков, Ю.К.** Теория синтеза электростатических энергоанализаторов [Текст] / Ю.К. Голиков, Н.К. Краснова.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010.— 409 с.

4. **Уиттекер, Э.Т.** Курс современного анализа : в 2 т. Т. 2 [Текст] / Э.Т. Уиттекер, Дж.Н. Ватсон.— М.: Физматгиз, 1963.— 516 с.

5. **Гринберг, Г.А.** Избранные вопросы математической теории электрических и магнитных явлений [Текст] / Г.А. Гринберг.— М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1948.— 727 с.

УДК 535.36:534.29

Ю.М. Мокрушин

ДИФРАКЦИЯ СВЕТА НА УЛЬТРАЗВУКЕ ВБЛИЗИ ОПТИЧЕСКОЙ ОСИ ГИРОТРОПНОГО КРИСТАЛЛА

Задача о дифракции света на ультразвуке рассматривалась многими авторами. В настоящее время существует два наиболее общих подхода к решению этой задачи, позволяющих в принципе получить решение с наперед заданной степенью точности. Первый подход основан на решении системы связанных дифференциально-разностных уравнений, описывающих взаимодействие между различными дифракционными порядками. Этот метод нашел наиболее завершенное выражение в работах [1–7]. Другой подход основан на решении интегрального уравнения для поля, полученного с помощью введения эквивалентных токов и разложения искомого поля по плоским волнам [8–11]. Это решение имеет вид аналитического выражения в виде сравнительно быстро сходящихся рядов. Практический интерес, который вызывает кристалл диоксида теллура TeO_2, требует рассмотрения вопроса о дифракции света на ультразвуке в анизотропной среде, обладающей гиротропными свойствами. В данной статье приведено обобщенное решение дифракционной задачи в случае анизотропной среды, обладающей гиротропией, на основе метода, предложенного в работах [8–11]. В конечном итоге полученное решение позволит получить выражение для дифрагированного поля после акустооптического модулятора (АОМ), выполненного из TeO_2 (техническое название парателлурит).

Постановка задачи и вывод интегрального уравнения для поля

Рассмотрим однородную бесконечную анизотропную немагнитную и непроводящую среду, обладающую слабой пространственной дисперсией. Материальное уравнение для такой среды имеет вид [12]:

$$\mathbf{D} = (\hat{\varepsilon}^0 + i\hat{\gamma}\mathbf{k})\mathbf{E}; \quad D_i = \left(\varepsilon_{ij}^0 + i\gamma_{ijl}k_l\right)E_j, \qquad (1)$$

где $\mathbf{D}$ — вектор смещения; $\mathbf{E}$ — вектор электрического поля; $\hat{\varepsilon}^0$ — тензор диэлектрической проницаемости среды; $\hat{\gamma}$ — тензор третьего ранга, антисимметричный по первым двум индексам, характеризующий гиротропию среды; $\mathbf{k}$ — волновой вектор электромагнитного поля.

Определим в данной среде систему координат $x_1 = X, x_2 = Y, x_3 = Z$, связанную с кристаллофизической системой x_1^0, x_2^0, x_3^0 матрицей преобразования α_{ij}: $x_i = \alpha_{ij} \cdot x_j^0$. В общем случае в плоскости $X0Z$ этой среды, которую будем называть плоскостью рассеяния, в направлении $\mathbf{m}$, составляющем угол θ с осью Z, могут распространяться две эллиптически поляризованные плоские световые волны [13]:

$$\mathbf{E}_{k_d} = \mathbf{U}_{k_d} e^{i(\mathbf{k}_d \cdot \mathbf{r} - \omega \cdot t)}, \qquad (2)$$

где $\mathbf{k}_d\mathbf{r} = \dfrac{2\pi}{\lambda_0} n_d \left(z\cos\theta - x\sin\theta\right)$, $d = 1, 2$; $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, λ_0 — длина волны света в вакууме; ω — частота световой волны; $\mathbf{U}_{k_d}$ — вектор амплитуды световой волны; n_d — показатели преломления среды для двух эллиптически поляризованных волн, распространяющихся в направлении $\mathbf{m}$.

Будем рассматривать в такой среде объем V, ограниченный плоскими поверхностями $S_1\left(z = -L/2\right)$ и $S_2\left(z = L/2\right)$, имеющими бесконечные размеры по X и Y (рис. 1).

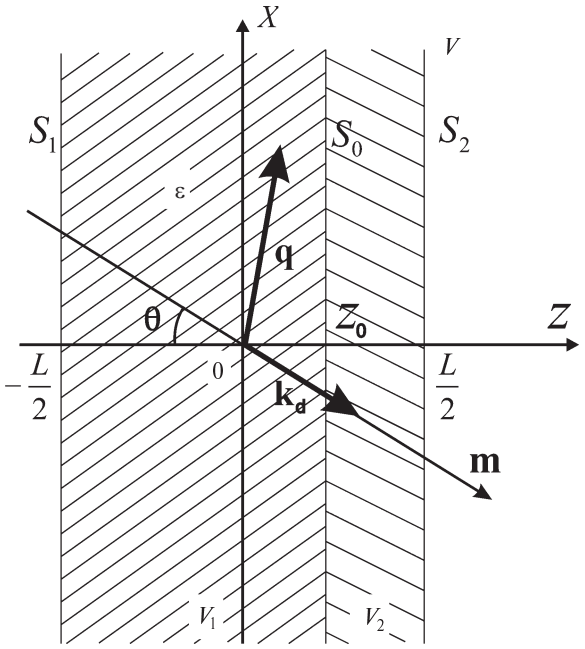


Рис. 1. Геометрия взаимодействия света со звуком

В этой среде при $|z| \le L/2$ в направлении $\mathbf{r}'$ распространяется ультразвуковая волна

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}' - \mathbf{v}t)\mathbf{u}^0 e^{i(\mathbf{qr}-\Omega t)}, \quad (3)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ — вектор смещения; $A(\mathbf{r}' - \mathbf{v}t)$ — амплитудное распределение, движущееся в кристалле со скоростью $\mathbf{v}$, закон изменения которого определяется внешним управлением; $\mathbf{u}^0$ — вектор поляризации, характеризующий направление локальных смещений частиц среды; $\mathbf{q}$ — волновой вектор упругой волны; $\Omega = 2\pi f$ — круговая частота.

Эта волна вызывает деформацию, которая в свою очередь приводит к изменению компонент тензора диэлектрической непроницаемости среды на величину

$$\Delta\eta_{fp} = p_{ijfp}\xi_{fp} = \xi p_{ijfp}\xi^0_{fp}, \quad (4)$$

где

$$\xi = A(\mathbf{r}' - \mathbf{v}t)e^{i(\mathbf{qr}-\Omega t)}, \quad (5)$$

$$\xi^0_{fp} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u^0_f}{\partial x_p} + \frac{\partial u^0_p}{\partial x_f}\right) = iq_f u^0_p, \quad (6)$$

p_{ijfp} и ξ^0_{fp} — компоненты тензоров фотоупругости $\hat{p}$ и деформации $\hat{\xi}$ в выбранной системе координат.

Пренебрегая акустической нелинейностью взаимодействия, при условиях $\varepsilon_{ik}\Delta\eta_{kj} << 1$ и $\gamma_{ijl} << 1$, для возмущенного тензора диэлектрической проницаемости среды $\hat{\varepsilon}'$ можно записать:

$$\hat{\varepsilon}' = \hat{\varepsilon} - \hat{\varepsilon}\cdot\hat{\Delta\eta}\cdot\hat{\varepsilon} \cong \hat{\varepsilon} - \hat{\varepsilon}^0\cdot\hat{\Delta\eta}\cdot\hat{\varepsilon}^0, \quad (7)$$

где $\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}^0 + i\hat{\gamma}\mathbf{k}$, $\hat{\varepsilon}$ — невозмущенный тензор диэлектрической проницаемости среды в отсутствие гиротропии.

Запишем уравнения Максвелла для электромагнитного поля в анизотропной немагнитной и непроводящей среде, обладающей гиротропией, в присутствии возмущения $\hat{\Delta\eta}$ при следующих допущениях: $\Omega << \omega$, $\varepsilon_{ik}\Delta\eta_{kj} << 1$, $\gamma_{ijl} << 1$. Тогда имеем следующие уравнения:

$$\begin{cases} \operatorname{rot}\mathbf{E} = \dfrac{i\omega}{c}\mathbf{H}; \\ \operatorname{rot}\mathbf{H} = -\dfrac{i\omega}{c}\hat{\varepsilon}\cdot\mathbf{E} + \dfrac{i\omega}{c}\hat{\varepsilon}^0\cdot\hat{\Delta\eta}\cdot\hat{\varepsilon}^0\,\mathbf{E}. \end{cases} \quad (8)$$

Введем в рассмотрение эквивалентные токи:

$$\frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{\text{экв}} = \begin{cases} \dfrac{i\omega}{c}\hat{\varepsilon}^0\cdot\hat{\Delta\eta}\cdot\hat{\varepsilon}^0\cdot\mathrm{E}, & |z| \le \dfrac{L}{2}; \\ 0, & |z| > \dfrac{L}{2}, \end{cases} \quad (9)$$

и сведем решение уравнений Максвелла к решению интегрального уравнения вида

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_i + Q(\mathbf{j}_{\text{экв}}) = \mathbf{E}_i + Q\left(\frac{i\omega}{c}\hat{\varepsilon}^0\cdot\hat{\Delta\eta}\cdot\hat{\varepsilon}^0\cdot\mathbf{E}\right), \quad (10)$$

где $\mathbf{E}_i$ — падающая световая волна, i = 1, 2; Q — некоторый интегральный оператор.

Вывод интегрального уравнения для дифрагированного поля основан на применении леммы Лоренца к объемам V_1 и V_2 (см. рис. 1). Для гиротропной среды эту лемму можно записать в следующей форме:

$$\oint_S \left(\mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_2^* + \mathbf{E}_2^* \times \mathbf{H}_1\right)\mathbf{n}\,dS = -\frac{4\pi}{c}\int_V \left(\mathbf{j}_2^*\mathbf{E}_1 + \mathbf{j}_1\mathbf{E}_2^*\right)dV, \quad (11)$$

где V — объем, занятый эквивалентными токами; S — поверхность, ограничивающая этот

объем; $\mathbf{n}$ — внешняя нормаль к поверхности S; $\mathbf{E}_{1,2}, \mathbf{H}_{1,2}$ — поля, удовлетворяющие уравнениям Максвелла со сторонними токами $\mathbf{j}_{1,2}$; $(*)$ — знак комплексного сопряжения.

Для нахождения интегрального оператора Q воспользуемся, аналогично работам [8, 9], методикой решения задачи о возбуждении волновода слоем эквивалентных токов $\mathbf{j}_{\text{экв}}$ [14]. Найдем поле в некотором сечении $S = S_0$ при $z = z_0$ объема V, занятого источниками поля $\mathbf{j}_{\text{экв}}$. Выделим два сечения вблизи $z = z_0$: $z_0 - \Delta z$ и $z_0 + \Delta z$, где Δz — малая величина, и удалим из этого слоя источники поля. Весь объем V при этом разбился на два объема: V_1 и V_2, ограниченных плоскостями $S_1\left(z = -\frac{L}{2}\right)$ и $S\left(z = z_0 - \Delta z\right)$, $S\left(z = z_0 + \Delta z\right)$ и $S_2\left(z = \frac{L}{2}\right)$, а также $S_{\text{бок}}$. Устремляя S в бесконечность, положим, что поля на $S_{\text{бок}} = 0$. Согласно лемме Лоренца (11), примененной к полям в каждом из этих объемов в отсутствие источников поля, имеем:

$$\lim_{S\to\infty} \int_{\Sigma} \left(\mathbf{E}_{k_d} \times \mathbf{H}^*_{l_d} + \mathbf{E}^*_{l_d} \times \mathbf{H}_{k_d} \right) \mathbf{n} dS, \qquad (12)$$

где $\Sigma = S_1 + S_2 + 2S$ — суммарная боковая поверхность.

Поскольку интегралы по поверхностям S_1 и S_2 есть величины фиксированные, а выбор S по оси z произволен, то

$$\lim_{S\to\infty} \int_{S} \left(\mathbf{E}_{k_d} \times \mathbf{H}^*_{l_d} + \mathbf{E}^*_{l_d} \times \mathbf{H}_{k_d} \right) \mathbf{n} dS = $$

$$= J(z) = J(0) e^{i(\mathbf{k}_d \mathbf{r} - \mathbf{l}_d \mathbf{r})} \qquad (13)$$

не зависит от z. Отсюда следует, что $k_{d_z} = l_{d_z}$. Будем также полагать, что $k_{d_z} = l_{d_z} = 0$ (плоскость рассеяния соответствует плоскости $X0Z$). Использования уравнения Максвелла для полей типа (2) позволяет записать:

$$\mathbf{H}^*_{l_d} = \frac{c}{\omega}\left(\mathbf{l}_d \times \mathbf{E}^*_{l_d} \right); \ \mathbf{H}_{k_d} = \frac{c}{\omega}\left(\mathbf{k}_d \times \mathbf{E}_{k_d} \right); \qquad (14)$$

тогда с учетом того, что $\mathbf{k} = \mathbf{k}^*$, получим соотношение

$$\frac{c}{4\pi} \lim_{S\to\infty} \int_{S} \left(\mathbf{E}_{k_d} \times \mathbf{H}^*_{l_d} + \mathbf{E}^*_{l_d} \times \mathbf{H}_{k_d} \right) \mathbf{n} dS =$$

$$= \frac{c}{4\pi} \left[\left(\mathbf{U}^*_{l_d} \cdot \mathbf{U}_{k_d} \right) \left(\mathbf{l}_d \cdot \mathbf{n} + \mathbf{k}_d \cdot \mathbf{n} \right) - \right.$$

$$\left. - \left(\mathbf{U}_{k_d} \cdot \mathbf{l}_d \right) \left(\mathbf{U}^*_{l_d} \cdot \mathbf{n} \right) - \left(\mathbf{U}^*_{l_d} \cdot \mathbf{k}_d \right) \left(\mathbf{U}_{k_d} \cdot \mathbf{n} \right) \right] \times$$

$$\times \frac{c}{\omega} \lim_{S\to\infty} \int_{S} e^{i(\mathbf{k}_d \mathbf{r} - \mathbf{l}_d \mathbf{r})} dS =$$

$$= N_{k_d, l_d} \cdot \delta\left(k_{d_x} - l_{d_x} \right) Y_0, \qquad (15)$$

где

$$\delta\left(k_{d_x} - l_{d_x} \right) = \frac{1}{2\pi} \lim_{x_0\to\infty} \int_{-x_0}^{x_0} e^{i\left(k_{d_x} - l_{d_x} \right) x} dx \qquad (16)$$

дельта-функция, Y_0 — размер области, занятой источниками поля по оси y.

Суммарное поле $\mathbf{E}$ в сечении $S\left(z = z_0\right)$ равно сумме полей:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_i + \mathbf{E}' + \mathbf{E}'' + \mathbf{E}''', \qquad (17)$$

где $\mathbf{E}_i$ — поле падающей световой волны; $\mathbf{E}'$, $\mathbf{E}''$ — поля, рассеянные источниками вперед в объеме V_1 и назад в объеме V_2, соответственно; $\mathbf{E}''' = \frac{4\pi}{i\omega\hat{\varepsilon}}\left(\mathbf{j}_{\text{экв}} \cdot \mathbf{z}^0 \right) \mathbf{z}^0$ — поле, компенсирующее возможные разрывы продольных составляющих электрического поля, вызванные введением сечения $z = z_0$ [14].

Для нахождения полей $\mathbf{E}'$ и $\mathbf{E}''$ применим лемму Лоренца в форме (11) к полям $\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1$, где

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{d=1}^{2} \left(\int_{k_{d_z} < 0} C_{k_d} \mathbf{E}_{k_d} dk_{d_x} + \int_{k_{d_z} > 0} C_{k_d} \mathbf{E}_{k_d} dk_{d_x} \right), \qquad (18)$$

излучаемым источниками в объемах V_1 и V_2 и являющихся суперпозицией плоских волн. Первый интеграл в выражении (18) соответствует волнам, распространяющимся справа налево, а второй — слева направо через поверхность S_0. В качестве комплексно-сопряженных полей $\mathbf{E}^*_2$ и $\mathbf{H}^*_2$, входящих в лемму, выберем некоторые поля $\mathbf{E}^*_{k_d} = \mathbf{U}^*_{k_d} e^{-i(\mathbf{k}_d \mathbf{r} - \omega t)}$, $\mathbf{H}^*_{k_d}$, удовлетворяющие уравнению Максвелла без сторонних токов. Учиты-

вая, что плоские волны расходятся от области, занятой источниками поля, получим выражения для коэффициентов разложения C_{k_d}, входящих в (18). С учетом выражения (15) имеем:

$$\begin{cases} C_{k_d} = \dfrac{1}{Y_0 N_{k_d}} \int\limits_{V_1} \mathbf{j}_{\text{экв}} \cdot \mathbf{E}^*_{k_d} dV, & k_{d_z} > 0; \\ C_{k_d} = \dfrac{1}{Y_0 N_{k_d}} \int\limits_{V_2} \mathbf{j}_{\text{экв}} \cdot \mathbf{E}^*_{k_d} dV, & k_{d_z} < 0, \end{cases} \tag{19}$$

где

$$N_{k_d} = N_{k_d,k_d} = \frac{c}{2} n_d \left[2 \left| U_{k_d} \right|^2 (\mathbf{m}_d \cdot \mathbf{n}) - \right.$$

$$\left. - (\mathbf{m}_d \cdot \mathbf{U}_{k_d}) \cdot (\mathbf{U}^*_{k_d} \cdot \mathbf{n}) - (\mathbf{m}_d \cdot \mathbf{U}^*_{k_d}) \cdot (\mathbf{U}_{k_d} \cdot \mathbf{n}) \right] \tag{20}$$

($\mathbf{m}_d$ — единичный вектор волновой нормали: $\mathbf{k}_d = k_d \mathbf{m}_d = \dfrac{2\pi}{\lambda_0} n_d \mathbf{m}_d$).

При рассмотрении дифракции света на звуке источники поля сами вызываются падающей световой волной (см. формулу (9)), поэтому основной вклад в поле рассеяния вносит волна, рассеянная вперед; а вклад поля, рассеянного назад, пренебрежимо мал вследствие соответствующей фазировки эквивалентных токов, и им можно пренебречь. В дальнейшем также будем пренебрегать полем $\mathbf{E}'''$ по сравнению с $\mathbf{E}'$. Таким образом, искомое поле в некотором сечении $S(z = z_0)$ описывается интегральным уравнением

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_i + \sum_{d=1}^{2} \int\limits_{k_{d_z} > 0} \left(-\frac{\mathbf{E}_{k_d}}{N_{k_d}} \right) \times$$

$$\times \left(\lim_{x_0 \to \infty} \int\limits_{-\frac{L}{2}}^{z_0} \int\limits_{-x_0}^{x_0} \mathbf{j}_{\text{экв}} \mathbf{E}^*_{k_d} \, dx dz \right) dk_{d_x}, \tag{21}$$

где интегрирование осуществляется по всем проекциям k_{d_x} волновых векторов $\mathbf{k}_d$, для которых $k_{d_x} > 0$.

Подставляя формулу (9) в уравнение (21) и используя выражение (2), получим окончательный вид интегрального уравнения для дифрагированного поля:

$$\mathbf{E}_i - \sum_{d=1}^{2} \frac{i\omega}{4\pi} \int\limits_{k_{d_z} > 0} \frac{\mathbf{U}_{k_d} e^{i(\mathbf{k}_d \mathbf{r} - \omega t)}}{N_{k_d}} \times$$

$$\times \left[\lim_{x_0 \to \infty} \int\limits_{-\frac{L}{2}}^{z_0} \int\limits_{-x_0}^{x_0} \left(\hat{\varepsilon}^0 \hat{p} \hat{\xi} \hat{\varepsilon}^0 \mathbf{E} \right) \times \right.$$

$$\left. \times \mathbf{U}^*_{k_d} e^{-i(\mathbf{k}_d \mathbf{r} - \omega \cdot t)} dx dz \right] dk_{d_x}. \tag{22}$$

Конкретный вид интегрального уравнения (22) зависит от выбора геометрии акустооптического взаимодействия, т. е. от матрицы преобразования α_{ij}, от типов взаимодействующих световой и звуковой волн.

Решение интегрального уравнения

Будем искать решение интегрального уравнения (22) методом последовательных приближений:

$$\mathbf{E} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{E}^{(n)}. \tag{23}$$

Полагаем, что в плоскости рассеяния падающая волна имеет вид

$$\mathbf{E}^{(0)} = \mathbf{E}_i = \mathbf{U}_{d_0} e^{i(\mathbf{k}_{d_0} \mathbf{r} - \omega t)} =$$

$$= \mathbf{U}_{d_0} e^{i\left[\frac{2\pi}{\lambda_0} n^0_d (z \cos\theta_0 - x \sin\theta_0) - \omega t \right]}, \; d_0 = 1,2. \tag{24}$$

Эту волну примем за нулевое приближение. Для n-го приближения после соответствующих преобразований [15] можно найти:

$$\mathbf{E}^{(n)} = \sum_{d_0} \sum_{d_1} \cdots \sum_{d_n} \left(-\frac{i}{2} \right)^n \times$$

$$\times \int\limits_{k_{d_n}} \mathbf{U}_{k_{d_n}} e^{i(\mathbf{k}_{d_n} \mathbf{r} - \omega_n t)} \int\limits_{k_{d_{n-1}}} \cdots \int\limits_{k_{d_1}} \prod_{m=0}^{n-1} \chi^{(m)}_{d_{m+1} d_m} \times$$

$$\times e^{-i\left(\Delta k^{m+1}_{d_x} \mp q_x \right) \nu t} F\left(\Delta k^{m+1}_{d_x} \mp q_x \right) \times$$

$$\times \int\limits_{-1}^{z'_{m+1}} e^{-i\frac{L}{2}\left(\Delta k^{m+1}_{d_z} \mp q_z \right) \cdot z'_m} dz_m dk_{d_{m+1} x}. \tag{25}$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\chi^{(m)}_{d_{m+1}d_m} = \frac{U^*_{k_{d_{m+1}}} \varepsilon_{k_{d_{m+1}} i} p_{ijfp} \xi^0_{fp} \varepsilon_{jk_{d_m}} U_{k_{d_m}} \omega L}{4\pi N_{k_{d_{m+1}}}}; \quad (26)$$

$\mathbf{U}^*_{k_{d_{m+1}}}$, $\mathbf{U}_{k_{d_m}}$ — комплексные амплитуды электрического поля для волн с волновыми векторами $\mathbf{k}_{d_{m+1}}$ и $\mathbf{k}_{d_m}$; ε_{mn} — компоненты тензора диэлектрической проницаемости;

$$F\left(\Delta k^{m+1}_{d_x} \mp q_x\right) =$$

$$= \lim_{x_{m+1}\to\infty} \int_{-x_{m+1}}^{x_{m+1}} A\left(\mathbf{r}'_m\right) e^{-i\left(\Delta k^{m+1}_{d_x} \mp q_x\right) x_m} \quad (27)$$

— мгновенный Фурье-спектр ультразвукового возмущения $A\left(\mathbf{r}'_m\right)$;

$$\Delta k^{m+1}_{d_x} = \frac{2\pi}{\lambda_0}\left(n^{m+1}_d \cdot \sin\theta_{m+1} - n^m_d \cdot \sin\theta_m\right); \quad (28)$$

$$\Delta k^{m+1}_{d_z} = \frac{2\pi}{\lambda_0}\left(n^{m+1}_d \cdot \cos\theta_{m+1} - n^m_d \cdot \cos\theta_m\right); \quad (29)$$

q_x, q_z — проекции волнового вектора упругой волны на оси X и Z; z'_m — некоторая текущая координата, удовлетворяющая условию $-1 \le z'_m \le 1$.

Выбор знака (плюс) или (минус) в выражениях (25) и (27) на определенном этапе процесса рассеяния связан с выполнением закона сохранения импульса для падающей и дифрагированной световых волн. Этот выбор обусловлен тем, что реальные смещения в локальных областях кристалла описываются действительной частью выражения (3).

Исходя из сути данного метода, дифракцию света мы можем представить как результат последовательных актов рассеяния в различные дифракционные порядки, происходящие в соответствии с типами световой и звуковой волн. Суммирование в выражении (25) производится по всем возможным типам световых мод с индексами d_n, возникающих на каждом этапе рассеяния.

Для каждого m величина $\chi^{(m)}_{d_{m+1}d_m}$ представляет собой матрицу относительных коэффициентов рассеяния

$$\begin{pmatrix} \chi^{(m)}_{11} & \chi^{(m)}_{12} \\ \chi^{(m)}_{21} & \chi^{(m)}_{22} \end{pmatrix}, \quad (30)$$

элементы которой характеризуют свой тип акустооптической дифракции на частоте ω_n, определяемой соотношением

$$\omega_n = \omega + \kappa\Omega, \quad (31)$$

где

$$\kappa = \begin{cases} \pm 1, \pm 3, \ldots, \pm(2m+1) & \text{при } n = 2m+1; \\ 0, \pm 2, \ldots, \pm 2m & \text{при } n = 2m; \end{cases}$$

$$m = 0, 1, 2, \ldots.$$

Из выражения (25) следует, что наибольший вклад в дифрагированное поле вносят спектральные составляющие ультразвукового возмущения, для которых выполняются условия синхронизма:

$$\begin{cases} \Delta k^{m+1}_{d_x} \mp q_x = 0; \\ \Delta k^{m+1}_{d_z} \mp q_z = 0. \end{cases} \quad (32)$$

С учетом условий (32), решению (23), (25) может быть поставлена в соответствие некоторая диаграмма рассеяния, причем $\prod_{m=0}^{n-1} \chi^{(m)}_{d_{m+1}d_m}$ определяет ветвь этой диаграммы, вносящей свой вклад в рассматриваемый дифракционный порядок. Оценка членов ряда (25) для каждой из ветвей диаграммы рассеяния показывает, что

$$\left|\mathbf{E}^{(n)}_m\right| \le M_m \frac{\left(\chi_m\right)^n}{n!},$$

где M_m, χ_m — некоторые постоянные величины.

Это обеспечивает сходимость ряда (23). Таким образом, поле в κ-ом дифракционном порядке можно представить как сумму полей, учитывающих вклады от каждого следующего порядка взаимодействия, причем как амплитуда, так и поляризация этих добавок будут определяться коэффициентами $\chi^{(m)}_{d_{m+1}d_m}$, зависящими от выбора геометрии рассеяния и типа акустической волны.

Анизотропная дифракция света в кристалле TeO_2 при постоянной амплитуде ультразвукового возмущения

Выберем систему координат X, Y, Z рассматриваемой задачи таким образом, что она связана с кристаллофизической системой координат кристалла матрицей преобразования:

$$\alpha_{ij} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\cos\alpha\cdot\sin\varphi & \cos\alpha\cdot\cos\varphi & -\sin\alpha \\ -\sin\alpha\cdot\sin\varphi & \sin\alpha\cdot\cos\varphi & \cos\alpha \end{pmatrix}, \quad (33)$$

где $\varphi = 45^\circ$, α — малый угол, характеризующий отклонение волнового вектора световой волны от плоскости ($\bar{1}10$) кристалла. При такой ориентации плоскости рассеяния (рис. 2) ось X соответствует направлению [110] кристалла, а ось Z составляет угол α с направлением [001].

Будем считать, что вдоль направления [110] кристалла распространяется ультразвуковая волна с волновым вектором **q**, вектор поляризации которой направлен по оси [$\bar{1}$10]; этот случай соответствует распространению медленной сдвиговой волны в кристалле диоксида теллура. Выбор данной геометрии рассеяния связан с реальной задачей эффективной широкополосной дифракции света на звуке в акустооптическом модуляторе вблизи оптической оси этого кристалла.

Ограничиваясь случаем постоянной амплитуды ультразвукового возмущения $A(x) = A_0$, из выражения (27) найдем:

$$F\left(\Delta k_{d_x}^{m+1} \mp q_x\right) = F\left(k_{d_x}^{m+1} - k_{d_x}^{m} \mp q_x\right) =$$

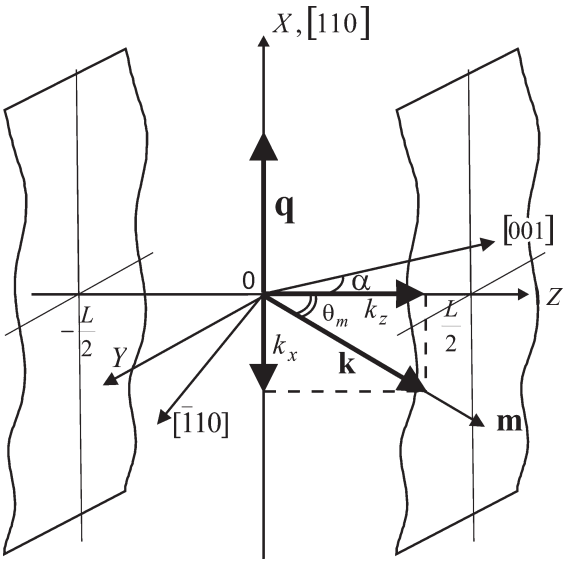


Рис. 2. Геометрия широкополосной дифракции света на медленной сдвиговой волне в кристалле TeO_2

$$= 2\pi A_0 \delta\left[\frac{2\pi}{\lambda_0}\left(\left(\pm\frac{\lambda_0}{\Lambda} - n_d^{m+1}\cdot\sin\theta_{m+1} + \right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left. + n_d^{m}\cdot\sin\theta_m\right)\right)\right], \quad (34)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака (16), $d = 1, 2$.

За положительное значение углов θ_m будем принимать углы, отсчитываемые от оси Z по часовой стрелке в плоскости $X0Z$ (см. рис. 2). В реальном устройстве всегда присутствует небольшая составляющая $q_z = q\sin\beta$, связанная с угловой расходимостью упругой волны, которая будет определять ширину полосы акустооптического взаимодействия и присутствие которой будет учитываться в дальнейших вычислениях.

Решая систему материальных уравнений (1) с учетом малости углов θ_m и α, мы можем получить выражения для показателей преломления двух эллиптически поляризованных волн, распространяющихся вдоль направления **m** вблизи оптической оси гиротропного кристалла:

$$n_{1,2}^{(m)} =$$

$$= n_o\left[1 \mp \sqrt{a^2 + \tilde{c}^2\left(\theta_m^2 + \alpha^2\right)^2} + \tilde{c}\left(\theta_m^2 + \alpha^2\right)\right], \quad (35)$$

где n_o, n_e — показатели преломления для обыкновенной и необыкновенной световых волн;

$$a = \frac{G_{33} n_o^2}{2}, \quad \tilde{c} = \frac{\left(n_e^2 - n_o^2\right)}{4 n_e^2} \quad (36)$$

(G_{33} — составляющая псевдотензора гирации в направлении [001] кристалла TeO_2).

Так как $|G| \cong 10^{-4} \div 10^{-5}$, то при $\alpha, \theta \cong 10^{-2}$ не учитываем изменения G_{33} при малых поворотах направления распространения световой волны относительно оптической оси кристалла.

Из уравнений (1) с учетом матрицы преобразования (33) найдем выражения для проекций векторов электрического поля на оси выбранной системы координат X, Y, Z. Для комплексных амплитуд электрического поля световых волн, соответствующих показателям преломления $n_d^{(m)}$, имеем:

$$\mathbf{U}_{k_d}(\theta_m, \alpha) = U_{x_d}^{(m)}\mathbf{x}^0 + U_{y_d}^{(m)}\mathbf{y}^0 +$$

$$+\left[\frac{n_o^2}{n_e^2}\theta_m U_{x_d}^{(m)}+\left(1-\frac{n_o^2}{n_e^2}\right)\alpha U_{y_d}^{(m)}\right]z^0, \qquad (37)$$

где $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{y}^0$, $\mathbf{z}^0$ — орты системы координат X, Y, Z.

При $d = 1$ быстрая световая волна с показателем преломления n_1 выражается как

$$U_{x_1}^{(m)}=\frac{D^{(1)}}{n_o^2\sqrt{2}}e^{i\left[\operatorname{arctg}(\rho_m\operatorname{tg}\varphi_m)\right]}\times$$

$$\times\sqrt{(1+\rho_m^2)+(1-\rho_m^2)\cos 2\varphi_m}, \qquad (38)$$

$$U_{y_1}^{(m)}=\frac{D^{(1)}}{n_o^2\sqrt{2}}e^{i\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{\operatorname{tg}\varphi_m}{\rho_m}\right)-\frac{\pi}{2}\right]}\times$$

$$\times\sqrt{(1+\rho_m^2)-(1-\rho_m^2)\cos 2\varphi_m}; \qquad (39)$$

при $d = 2$ медленная световая волна с показателем преломления n_2 следует выражению

$$U_{x_2}^{(m)}=\frac{D^{(2)}}{n_o^2\sqrt{2}}e^{-i\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{\operatorname{tg}\varphi_m}{\rho_m}\right)+\frac{\pi}{2}\right]}\times$$

$$\times\sqrt{(1+\rho_m^2)-(1-\rho_m^2)\cos 2\varphi_m}, \qquad (40)$$

$$U_{y_2}^{(m)}=\frac{D^{(2)}}{n_o^2\sqrt{2}}e^{-i\left[\operatorname{arctg}(\rho_m\operatorname{tg}\varphi_m)\right]}\times$$

$$\times\sqrt{(1+\rho_m^2)+(1-\rho_m^2)\cos 2\varphi_m}, \qquad (41)$$

где $D^{(1)}$, $D^{(2)}$ — амплитуды векторов электрической индукции для быстрой и медленной световых волн в отсутствие гиротропии;

$$\rho_m=\left[1+b^2\left(\theta_m^2+\alpha^2\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}-b\left(\theta_m^2+\alpha^2\right) \qquad (42)$$

эллиптичности световых волн;

$$b=\frac{\left(n_e^2-n_o^2\right)}{2G_{33}n_o^2n_e^2}. \qquad (43)$$

Угол φ_m характеризует наклон к оси X большой оси эллипса, по которому движутся концы векторов индукции эллиптически поляризованной быстрой световой волны, распространяющейся вдоль направления $\mathbf{m}$; этот угол определяется следующим соотношением:

$$\varphi_m=\begin{cases}\dfrac{\pi}{4} & \text{при } \alpha=0,\ \theta_m=0;\\ -\dfrac{\pi}{4} & \text{при } \alpha=0,\ \theta_m<0;\\ \dfrac{\pi}{2} & \text{при } \alpha=0,\ \theta_m>0;\\ \operatorname{arctg}\dfrac{\theta_m}{\alpha} & \text{при } \alpha\neq 0.\end{cases} \qquad (44)$$

На рис. 3 представлен график зависимости $\rho(\theta,\alpha)$ для световых волн, распространяющихся вдоль направления $\mathbf{m}$ вблизи оптической оси [001] кристалла TeO_2. Зависимость построена при следующих условиях: λ_0 = 510,6 нм; n_o = 2,314; n_e = 2,476; G_{33} = 3,745·10^{-5}. Видно, что при углах $\theta,\alpha \geq 6^\circ$ эллиптичностью световых волн практически можно пренебречь.

Производим перемножение тензоров в выражении (26) с учетом матрицы преобразования (33) и типа ультразвуковой волны, а, также, учитывая выражения для комплексных амплитуд электрического поля (38)–(41), находим коэффициенты рассеяния K_{12}, K_{21}, характеризующие анизотропную дифракцию света с изменением показателя преломления и поляризации. С учетом выбранной геометрии рассеяния последующие выражения получены в приближении $|G_{33}| \ll \theta_m$, $\alpha \ll 1$.

Таким образом,

$$\chi_{12}^{(m)}(\theta_{m+1},\theta_m)=\frac{n_o^3L(p_{11}-p_{12})\xi_{12}^0}{4\lambda_0(1+\rho_{m+1}^2)}\times$$

$$\times(U_{1_1}^*U_{2_2}+U_{2_1}^*U_{1_2})=\chi_0K_{12}(\theta_{m+1},\theta_m), \qquad (45)$$

где

$$\chi_0=\frac{\pi A_0\xi^0n_o^3L(p_{11}-p_{12})}{2\lambda_0}\frac{D^{(2)}}{D^{(1)}} \qquad (46)$$

— индекс модуляции (ξ^0 — нормированная деформация среды; в дальнейшем будем считать, если не оговорено особо, что $D^{(1)} = D^{(2)}$).

Далее,

$$K_{12}(\theta_{m+1},\theta_m)=\frac{1}{\sqrt{2}(1+\rho_{m+1}^2)}\times$$

$$\times e^{-i\operatorname{arctg}\left[\frac{(\rho_{m+1}+\rho_m)}{1+\rho_{m+1}\rho_m}\operatorname{tg}(\varphi_m+\varphi_{m+1})\right]}\times$$

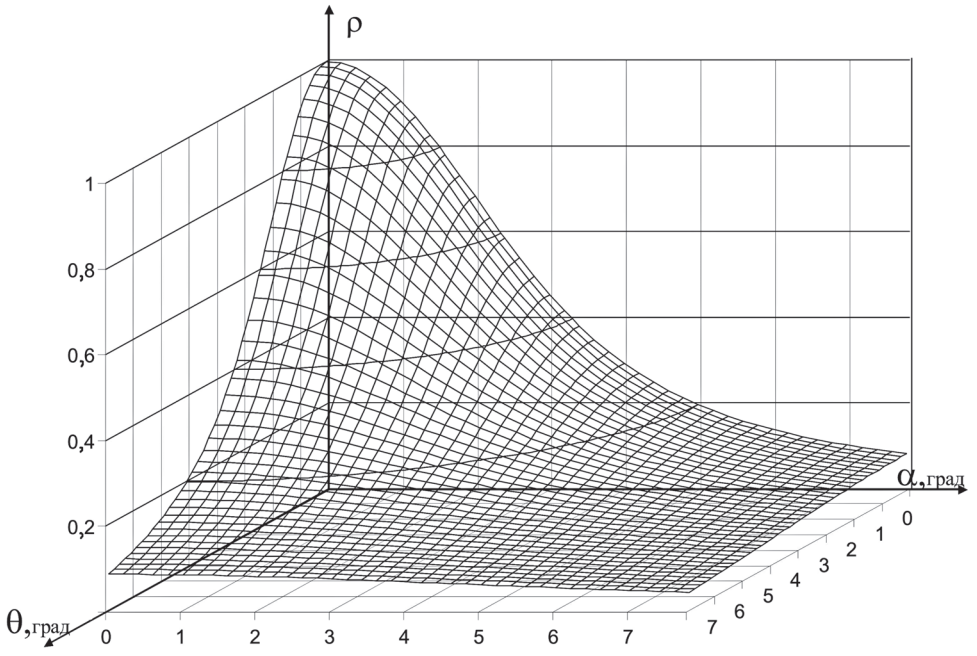


Рис. 3. Зависимость эллиптичности световой волны от направления распространения света вблизи оптической оси кристалла TeO_2

$$\times\left\{\left(\rho_{m+1}+\rho_m\right)^2+(1+\rho_{m+1}\rho_m)^2+\right.$$

$$\left.+(1-\rho_{m+1}^2)(1-\rho_m^2)\cos 2(\varphi_m+\varphi_{m+1})\right\}^{1/2}. \quad (47)$$

В этом выражении и далее отсчет углов в круглых скобках производится справа налево. Таким образом, в выражении (47) угол θ_m соответствует световой волне до рассеяния, а θ_{m+1} — после рассеяния.

Для обратного рассеяния имеем:

$$K_{21}(\theta_{m+1},\theta_m)=K_{12}^*(\theta_{m+1},\theta_m)\,. \quad (48)$$

Будем полагать, что звуковая волна возбуждается пьезопреобразователем шириной L с равномерными амплитудными и фазовыми распределениями по апертуре поля, возбуждающего звук; тогда выполнение законов сохранения энергии и импульса при дифракции света на звуке возможно в пределах углового спектра излучателя упругих волн, который определяется выражением

$$Y(\beta)=\frac{\sin\left(\dfrac{\pi fL}{2v}\beta\right)}{\dfrac{\pi fL}{2v}\beta}, \quad (49)$$

где β — угол отклонения волнового вектора упругой волны от направления X.

В этом случае можно написать:

$$q_z-\Delta k_{dz}^{(m+1)}=\frac{2\pi}{\lambda_0}\eta_{d_{m+1},d_m}^{(m+1)}(\alpha,\theta_{m+1},\theta_m)=$$

$$=\frac{2\pi}{\lambda_0}\left(\frac{\lambda_0 f}{v}\sin\beta_{m+1,m}-n_d^{(m+1)}\cos\theta_{m+1}+\right.$$

$$\left.+n_d^{(m)}\cos\theta_m\right). \quad (50)$$

Выражение (34) преобразуется к виду

$$F\left(\Delta k_{d_x}^{m+1}\mp q_x\right)=2\pi A_0 Y\left(\beta_{m+1,m}\right)\times$$

$$\times\delta\left[\frac{2\pi}{\lambda_0}\cdot\left(\pm\frac{\lambda_0 f}{v}\cos\beta_{m+1,m}-\right.\right.$$

$$\left.\left.-n_d^{(m+1)}\sin\theta_{m+1}+n_d^{(m)}\sin\theta_m\right)\right]. \quad (51)$$

Углы θ_m, θ_{m+1} определяются из условий сохранения импульса для падающей и дифрагированной световых волн при анизотропной дифракции света на звуке:

$$\begin{cases} n_d^{(m+1)}\cos\theta_{m+1} - n_d^{(m)}\cos\theta_m = \dfrac{\lambda_0 f}{v}\sin\beta_{m+1,m}; \\ n_d^{(m)}\sin\theta_m - n_d^{(m+1)}\sin\theta_{m+1} = \dfrac{\lambda_0 f}{v}\cos\beta_{m+1,m}, \end{cases} \quad (52)$$

где $n_d^{(m)}$, $n_d^{(m+1)}$ определяются из выражения (35), $d = 1, 2$.

При анизотропной дифракции в кристалле TeO_2 в дальнейшем будем учитывать только акты рассеяния с функциями $\eta_{12}(\alpha, \theta_{m+1}, \theta_m)$ и $\eta_{21}(\alpha, \theta_{m+1}, \theta_m)$, при которых осуществляются переходы с одной поверхности показателей преломления на другую.

Производя разложение функций η_{12}, η_{21}, $n_2^{(0)}$, $n_1^{(1)}$ в ряд в окрестности точки $\alpha = 0$, найдем для малых углов α, θ выражения

$$\eta_{12}(\alpha, \theta_{m+1}, \theta_m) \cong \eta_{12}(0, \theta_{m+1}, \theta_m)\big|_{\alpha=0} +$$
$$+ n_o\tilde{c}\left[\gamma(\theta_{m+1}) + \gamma(\theta_m)\right]\big|_{\alpha=0}\alpha^2;$$
$$\eta_{21}(\alpha, \theta_{m+1}, \theta_m) \cong \eta_{12}(0, \theta_{m+1}, \theta_m)\big|_{\alpha=0} -$$
$$- n_o\tilde{c}\left[\gamma(\theta_{m+1}) + \gamma(\theta_m)\right]\big|_{\alpha=0}\alpha^2, \quad (53)$$

где

$$\gamma(\theta) = b\theta^2\left(1 + b^2\theta^4\right)^{-1/2}. \quad (54)$$

Выберем в качестве падающей медленную световую волну с показателем преломления $n_2^{(0)}$. Этот случай соответствует широкополосной акустооптической дифракции в кристалле парателлурита. Под медленной световой волной понимается волна, имеющая больший показатель преломления, т. е. положим

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{U}_{k_2}(\theta_0)\, e^{i(\mathbf{k}_0\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (55)$$

Тогда для поля в (+1)-м порядке на выходной апертуре АОМ при длине взаимодействия света со звуком $z = L$ (граница ультразвукового столба) и в приближении первого порядка взаимодействия можно написать:

$$\mathbf{E}_{+1}^{(1)} = -\frac{i}{2}\int\limits_{k_{1z}>0} \chi_0\mathbf{U}_{k_1}(\theta_1)\, Y(\beta_{1,0})\times$$
$$\times K_{12}(\theta_1, \theta_0)\, e^{i\left[\mathbf{k}_1\mathbf{r} - (\omega+\Omega)t\right]}\delta\left(q_x - \Delta k_{1x}^{(1)}\right)\times$$
$$\times e^{-i\left(\Delta k_{1x}^{(1)} - q_x\right)vt}\int\limits_{-1}^{z_1'} e^{-i\frac{L}{2}\left(q_z - \Delta k_{1z}^{(1)}\right)z_0'}\, dz_0'\, dk_{1x} =$$
$$= -\frac{i}{2}\chi_0\mathbf{U}_{k_1}(\theta_1)\, Y(\beta_{1,0})\, K_{12}(\theta_1, \theta_0)\times$$
$$\times e^{i\left[\mathbf{k}_1'\mathbf{r} - (\omega+\Omega)t\right]}\int\limits_{-1}^{z_1'} e^{i\frac{\pi L}{\lambda_0}\eta_{12}(\alpha, \theta_1, \theta_0)z_0'}\, dz_0', \quad (56)$$

где $-1 \le z_1' \le 1$;

$$\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r} = \mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r} + \Delta k_{1z}z + \Delta k_{1x}x;$$
$$\mathbf{k}_1'\cdot\mathbf{r} = \mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r} + \Delta k_{1z}z + \frac{2\pi f}{v}x\cos\beta \cong$$
$$\cong \mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r} + \Delta k_{1z}z + \frac{2\pi f}{v}x; \quad (57)$$
$$\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r} = \frac{2\pi}{\lambda_0}n_2^{(0)}\left(z\cos\theta_0 - x\sin\theta_0\right) \cong$$
$$\cong \left(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}\right)\big|_{\alpha=0} + \frac{2\pi}{\lambda_0}n_o\tilde{c}\left[1 + \gamma(\theta_0)\right]\alpha^2 z. \quad (58)$$

Зададим начальные условия дифракционной задачи таким образом, чтобы для выбранной несущей частоты ультразвука $f = f'$, $\theta_0 = \theta_0'$, $\theta_1 = \theta_1'$, где θ_0' и θ_1' определяются из уравнений (52) при $\alpha = 0$, $\beta_{1,0} = 0$. При этом должно выполняться соотношение $\eta_{12}(0, \theta_1', \theta_0') = 0$.

Тогда в приближении первого порядка взаимодействия поле в (+1)-м дифракционном порядке на границе ультразвукового столба следует выражению

$$\mathbf{E}_{+1}^{(1)} = -i\chi_0\mathbf{U}_{k_1}(\alpha, \theta_1')K_{12}(\theta_1', \theta_0')e^{i\left[\mathbf{k}_1'\mathbf{r} - (\omega+\Omega)t\right]}\times$$
$$\times \operatorname{sinc}\left\{\frac{L}{\lambda_0}n_o\tilde{c}\left[\gamma(\theta_1') + \gamma(\theta_0')\right]\alpha^2\right\}, \quad (59)$$

где $\operatorname{sinc}(x) = \dfrac{\sin\pi x}{\pi x}$;

$$\mathbf{k}_1'\cdot\mathbf{r} = \left(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}\right)\big|_{\alpha=0} + \frac{2\pi f}{v}x +$$

$$+\frac{2\pi L}{\lambda_0} n_o \tilde{c}\left[1-\gamma(\theta_0)\right]\alpha^2; \qquad (60)$$

$$\left(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}\right)\Big|_{\alpha=0} = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_2\left(\theta_0'\right)\left(z_0\cos\theta_0' - x_0\sin\theta_0'\right) - \qquad (61)$$

начальная фаза световой волны на входной апертуре АОМ.

Учитывая взаимодействие второго порядка, можно определить поле во втором порядке дифракции $\mathbf{E}_{+2}^{(2)}$, поправку к нулевому порядку $\mathbf{E}_0^{(2)}$ и т. д. В частности, поле в (+1)-м порядке дифракции в приближении третьего порядка взаимодействия имеет вид:

$$\mathbf{E}_{+1}^{(3)} = -i\chi_0 \mathbf{U}_{k_1} K_{12}(\theta_1',\theta_0') e^{i\left[\mathbf{k}_1'\mathbf{r}-(\omega+\Omega)t\right]}\times$$

$$\times\left\{\operatorname{sinc}\frac{L}{\lambda_0}\eta_{12}^{(1)}\left(\theta_1',\theta_0'\right) - \frac{\chi_0^2}{2^3}\left[Y^2\left(\beta_{2,1}\right)K_{12}\left(\theta_1',\theta_2\right)\times\right.\right.$$

$$\times K_{21}\left(\theta_2,\theta_1'\right)\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{z_2'}\int_{-1}^{z_1'} e^{i\frac{\pi L}{\lambda_0}\zeta\left(\theta_1',\theta_2,\theta_1'\right)} dz_0' dz_1' dz_2' +$$

$$+K_{12}\left(\theta_1',\theta_0'\right)K_{21}\left(\theta_0',\theta_1'\right)\times$$

$$\left.\left.\times\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{z_2'}\int_{-1}^{z_1'} e^{i\frac{\pi L}{\lambda_0}\cdot\zeta\left(\theta_1',\theta_0',\theta_1'\right)} dz_0' dz_1' dz_2'\right]\right\}, \qquad (62)$$

где

$$\zeta\left(\theta_3,\theta_2,\theta_1\right) = \eta_{12}^{(3)}\left(\theta_3,\theta_2\right)z_2' +$$

$$+\eta_{21}^{(2)}\left(\theta_2,\theta_1\right)z_1' + \eta_{12}^{(1)}\left(\theta_1,\theta_0'\right)z_0'. \qquad (63)$$

При выводе выражения (62) не учитывалась ветвь диаграммы рассеяния, связанная с дифракцией в (−1)-й порядок. Вклад этого рассеяния в поле для (+1)-го порядка при угле θ_0', определяемом условием (52), будет проявляться только при малых длинах взаимодействия на низких частотах ультразвука. Для практически важных применений при расчетах поля вкладом от (−1)-го дифракционного порядка можно пренебречь. Для конкретного применения выражения (62) нужно принимать во внимание, что дифракция света во второй порядок, которая учтена в (62), наиболее эффективно будет происходить при условии

$$\eta_{12}^{(1)}\left(\theta_1',\theta_0'\right) = \eta_{21}^{(2)}\left(\theta_2,\theta_1'\right) = \eta_{12}^{(3)}\left(\theta_1',\theta_2\right) = 0.$$

Для нашей геометрии рассеяния это соответствует случаю $\theta_1' = 0$ и

$$f = f_{\text{в}}' = \frac{v}{\lambda_0} n_o\sqrt{\left(n_o^2+n_e^2\right)G_{33}} \quad -$$

частота двухфононного взаимодействия. Для практических применений это рассеяние является вредным. Будем в дальнейшем полагать, что выбранная нами частота $f \neq f_{\text{в}}'$, и, более того, что $f_{\text{в}}'$ лежит вне полосы рабочих частот АОМ. При этом вкладом от второго порядка дифракции в поле для (+1)-го порядка можно пренебречь и учитывать только взаимодействие между (+1)-м и (0)-м порядками дифракции.

Анизотропная дифракция при амплитудной модуляции ультразвукового сигнала

Предположим, что амплитуда ультразвукового возмущения в кристалле изменяется по закону:

$$A(\mathbf{r}) = A_0\left[1+m_0\cos\left(2\pi f_0\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{v}}\right)\right] =$$

$$= A_0\left[1+m_0\cos\left(\Phi_0 x\right)\right], \qquad (64)$$

где m_0, f_0 — глубина и частота модуляции; $\mathbf{v}$ — вектор скорости; $\mathbf{r}$ — направление распространения ультразвукового возмущения в среде.

Будем считать, что при небольших значениях β — угла отклонения направления распространения от оси X — скорость ультразвуковой волны меняется незначительно.

Подставляя выражение (64) в формулу (27), с учетом (49) найдем:

$$F(\Delta k_{1x}^1 \mp q_x) = 2\pi A_0 Y(\beta)\times$$

$$\times\left[\delta\left(\Delta k_{1x}^1 \mp \frac{2\pi f}{v}\cos\beta\right)+\right.$$

$$+\frac{m_0}{2}\delta\left(\Delta k_{1x}^1 \mp \frac{2\pi(f-f_0)}{v}\cos\beta\right)+$$

$$\left.+\frac{m_0}{2}\delta\left(\Delta k_{1x}^1 \mp \frac{2\pi(f+f_0)}{v}\cos\beta\right)\right]. \qquad (65)$$

Считая, что для центральной спектральной составляющей амплитудно-модулированного сигнала выполняются условия (52) при $\alpha = 0$, $\beta = 0$; $\theta_0 = \theta_0^{(0)}$, $\theta_1 = \theta_0^{(1)}$, а также учитывая только

взаимодействие между (+1)-м и (0)-м дифракционными порядками, рассчитаем поле в (+1)-м дифракционном порядке на границе ультразвукового столба. Расчет поля производится согласно диаграмме рассеяния, представленной на рис. 4.

Горизонтальные стрелки на диаграмме характеризуют парциальные плоские волны, распространяющиеся под углами $\theta_p^{(m)}$ для $m = 0-3$ (нулевого, первого, второго и третьего порядков взаимодействия). Наклонные стрелки обозначают возможные направления рассеяния этих волн, под действием ультразвукового возмущения (63). Из диаграммы следует, что в приближении 3-го порядка взаимодействия для сигнала с тремя спектральными составляющими имеется 27 возможных комбинаций рассеяния, дающих вклад в дифрагированное поле вблизи (+1)-го порядка. Спектр этого поля состоит из 7 составляющих, отличающихся углами дифракции $\theta_p^{(3)}$ и частотами на величину

$$\Delta\Omega_p = p2\pi f_0,$$

где $p = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$.

Расчет дифрагированного поля производится в соответствии с общим решением (25) путем последовательного нахождения углов $\theta_p^{(m+1)}$ и $\beta_{p,q}^{(m+1)}$, удовлетворяющих системе уравнений (52), в которой нужно произвести следующую замену: $\theta_{m+1} = \theta_p^{(m+1)}$, $\theta_m = \theta_p^{(m)}$, $\beta_{m+1,m} = \beta_{p,q}^{(m+1)}$, где $p, q = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$.

Конечные углы $\theta_p^{(m+1)}$, полученные на предыдущем этапе, являются исходными при расчете углов в следующем порядке взаимодействия. Одновременно с углами $\theta_p^{(m+1)}$ из уравнений (52) находятся углы $\beta_{p,q}^{(m+1)}$ и весовые спектральные коэффициенты $Y\left(\beta_{p,q}^{(m+1)}\right)$. Суммируя все показанные на рис. 4 комбинации рассеяния, найдем поле в (+1)-м дифракционном порядке на выходной апертуре АОМ с учетом приближения третьего порядка взаимодействия:

$$\mathbf{E}_{+1}^{(3)} = -i\chi_0 e^{i\left[(\mathbf{k}_0\mathbf{r})|_{\alpha=0} - \omega\cdot t + \frac{2\pi f}{\mathbf{v}}(x-\mathbf{v}t) + 2L_0\alpha^2\right]} \times$$

$$\times \sum_{p=-3}^{3} C_p(\theta_p^{(3)}) e^{i\left[p\frac{2\pi f_0}{\mathbf{v}}(x-\mathbf{v}t) - 2L_0\gamma_p^{(3)}\alpha^2\right]}; \qquad (66)$$

$$\mathbf{C}_0\left(\theta_0^{(3)}\right) = \mathbf{U}_{k_1}\left(\theta_0^{(3)}\right)\left[K_{12}\left(\theta_0^{(1)}, \theta_0^{(0)}\right) \times \right.$$

$$\times \operatorname{sinc}\left[\frac{L_0}{\pi}\alpha^2\left(\gamma_0^{(1)} + \gamma_0^{(0)}\right)\right] - \frac{\chi_0^2}{8}\{S(0,0,0) +$$

$$+ \frac{m_0^2}{4}\left[S(0,0,+1) + S(0,0,-1) + S(0,+1,+1) + \right.$$

$$\left.\left. + S(0,+1,0) + S(0,-1,0) + S(0,-1,-1)\right]\right\}\Big]; \qquad (67)$$

$$\mathbf{C}_{\pm1}\left(\theta_{\pm1}^{(3)}\right) = \mathbf{U}_{k_1}\left(\theta_{\pm1}^{(3)}\right)\frac{m_0}{2}\left[K_{12}\left(\theta_{\pm1}^{(1)}, \theta_0^{(0)}\right) \times \right.$$

$$\times Y\left(\beta_{\pm1,0}^{(1)}\right)\operatorname{sinc}\left[\frac{L_0}{\pi}\alpha^2\left(\gamma_{\pm1}^{(1)} + \gamma_0^{(0)}\right)\right] -$$

$$- \frac{\chi_0^2}{8}\{S(\pm1,\pm1,\pm1) + S(\pm1,\pm1,0) + S(\pm1,0,0) +$$

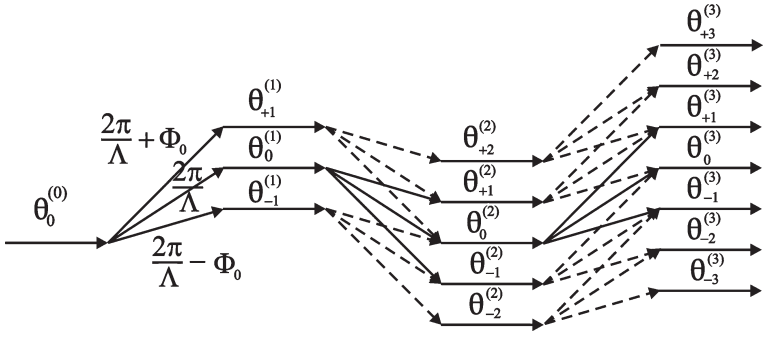


Рис. 4. Диаграмма рассеяния при дифракции света в (+1)-м порядке в приближении 3-го порядка взаимодействия

$$+\frac{m_0^2}{4}\Big[S(\pm1,0,\pm1)+S(\pm1,0,\mp1)+$$

$$+S(\pm1,\pm2,\pm1)\Big]\Big\}\Big]; \quad (68)$$

$$\mathbf{C}_{\pm2}\left(\theta_{\pm2}^{(3)}\right)=-\mathbf{U}_{k_1}\left(\theta_{\pm2}^{(3)}\right)\frac{\chi_0^2}{8}\frac{m_0^2}{2}\times$$

$$\times\Big[S(\pm2,\pm2,\pm1)+S(\pm2,\pm1,\pm1)+S(\pm2,\pm1,0)\Big]\Big\}\Big]; \quad (69)$$

$$\mathbf{C}_{\pm3}\left(\theta_{\pm3}^{(3)}\right)=-\mathbf{U}_{k_1}\left(\theta_{\pm3}^{(3)}\right)\frac{\chi_0^2}{8}\frac{m_0^3}{8}S(\pm3,\pm2,\pm1), \quad (70)$$

где введены обозначения

$$S(p,q,l)=L\left(\theta_p^{(3)},\theta_q^{(2)},\theta_l^{(1)},\theta_0^{(0)}\right)\times$$

$$\times Y\left(\beta_{p,q}^{(3)},\beta_{q,l}^{(2)},\beta_{l,0}^{(1)}\right)J\left(\gamma_p^{(3)},\gamma_q^{(2)},\gamma_l^{(1)},\gamma_0^{(0)}\right); \quad (71)$$

$$L\left(\theta_p^{(3)},\theta_q^{(2)},\theta_l^{(1)},\theta_0^{(0)}\right)=K_{12}\left(\theta_p^{(3)},\theta_q^{(2)}\right)\times$$

$$\times K_{21}\left(\theta_q^{(2)},\theta_l^{(1)}\right)K_{12}\left(\theta_l^{(1)},\theta_0^{(0)}\right); \quad (72)$$

$$Y\left(\beta_{p,q}^{(3)},\beta_{q,l}^{(2)},\beta_{l,0}^{(1)}\right)=Y\left(\beta_{p,q}^{(3)}\right)Y\left(\beta_{q,l}^{(2)}\right)Y\left(\beta_{l,0}^{(1)}\right); \quad (73)$$

$$J\left(\gamma_p^{(3)},\gamma_q^{(2)},\gamma_l^{(1)},\gamma_0^{(0)}\right)=$$

$$=\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{z_2'}\int_{-1}^{z_1'}e^{iL_0\alpha^2\gamma(p,q,l)}dz_2'dz_1'dz_0'; \quad (74)$$

$$\gamma(p,q,l)=\left(\gamma_p^{(3)}+\gamma_q^{(2)}\right)z_2'-$$

$$-\left(\gamma_q^{(2)}+\gamma_l^{(1)}\right)z_1'+\left(\gamma_l^{(1)}+\gamma_0^{(0)}\right)z_0'; \quad (75)$$

$$\gamma_p^{(m)}=\gamma\left(\theta_p^{(m)}\right)=b\left(\theta_p^{(m)}\right)^2\left[1+b^2\left(\theta_p^{(m)}\right)\right]^{-1/2}; \quad (76)$$

$$L_0=\frac{\pi L n_o\tilde{c}}{\lambda_0}=\frac{\pi L n_0\left(n_e^2-n_o^2\right)}{\lambda_0 4n_e^2}. \quad (77)$$

Амплитуды $\mathbf{U}_{k_1}\left(\theta_p^{(3)}\right)$ определяются выражениями (37)–(41). Из соотношений (66)–(77) видно, что в общем случае амплитуды спектральных составляющих с положительными и отрицательными индексами p становятся неодинаковыми. Симметрия спектра относительно направления $\theta_1=\theta_0^{(1)}=\theta_0^{(3)}$ нарушается, причем форма огибающей спектра зависит от выбора несущей частоты f и настройки центральной спектральной составляющей спектра на условия брэгговской дифракции. Амплитуды спектральных составляющих с «паразитными» частотами модуляции ($p=\pm2,\pm3$) возрастают с увеличением индекса модуляции χ_0 и сильно зависят от глубины модуляции m_0. При малой глубине модуляции вкладом этих составляющих в общее поле можно пренебречь. Тем не менее, в случае визуализации изображений для получения хорошего контраста необходимо работать с величинами $m_0\cong1$, поэтому этими составляющими при больших индексах модуляции пренебрегать нельзя.

Основные результаты и выводы

1. В результате решения интегрального уравнения для электромагнитного поля, полученного с помощью введения эквивалентных токов и разложения искомого поля по плоским волнам, найдено общее решение для дифрагированного на ультразвуке светового поля, справедливое для анизотропной диэлектрической среды, обладающей гиротропными свойствами.

2. На основании общего решения интегрального уравнения предложена методика расчета дифрагированного светового поля для практически важной геометрии рассеяния, соответствующей широкополосной анизотропной дифракции света на медленной сдвиговой упругой волне, распространяющейся в направлении [110] кристалла TeO_2 вблизи его оптической оси. В качестве примера в приближении до третьего порядка взаимодействия включительно для данной геометрии рассеяния получено выражение для дифрагированного светового поля в (+1)-м порядке на границе ультразвукового столба при постоянной амплитуде ультразвукового возмущения, а также при его амплитудной модуляции по гармоническому закону. В выражениях для дифрагированных полей учтены углы падения световых волн на АОМ в плоскости ортогональной плоскости дифракции.

Представленная методика расчета светового поля на выходной апертуре АОМ путем последовательного нахождения углов дифракции и амплитуд дифрагированных полей для возрас-

тающих порядков взаимодействия позволяет в дальнейшем рассчитать интенсивность амплитудно-модулированного света при его дифракции в АОМ из TeO_2 с учетом гиротропии этого кристалла, а также решить вопрос о нелинейных искажениях в сигнале изображения для лазерной проекционной системы, в которой используется АОМ из TeO_2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Парыгин, В.Н.** Взаимодействие электромагнитных волн с распределенной фазовой решеткой. Изотропные среды [Текст] / В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков // Радиотехника и электроника.— 1973.— Т. 18.— № 4.— С. 703 –712.

2. **Парыгин, В.Н.** Взаимодействие электромагнитных волн с распределенной фазовой решеткой. Анизотропные среды [Текст] / В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков // Радиотехника и электроника.— 1974.— Т. 19.— № 6.— С. 1178— 1186.

3. **Парыгин, В.Н.** Дифракция света на ультразвуке в анизотропной среде [Текст] / В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков // Квантовая электроника.— 1975.— Т. 2.— № 2.— С. 318– 326.

4. **Мартынов, А.М.** Дифракция произвольного цилиндрического светового пучка на широкополосном ультразвуковом сигнале [Текст] / А.М. Мартынов // Радиотехника и электроника.— 1977.— Т. 22.— № 3.— С. 533–540.

5. **Сташкевич, А.А.** Расчет дифракции света на ультразвуке сложного спектрального состава в акустооптическом процессоре [Текст] / А.А. Сташкевич // Оптика и спектроскопия.— 1978.— Т. 45.— № 5.— С. 967– 973.

6. **Балакший, В.И**. Физические основы акустооптики [Текст] / В.И. Балакший, В.Н. Парыгин, Л.Е. Чирков.— М.: Радио и связь, 1985.— 280 с.

7. **Кулак, Г.В.** Промежуточный режим дифракции света на ультразвуке в анизотропных гиротропных кристаллах [Текст] / Г.В. Кулак // Журнал технической физики.— 1997.— Т. 67.— № 9.— С. 80–82.

8. **Петрунькин, В.Ю.** Теория дифракции света на ультразвуке. Изотропные среды [Текст] / В.Ю. Петрунькин, И.А. Водоватов // Изв. вузов. Радиофизика.— 1983.— Т. 26.— № 12.— С. 1570–1578.

9. **Петрунькин, В.Ю.** К вопросу о дифракции света на ультразвуке [Текст] / В.Ю. Петрунькин, И.А. Водоватов, К.В. Ветров // Сб. тр. «Обработка радиосигналов акустоэлектронными и акустооптическими устройствами».— Л.: Наука, 1983.— С. 51–59.

10. **Петрунькин, В.Ю.** Дифракция света на ультразвуке в анизотропных средах [Текст] / В.Ю. Петрунькин, И.А. Водоватов, А.А. Липовский // Изв. вузов. Радиофизика.— 1983.— Т. 26.— № 8.— С. 1021–1029.

11. **Петрунькин, В.Ю.** Многочастотная дифракция света на ультразвуке [Текст] / Петрунькин В.Ю., Водоватов И.А. / Изв. вузов. Радиофизика.— 1984.— Т. 27.— С. 332–340.

12. **Агранович, В.М.** Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов [Текст] / В.М. Агранович, В.Л. Гинзбург.— М.: Наука, 1979.— 432 с.

13. **Сиротин, Ю.И**. Основы кристаллофизики [Текст] / Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская.— М.: Наука, 1975.— 680 с.

14. **Вайнштейн, Л.А.** Электромагнитные волны [Текст] / Л.А. Вайнштейн.— М.: Сов. Радио, 1957.— 581 с.

15. **Смирнов, В.И.** Курс высшей математики [Текст] / В.И. Смирнов.— М.: ТТЛ,— Т. 4.— 1957.– 812 с.

УДК 539.122.04

К.А. Багаев, С.С. Козловский

ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ КАЛИБРОВКИ ДЕТЕКТОРОВ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Одной из актуальных задач экологического мониторинга является определение радиоактивности водной среды. Как правило, для этого используются сцинтилляционные детекторы, погружаемые в воду на заданную глубину. Детектор регистрирует гамма-излучение, генерируемое радиоактивными веществами, растворенными в воде. В результате измерения получают амплитудное распределение сигналов, которое содержит информацию о составе радиоактивного загрязнения и активности среды. Однако для вычисления значения активности необходима предварительная калибровка детектора.

Калибровка — это процедура определения коэффициента, связывающего интеграл под пиком полного поглощения с активностью среды. Указанная процедура должна проводиться в среде, имитирующей реальную и обладающей известной активностью. При измерении активности методом погружения предполагается, что поток квантов, облучающих детектор, — равновесный. В связи с этим калибровку необходимо проводить внутри такого объема жидкости, который обеспечивает равновесный поток в центре. Понятно, что величина этого объема будет зависеть от энергии излучения.

Распространение гамма-квантов в среде — сложный процесс, включающий рассеяние и поглощение. Вычисление объема, обеспечивающего равновесный поток в центре, невозможно выполнить аналитически.

На кафедре экспериментальной ядерной физики СПбГПУ разрабатывается компьютерная программа «MCC 3D» для расчета методом Монте-Карло прохождения излучения через вещество. Программа позволяет моделировать взаимодействия гамма-квантов, электронов и позитронов с атомами среды. Для расчетов используются современные базы данных по сечениям взаимодействия частиц с веществом. С помощью достаточно простого интерфейса можно создавать трехмерные модели объектов. Существует возможность создания объемных источников излучения, спектральный состав которых может быть непрерывным, моноэнергетическим, каскадным. С помощью этой программы можно смоделировать активную среду, детектор и рассчитать его функцию отклика.

Многократные сравнения расчетной функции отклика различных детекторов (сцинтилляционных и полупроводниковых), облучаемых стандартными источниками ОСГИ, с экспериментальными данными показали, что программа дает согласие с экспериментом в пределах единиц процентов. Имеется сертификат из института метрологии им. Д.И. Менделеева, подтверждающий, что программа адекватно описывает процессы взаимодействия гамма- и электронного излучения с веществом в энергетическом диапазоне, характерном для естественных источников радиоактивного излучения.

Указанная программа была использована для определения объема водной среды, обеспечивающей равновесие потока излучения в центре, в зависимости от энергии растворенного радионуклида.

Определение объема водной среды, необходимого для создания равновесного потока гамма-излучения в его центре

В большинстве случаев для определения активности среды используются сцинтилляционные детекторы. Поэтому в качестве модели де-

тектора был выбран сцинтиллятор NaI : Tl, выполненный в виде шара радиусом R_d = 10 см. В качестве источников излучения были использованы моноэнергетические источники гамма-квантов в диапазоне от 100 кэВ до 2,5 МэВ.

Излучающая среда представляла собой шар радиусом R, заполненный водой. Расчеты функции отклика были проведены для различных радиусов излучающего шара в диапазоне от 20 до 220 см. При этом определялась функция отклика детектора для каждого значения энергии.

Полученные функции отклика для описанной выше геометрии приведены на рис. 1 для энергии 1 МэВ и трех значений радиуса излучающего шара. Видно, что по мере увеличения радиуса излучающей среды график функции отклика детектора переходит в кривую с насыщением. Причем сначала перестает изменяться форма жесткой части спектра, а при достижении некоторого радиуса — и весь спектр в целом. Назовем эту величину радиусом насыщения. Неизменность функции отклика детектора при достижении радиуса насыщения свидетельствует о том, что в месте расположения детектора поток гамма-квантов становится равновесным. Дальнейшее увеличение объема не влияет на поток квантов в центре.

Число моделируемых актов радиоактивного распада N, задаваемых в программе, определялось на основе одной и той же объемной активности среды A:

$$A_1 = \frac{N_1}{V_1}, \qquad A_2 = \frac{N_2}{V_2};$$

$$A_1 = A_2 \Rightarrow \frac{N_1}{V_1} = \frac{N_2}{V_2} \Rightarrow N_2 = V_2 \frac{N_1}{V_1}.$$

Из полученных в результате расчета функций отклика для каждого значения энергии и радиуса излучающего объема определялся полный интеграл и интеграл под пиком. Зависимость этих величин от радиуса излучающей среды для источника с энергией 1 МэВ приведена на рис. 2. Как следует из графика, состояние насыщения для полного интеграла наступает при радиусе шара, равном 120 см, а для интеграла в пике полного поглощения — при радиусе, равном 80 см.

На рис. 3 приведены итоговые результаты значений радиусов насыщения для полного интеграла, полученные во всем диапазоне энергий.

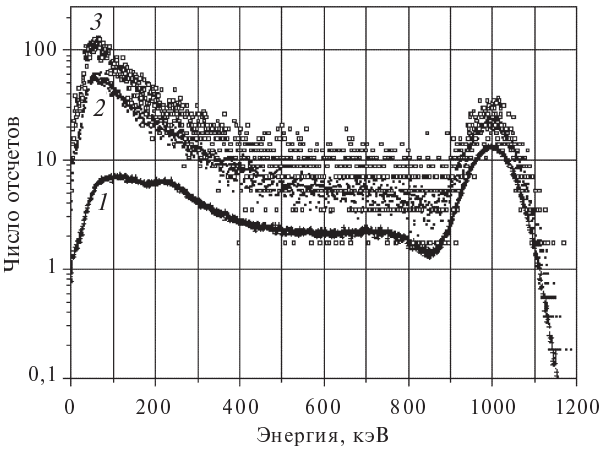


Рис. 1. Функция отклика детектора для энергии излучения 1 МэВ

Радиус излучающего шара, см: 20 (*1*); 40 (*2*); 200 (*3*)

Из графика видно, что максимальный радиус излучающего шара, обеспечивающего равновесие потока квантов в центре, достигается при энергии около 1500 кэВ. Это связано с тем, что кванты именно этой энергии обладают максимальной проникающей способностью в воде. Таким образом, как следует из приведенных расчетов, для исследуемого диапазона энергий гамма-квантов при радиусе шара 200 см удается получить равновесный поток в центре и тем самым с достаточной точностью реализовать модель бесконечной излучающей водной среды во всем диапазоне энергий излучения от 100 до 2500 кэВ.

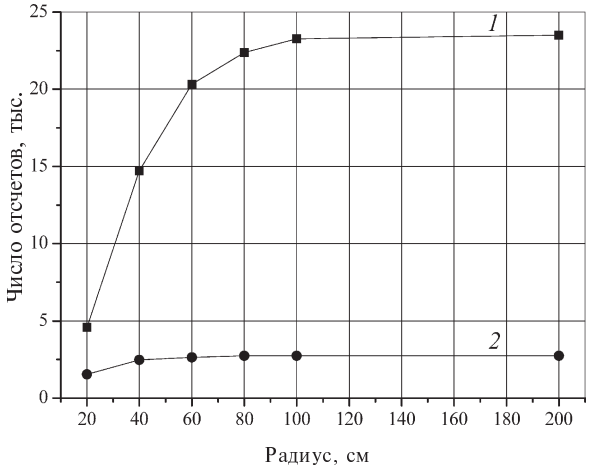


Рис. 2. Зависимость полного интеграла (*1*) и интеграла под пиком (*2*) от внешнего радиуса излучающей среды для энергии квантов 1 МэВ

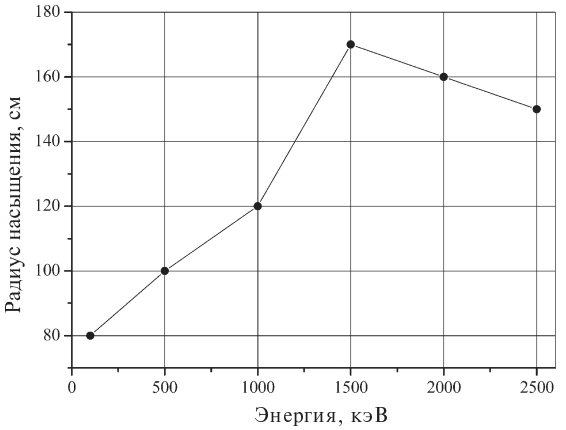


Рис. 3. Зависимость радиуса насыщения от энергии гамма-квантов

Итак, для обеспечения равновесного потока квантов при калибровке детектора во всем диапазоне энергий излучения от 100 до 2500 кэВ необходимо иметь объем радиоактивной водной среды около 30 м^3. Процедуры создания и утилизации такого большого объема радиоактивной воды весьма дороги и небезопасны. Для каждого изотопа необходимо подготавливать новый объем радиоактивной жидкости.

В связи с этим предлагается использовать программу «MCC 3D» и для проведения процедуры калибровки детекторов. Для этого необходимо в точности смоделировать используемый на практике сцинтилляционный детектор, поместить его в центр водного шара радиусом 2 м, а в качестве источника излучения указать реальный радиоактивный изотоп.

Стандартный размер детектора составляет около 1000 см^3, что намного меньше объема излучающей среды. Гамма-излучение генерируется программой равномерно по всему объему шара, поэтому лишь малая доля квантов пересекает поверхность детектора. Именно такие события являются «полезными», так как только они регистрируются детектором. Поэтому в реальной модели время набора спектра с достаточной для калибровки статистикой составляет десятки часов. Авторами предложена методика ускорения расчетов.

Ускорение расчетов

Идея ускоренного алгоритма базируется на предположении, что можно уменьшить излучающий объем, соответственно увеличивая плотность излучающей среды. Назовем такую геометрию расчета модельной.

Как известно [1], интенсивность потока гамма-квантов в первом приближении ослабляется по экспоненциальному закону:

$$I = I_0 e^{-\mu\rho};$$

$$\mu r = n_a \sigma r = \frac{N_A \rho}{A} \sigma r,$$

где μ — коэффициент ослабления излучения; r — линейный размер среды; N_A — число Авогадро; ρ — плотность среды; I_0 — начальная интенсивность падающего гамма излучения; A — атомный вес; σ — сечение взаимодействия.

Видно, что при уменьшении линейных размеров r среды и соответствующем увеличении плотности среды ρ коэффициент ослабления не изменяется, а время расчета может быть сокращено, так как уменьшается объем пространства, из которого гамма-кванты доходят до детектора. Однако такая простая модель не учитывает процесс многократного рассеяния.

В геометрии широкого пучка наряду с первичными гамма-квантами в детектор попадают кванты, рассеянные средой один или несколько раз в результате комптоновского рассеяния.

В результате многократного рассеяния происходит накопление излучения с меньшей энергией относительно энергии первичных квантов, так как при каждом комптоновском взаимодействии гамма-квант дискретно изменяет направление движения и энергию, причем угол рассеяния θ с определенной вероятностью может принимать любые значения от 0 до π, а энергия рассеянного кванта варьируется от величины E_0 до

$$E_{\min} = \frac{0,51 E_0}{0,51 + 2E_0},$$

где E_0, МэВ — начальная энергия гамма-кванта.

Аналитический учет рассеянного излучения представляет значительную трудность. Математическое решение задачи осложняется тем, что при многократном рассеянии меняется спектральный состав излучения, а вместе с этим меняются вероятности поглощения и рассеяния вновь образованных квантов, их угловое распределение и эффективность регистрации их детектором излучения.

Более точное выражение для рассеянного потока квантов описывается формулой, учитывающей процессы многократного рассеяния:

$$I = I_0\left(A_1 e^{-\alpha_1 \mu r} + A_2 e^{-\alpha_2 \mu r} + \ldots + A_N e^{-\alpha_N \mu r}\right), \quad (1)$$

где A_i, α_i — коэффициенты, зависящие от энергии излучения и от Z среды.

Таким образом, реализация простейшей модели учитывает только акты однократного рассеяния, т. е. только первый член разложения, описываемого формулой (1). Для того чтобы определить вклад процессов многократного рассеяния в формирование функции отклика детектора, были проведены соответствующие расчеты с помощью программы «MCC 3D».

Расчет функции отклика в модельной геометрии

Расчет функции отклика в модельной геометрии проводился для детектора того же самого размера (NaI, R_d = 10 см) и для водной среды, линейные размеры которой были уменьшены в

$$K = \frac{l}{l'} = \frac{R - R_d}{R' - R_d} \text{ раз},$$

где $l = R - R_d$ — линейный размер реальной геометрии; $l' = R' - R_d$ — линейный размер модельной геометрии; R, R_d — внешний и внутренний радиусы среды.

При этом внутренний радиус остался тем же (R_d = 10,01 см), а внешний был уменьшен. Для сохранения одинаковых параметров излучающей среды число генерируемых событий в модельной геометрии должно описываться следующей формулой:

$$N' = N\frac{V'}{V}K,$$

где $V' = \frac{4\pi}{3}\left(R'^3 - R_d^{\,3}\right)$, $V = \frac{4\pi}{3}\left(R^3 - R_d^{\,3}\right)$ — соответственно объемы модельной и реальной геометрий, N — число генерируемых событий реальной геометрии.

Для вывода формулы числа генерируемых событий в модельной геометрии мы использовали тот факт, что доля α_1 активных атомов излучающей среды в модельной геометрии равна доле α_2 активных атомов среды в реальной геометрии:

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha.$$

Доля активных атомов α входит в выражение, определяющее активность A_{V1} геометрии реальной и активность A_{V2} геометрии модельной, следующим образом:

$$A_{V1} = n_{\alpha 1}\alpha_1 = \frac{N_A \rho_1}{A}\alpha = \frac{N}{V};$$

$$A_{V2} = n_{\alpha 2}\alpha_2 = \frac{N_A \rho_2}{A}\alpha = \frac{N'}{V'},$$

где A — массовое число; ρ_1, ρ_1' — плотности среды в реальной и модельной геометриях.

Соответственно, если приравнять значение доли активных атомов при активности среды A_{V1} к доле активных атомов при активности A_{V2} и учесть, что для сохранения параметров модельной геометрии плотность среды должна быть увеличена в K раз, т. е. $\rho_1' = \rho_1 K$, то получим исходное значение числа генерируемых событий для модельной геометрии:

$$N' = N\frac{V'}{V}K.$$

Видно, что скорость расчета зависит от соотношения числа генерируемых событий в модельной и реальной геометриях, которое в свою очередь определяется величиной коэффициента K и соотношением объемов. На рис. 4 приведена зависимость числа генерируемых событий N' от коэффициента K. Видно, что для данного радиуса детектора R_d = 10 см оптимальное значение коэффициента $K \approx 100$. При больших значениях коэффициента значительного преимущества в ускорении расчета мы не получаем. Таким образом, значение коэффициента K = 100 является оправданным и будет использоваться при выполнении расчета.

Как следует из приведенных выше данных, при уменьшении линейных размеров среды в 100 раз

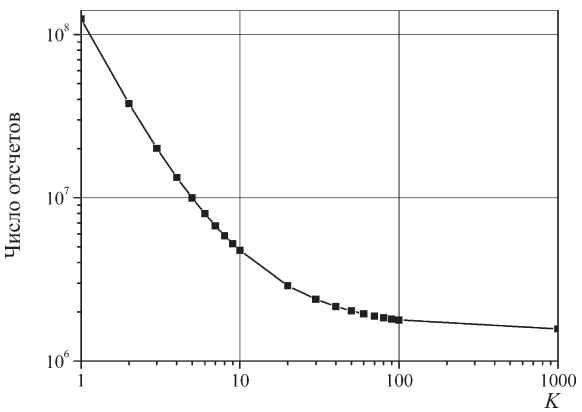


Рис. 4. Зависимость числа генерируемых событий от коэффициента K

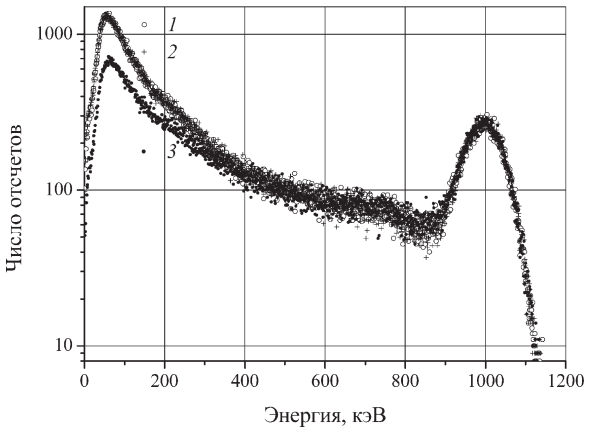


Рис. 5. Функция отклика детектора для трех типов геометрии: реальной (1), подобранной (2) и модельной (3)

и при соответствующем увеличении плотности излучающей среды получаем выигрыш по времени расчета приблизительно в 50 раз.

Для проверки предложенного алгоритма ускорения были проведены расчеты функции отклика детектора в модельной геометрии. В результате были получены данные для всех значений энергии в диапазоне 100 кэВ — 2,5 МэВ. Расчеты показали, что функции отклика детектора совпадают для реальной и модельной геометрий в основной части спектра. Однако в области малых энергий наблюдается заметное отклонение спектра в модельной геометрий от реального. Данное отличие связано с многократными процессами рассеяния гамма-квантов в среде (при многократном рассеянии меняется спектральный состав излучения, а вместе с этим меняются вероятность поглощения и рассеяния вновь образованных квантов, их угловое распределение и эффективность регистрации их детектором излучения).

Для того чтобы скорректировать это отклонение, было предложено модифицировать модельную геометрию, а именно, ввести зазор между излучающим сферическим слоем и детектором. Такая мера мотивируется тем, что этим мы добавляем количество квантов, попавших в детектор в результате многократного рассеяния. В результате проведенных расчетов были определены требуемые размеры зазора для различных энергий. Оказалось, что необходимая величина зазора независимо от энергии должна в 1,5 раз превышать линейные размеры детектора. Такую геометрию эксперимента назовем подобранной геометрией.

На рис. 5 приведены спектры излучения для реальной, модельной и подобранной геометрий; энергия гамма-квантов составляет 1 МэВ. Как следует из графика, для энергии гамма-квантов 1 МэВ функции отклика реальной и модельной геометрий совпадают в области больших энергий и отличаются в области малых. Результаты расчета для подобранной и реальной геометрий полностью совпадают. Для всех остальных энергий квантов наблюдается такая же картина. Таким образом, подобранная геометрия может использоваться в расчетах вместо реальной.

В таблице представлена информация о времени расчета функции отклика сцинтилляционного детектора для реальной и подобранной геометрий при наборе одинаковой статистики. Анализ приведенных данных показывает, что процесс расчета функции отклика сцинтилляционного детектора в реальной геометрии занимает значительное время, тогда как для подобранной геометрии мы получаем существенное ускорение.

Сравнение времени расчета функции отклика сцинтилляционного детектора в реальной и подобранной геометриях при наборе одинаковой статистики

E, кэВ	T_{real}, ч	$N_{real}\cdot 10^6$	T, ч	$N\cdot 10^6$
100	4	63,4	0,5	6,82
500	12	179	0,8	7,33
1000	15	159	1,1	8,66
1500	15	125	1,0	4,82
2000	23	177	1,0	6,48
2500	16	120	0,7	4,31

Обозначения: E — значение исследуемой энергии; T, T_{real} — времена расчета в подобранной и реальной геометриях; N, N_{real} — число генерируемых событий для указанных случаев.

Результаты расчетов сравнивались с экспериментальными данными, полученными в ЦНИИ РТК [2]. Сравнение подтвердило, что программа «МСС 3D» дает согласие с экспериментом в пределах единиц процентов. В настоящее время предложенная методика калибровки детекторов внедрена для измерения активности в водной среде и используется в вышеуказанной организации. Это позволило существенно снизить расходы на калибровку детекторов и избежать дополнительных рисков при утилизации радиоактивных растворов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Новиков, Г.Ф.** Радиометрическая разведка [Текст] / Г.Ф. Новиков. — Л.: Недра, 1989. — 532 с. — ISBN 5-247-00832-4.

2. Разработка методов имитационного трехмерного моделирования систем детектирования и регистрации ионизирующих излучений: отчет о НИР/ Центральный научно-исследовательский институт робототехники и технической кибернетики (ЦНИИ РТК); рук. Лопота В.А. — СПб, 2006. — 106 с.; № ГР 01.2006.06546.

УДК 539.126.3

А.Я. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов, В.Г. Рябов, Ю.Г. Рябов, В.М. Самсонов

ПОДАВЛЕНИЕ ВЫХОДА КОРОТКОЖИВУЩИХ НЕЙТРАЛЬНЫХ КАОНОВ В ЦЕНТРАЛЬНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГЭВ

Квантовая хромодинамика (КХД) предсказывает, что при достаточно высокой температуре и плотности сильно взаимодействующая ядерная материя переходит в состояние со свободными кварками и глюонами, обладающими цветовыми зарядами, и образуется так называемая кварк-глюонная плазма (КГП) [1]. Считается, что такое состояние материи существовало первые 10^{-6} с после Большого взрыва. Наблюдение подобного фазового перехода и изучение свойств нового состояния вещества позволит лучше понять процессы эволюции Вселенной, строения нейтронных звезд, а также проверить основы КХД. Численное описание фазового перехода и свойств КГП представляет собой чрезвычайно сложную задачу. Как правило, фазовый переход описывают в рамках решеточных подходов, в которых полевая теория КХД рассматривается на дискретной решетке в пространстве и времени [2]. Решеточные расчеты предсказывают фазовый переход в состояние КГП при температуре $T \approx 170$ МэВ (10^{12} К), что соответствует плотности энергии $\varepsilon \approx 1$ ГэВ/фм^3. Значение плотности энергии в нормальной ядерной материи составляет приблизительно 0,15 ГэВ/фм^3. Достигнуть в лабораторных условиях плотностей энергий, достаточных для образования КГП, возможно, если столкнуть два тяжелых ультрарелятивистских ядра. Для этих целей используют ускорители на встречных пучках. В настоящее время одним из основных ускорителей, предназначенных для изучения взаимодействий тяжелых ядер, служит релятивистский коллайдер тяжелых ионов RHIC [3] в БНЛ (США).

На ускорителе RHIC установлен один из двух больших детекторов — PHENIX [4]. Основная цель программы по изучению взаимодействий тяжелых ядер высоких энергий на эксперименте PHENIX заключается в поиске аномалий в свойствах рождающихся частиц, которые могли бы свидетельствовать об образовании нового состояния вещества, и исследовании таких аномалий в зависимости от центральности столкновений. Важным достоинством детектора PHENIX является возможность регистрации и измерения свойств большого числа частиц как в протон-

ных, так и в различных ядерных столкновениях при одной и той же энергии нуклон-нуклонных взаимодействий. Это позволяет разделить степень влияния эффектов начального и конечного состояний на свойства рождающихся частиц.

В данной статье представлены результаты исследования рождения K_s-мезонов в столкновениях ядер золота при энергии в системе центра масс на пару нуклонов $\left(\sqrt{S_{NN}}\right)$, равной 200 ГэВ. Результаты были получены при анализе данных, накопленных экспериментом PHENIX во время седьмого цикла физической работы ускорителя RHIC.

Отбор данных и методика измерений

Исследование проводилось путем измерения выхода мезонов в канале распада $K_s \to \pi^0\pi^0$ для четырех классов событий по центральности: 0 — 93 %, 0 — 20 %, 20 — 60 % и 60 — 93 %. Центральностью столкновения называют параметр, определяющий степень перекрытия ядер при столкновении и измеряемый в процентах. Событие с центральностью X % означает, что среди всех возможных событий только указанная доля из них может иметь больше провзаимодействовавших нуклонов, чем данное событие. Столкновения, при которых сталкивающиеся ядра имеют максимальную область перекрытия, называются центральными и характеризуются малой величиной центральности, выраженной в процентах. В свою очередь взаимодействия с малой областью перекрытия ядер называются периферийными и характеризуются большими величинами центральности. Как следует из определения центральности, этот параметр тесно связан с такими общими характеристиками событий, как число нуклонов, участвующих во взаимодействии, число элементарных столкновений между нуклонами, прицельный параметр столкновения, область перекрытия, асимметрия области перекрытия и т. п. Для измерения центральности на эксперименте PHENIX используется система внутренних детекторов [5].

Для восстановления основных характеристик K_s-мезонов необходимо первоначально измерить параметры π^0-мезонов (нейтральных пионов). Последний представляет собой короткоживущую частицу, распадающуюся на два гамма-кванта с вероятностью, равной 98,823 ± 0,034 % [6]. Регистрация гамма-квантов и восстановление характеристик π^0-мезонов осуществлялось с помощью электромагнитного калориметра экспериментальной установки PHENIX [7]. Для восстановления необходимых параметров π^0-мезонов в пределах одного события комбинировались все возможные пары гамма-кластеров, зарегистрированных калориметром, с применением одновременно трех критериев отбора:

1. Для энергии гамма-кластера (два гамма-кванта имеют энергии $E1$ и $E2$) выполняются неравенства

($E1$, $E2$) > 0,4 ГэВ (для класса событий по центральности 60—93 %);

($E1$, $E2$) > 0,6 ГэВ (для остальных классов событий по центральности).

2. Справедливо неравенство $\frac{|E2-E1|}{E1+E2} < 0,8$.

3. По выполнению условия, что оба гамма-кластера должны быть зарегистрированы в одном секторе калориметра.

Помимо нейтральных частиц, любая заряженная частица также оставляет часть своей энергии в активном объеме калориметра, что приводит к образованию адронных кластеров. Учет таких кластеров при комбинировании гамма-квантов в пары приводит к увеличению комбинаторного фона и существенно ухудшает соотношение сигнал/фон. Данная проблема становится критичной в центральных столкновениях тяжелых ядер с высокой энергией, где множественность частиц резко возрастает. Поэтому для дискриминации адронных сигналов был применен критерий отбора, основанный на анализе формы ливня [8]. Как правило, адронный ливень имеет большую ширину, чем электромагнитный ливень. Высокая сегментация секторов электромагнитного калориметра (~ 5×5 см) позволяет анализировать форму измеренных ливней. Для этого производится сравнение энергий, измеренных в каждой башне кластера, со значениями, ожидаемыми в случае электромагнитной природы ливня. Ожидаемое для электромагнитного ливня распределение энергии кластера по башням калориметра определяется из анализа формы ливней, измеренных на тестовом электронном пучке, а также из Монте-Карло-моделирования работы детектора. Данное распределение зависит от энергии кластера E, расстояния от центра башни до взвешенного центра ливня r и угла падения частицы θ:

$$\frac{E_i^{\text{ожид}}}{E} = p_1(E,\theta)\exp\left[\frac{-r^3}{p_2(E,\theta)}\right] +$$

$$+ p_3(E,\theta)\exp\left[\frac{-r}{p_2(E,\theta)}\right],$$

где $p_{1,2,3,4}(E,\theta)$ — нелинейные коэффициенты.

Данное выражение определяет среднее ожидаемое распределение энергии кластера по башням калориметра. В каждом конкретном случае распределение энергии может флуктуировать. Характерный размер флуктуаций зависит от энергии кластера и угла падения частицы $f(E, \theta)$, а также величины энергетических потерь $q(E)$:

$$\sigma_i^2 = q(E) + CE_i^{\text{ожид}}\left(1 + a_1\frac{E_i^{\text{ожид}}}{E} + \right.$$

$$\left. + a_2\left(\frac{E_i^{\text{ожид}}}{E}\right)^2 + f(E,\theta)\left(1 - \frac{E_i^{\text{ожид}}}{E}\right)\right),$$

где $a_{1,2}$, C — постоянные коэффициенты.

Вероятность того, что зарегистрированный кластер имеет электромагнитную природу, определяется выражением

$$\chi^2 = \frac{1}{N}\sum_i^N \frac{\left(E_i^{\text{ожид}} - E_i^{\text{изм}}\right)^2}{\sigma_i^2}.$$

При отборе электромагнитных кластеров требовалось, чтобы значение χ^2 было меньше трех.

Положение центров пиков в спектрах инвариантной массы двух гамма-квантов, соответствующих распаду нейтральных пионов, и их ширины были измерены и параметризованы как функции поперечного импульса. В качестве кандидатов в π^0-мезоны отбирались пары гамма-квантов, удовлетворяющие следующим условиям:

1. Для поперечного импульса пары выполняются неравенства

$p_T^{\gamma\gamma} > 1{,}5$ ГэВ/c — для класса событий по центральности 60 — 93 %;

$p_T^{\gamma\gamma} > 2$ ГэВ/c — для остальных классов событий по центральности (c — скорость света).

2. Инвариантная масса пары находится в пределах двух среднеквадратичных отклонений от параметризованного значения массы π^0-мезона.

Отобранным π^0-кандидатам приписывались табличная масса π^0-мезона и восстановленный импульс пары гамма-квантов. Для восстановления пиков от распада $K_s \to \pi^0\pi^0$ отобранные π^0-кандидаты в пределах одного события комбинировались друг с другом. Для определения выхода K_s-мезонов спектры инвариантной массы двух пионов в области пика, соответствующего распаду K_s-мезонов, были аппроксимированы функцией, состоящей из суммы полинома второй степени, описывающего фон, и функции Гаусса, описывающей пик. Выход K_s-мезонов (число K_s-мезонов, восстановленных в детекторе) определялся как полный интеграл функции Гаусса.

Инвариантные выходы были вычислены по следующей формуле:

$$\frac{1}{2\pi p_T}\frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{N(p_T)}{2\pi p_T N_{\text{соб}}\varepsilon(p_T)Br\Delta p_T \Delta y},$$

где p_T — поперечный импульс K_s-мезона; y — быстрота; $N(p_T)$ — выход K_s-мезонов; $\varepsilon(p_T)$ — функция коррекции, учитывающая геометрический аксептанс, разрешение, эффективность работы калориметра, эффективность триггеров, влияние множественности частиц на эффективность регистрации K_s-мезонов; $N_{\text{соб}}$ — число анализируемых событий — столкновений ядер золота; Br — вероятность распада по каналу $K_s \to \pi^0\pi^0$; Δp_T — диапазон поперечных импульсов, в пределах которого определяется выход K_s-мезона.

Функция коррекции $\varepsilon(p_T)$ была вычислена путем полного Монте-Карло-моделирования экспериментальной установки ФЕНИКС с использованием программного пакета GEANT 3,21 [9].

Систематические ошибки измерения выходов адронов могут быть разделены на три типа:

A — не зависящие от поперечного импульса;

B — зависящие от поперечного импульса, но форма зависимости неизвестна;

C — связанные с неопределенностью нормировки спектров.

Неопределенность, связанная с нахождением выхода K_s-мезонов в основном обуславливает систематическую ошибку типа A. Неточность энергетической калибровки калориметра определяет систематическую ошибку типа B. Ошибка типа C в основном связана с неточностью описания конструкционных материалов спектрометра в Монте-Карло-моделировании, что приводит к искажению оценки влияния конверсии гамма-квантов на рождение K_s-мезонов. Суммарная систематическая ошибка плавно увеличивается

от 21 до 31 % при возрастании поперечного импульса K_s-мезонов от 4 до 13,5 ГэВ/c.

Отличие ядро-ядерных взаимодействий от простой суперпозиции нуклон-нуклонных столкновений заключается в присутствии коллективных эффектов, которые часто изучаются с помощью так называемого фактора ядерной модификации, определяемого как отношение выхода частиц в ядро-ядерных и протон-протонных взаимодействиях, отнесенных к соответствующему числу парных нуклон-нуклонных столкновений. Факторы ядерной модификации R_{AA} измеряются в виде зависимостей от центральности и энергии взаимодействия ядер. Это позволяет анализировать зависимости коллективных эффектов от размера сталкивающейся системы и энергии взаимодействия. R_{AA} вычисляется согласно формуле:

$$R_{AA}(p_T) = \frac{dN_{AA}(p_T)}{N_{\text{столкн}}\, dN_{pp}(p_T)}.$$

Выход K_s-мезонов в столкновениях ядер золота был получен в представленном анализе, а их выход в протонных столкновениях был ранее опубликован в статье [10]. Значения $N_{\text{столкн}}$ были вычислены в рамках модели Глаубера [11].

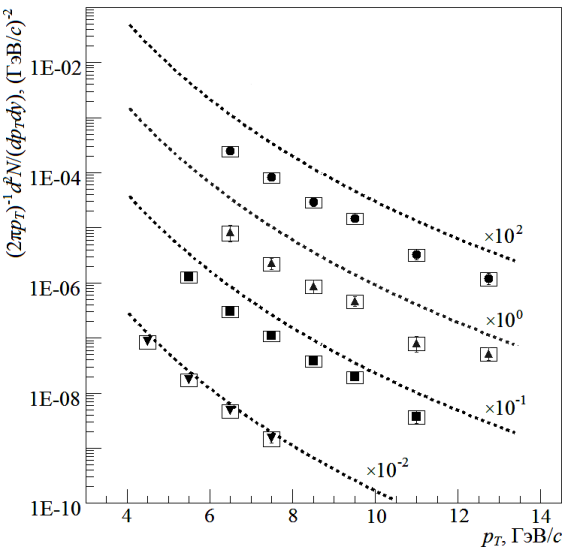


Рис. 1. Инвариантные спектры рождения по поперечному импульсу K_s-мезонов в столкновениях ядер золота при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ для различных классов событий по центральности, %: 0–93 (●); 0–20 (▲), 20–60 (■); 60–93 (▼).

Пунктиры — аппроксимации спектров (p + p) × $N_{\text{столкн}}$; быстрота $|y| < 0{,}35$. Вертикальные «усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений соответственно

Результаты измерений

Инвариантные спектры рождения по поперечному импульсу K_s-мезонов, измеренные в столкновениях ядер золота при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = = 200 ГэВ, показаны на рис. 1. Результаты представлены для различных классов событий по центральности в диапазоне поперечных импульсов от 4 до 13,5 ГэВ/c и являются первыми в мире результатами измерения рождения K_s-мезонов

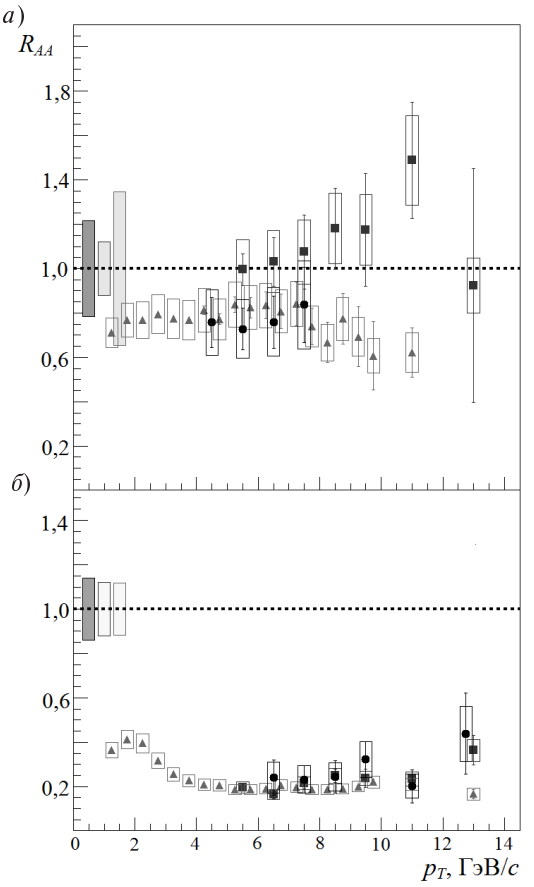


Рис. 2. Зависимости факторов ядерной модификации для K_s-(●), π^0-(▲) и η-(■) мезонов от поперечного импульса в центральных (*а*) и периферийных (*б*) столкновениях ядер золота при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ.

«Усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим (типов A и B, сложенных квадратично) ошибкам соответственно; три вертикальных прямоугольника вблизи оси ординат — систематическим ошибкам типа C для K_s-, η- и π^0-мезонов (слева направо)

в столкновениях тяжелых ядер в области больших поперечных импульсов, когда $p_T > 5$ — 6 ГэВ/c. Пунктирные линии — результат аппроксимации инвариантного спектра рождения по поперечному импульсу K_s-мезонов в протон-протонных взаимодействиях, умноженный на соответствующее число парных нуклон-нуклонных столкновений.

Результаты измерения факторов ядерной модификации для K_s-мезонов в центральных и периферийных столкновениях ядер золота при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ представлены на рис. 2. В центральных столкновениях в области больших поперечных импульсов выход K_s-мезонов подавлен примерно в 4–5 раз. В то же время в периферийных столкновениях фактор ядерной модификации близок к единице во всей области измерений. Также на рисунке показаны факторы ядерной модификации для π^0- [12] и η-мезонов [13]. Как и выход K_s-мезонов, выходы π^0- и η-мезонов подавлены приблизительно в пять раз при $p_T > 4$–5 ГэВ/C. Степень подавления остается постоянной в области поперечных импульсов 5–20 ГэВ/c. Близость к единице отношений R_{dA}, измеренных в (d + Au)-взаимодействиях [14], свидетельствует о том, что подавление выхода адронов с большим поперечным импульсом является эффектом не начального состояния, а происходит в результате формирования плотной и горячей среды в центральных столкновениях ядер золота. Одинаковая степень подавления K_s-, π^0- и η-мезонов свидетельствует о том, что подавление происходит на партонном уровне.

Таким образом, в статье представлены результаты измерения инвариантных спектров рождения по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации для короткоживущего нейтрального каона в столкновениях ядер золота при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ. Исследования выполнены для различных классов событий по центральности в диапазоне поперечных импульсов от 4 до 13,5 ГэВ/c в области быстрот от –0,35 до 0,35. В центральных столкновениях ядер золота в области больших поперечных импульсов выход K_s-мезонов подавлен примерно в 4 — 5 раз. В то же время в периферийных столкновениях фактор ядерной модификации близок к единице во всей области измерений. Такая же степень подавления наблюдается у π^0- и η-мезонов.

Экспериментальные наблюдения свидетельствуют, что наблюдаемое подавление выхода адронов в области больших поперечных импульсов происходит в результате формирования плотной и горячей среды в центральных столкновениях ядер золота. Одинаковая степень подавления странных и нестранных адронов в области больших поперечных импульсов свидетельствует о том, что подавление происходит на партонном уровне, а также, что характерный масштаб энергетических потерь одинаков для u-, d-, s-партонов.

Работа поддержана в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 — 2013 годы, II очередь (от 24.12.2009), лот №5, шифр 2010-1.1-125-015.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Shuryak, E.V.** Quantum chromodynamics and the theory of superdense matter [Text] / E.V. Shuryak / / Physics Reports.— 1980.— Vol. 61.— P. 71–158.

2. **Laermann, E.** The status of lattice QCD at finite temperature / E. Laermann, O. Philipsen [Text] // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.— 2003.— Vol. 53.— P. 163–198.

3. **Baym, G.** RHIC: From dreams to beams in two decades [Text] / G. Baym // Nucl. Phys. A.— 2002.— Vol. 698.— P. xxiii–xxxii.

4. **Adcox, K.** PHENIX detector overview [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A.— 2003.— Vol. 499.— P. 469–479.

5. **Allen, M.** PHENIX inner detectors [Text] / M. Allen, M.J. Bennet, M. Bobrek [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A.— 2003.— Vol. 499.— P. 549–559.

6. **Nakamura, K.** Particle data group [Text] / K. Nakamura, K. Hagiwara, K. Hikasa [et al.] // J. Phys. G.— 2010.— Vol. 37.— P. 075021.

7. **Aphecetche, L.** The PHENIX calorimeter [Text] / L. Aphecetche, T.C. Awes, J. Banning [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A.— 2003.— Vol. 499.— P. 521–536.

8. **Bazilevsky, A.V.** Electron/hadron separation in the electromagnetic calorimeter of the PHENIX setup [Text] / A.V. Bazilevskij, S. White, E.P. Kistenev [et al.] // Instrum. Exp. Tech.— 1999.— Vol. 42.— P. 167–173.

9. **Brun, R.** GEANT: simulation program for particle physics experiments [Text] / R. Brun, R. Hagelberg, M. Hansroul [et al.] // Preprint CERN.— 1978.— V.CERN-DD-78-2-REV.— P. 1–76.

10. **Бердников, Я.А.** Дифференциальные сечения рождения π, K, η, ω, η′, φ-мезонов в p + p взаи-

модействиях при энергии $\sqrt{S}$ = 200 ГэВ [Текст] / Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.— 2008.— № 6(67).— С. 65–70.

11. **Glauber, R.J.** High-energy scattering of protons by nuclei [Text] / R.J. Glauber, G. Matthiae // Nucl. Phys. B.— 1970.— Vol. 21.— P. 135–157.

12. **Adare, A.** Suppression pattern of neutral pions at high transverse momentum in Au + Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200GeV and constraints on medium transport coefficients [Text] / A. Adare, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 2008.— Vol. 101.— P. 232301–232308.

13. **Adare, A.** Transverse momentum dependence of η meson suppression in Au + Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV [Text] / A. Adare, A. Berdnikov, D. Ivanischev [et al.] // Phys. Rev. C.— 2010.— Vol. 82.— P. 011902–011909.

14. **Adler, S.S.** Centrality dependence of π^0 and η production at large transverse momentum in $\sqrt{S_{NN}}$ = = 200 GeV *d* + Au collisions [Text] / S.S. Adler, Y. Berdnikov, V. Riabov [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 2007.— Vol. 98.— P. 172302–172309.

УДК 539.126.3

А.Я. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов, В.Г. Рябов, Ю.Г. Рябов, В.М. Самсонов

РОЖДЕНИЕ КОРОТКОЖИВУЩИХ НЕЙТРАЛЬНЫХ КАОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР МЕДИ ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГЭВ

Измерение характеристик адронов, рождающихся в столкновениях тяжелых ультрарелятивистских ядер, позволяет детально исследовать свойства горячей и плотной материи, образующейся в таких столкновениях. Результаты измерения выходов адронов детектором PHENIX [1] в области поперечных импульсов, больших 5 ГэВ/*c* (*c* — скорость света), позволили определить некоторые свойства ядерной материи, образующейся в центральных столкновениях ядер золота при энергии в системе центра масс на пару нуклонов $\left(\sqrt{S_{NN}}\right)$, равную 200 ГэВ, на ускорителе RHIC [2]. Так, обнаруженное подавление выхода адронов свидетельствует об образовании среды, характеризующейся высокой партонной плотностью, приводящей к энергетическим потерям высокоэнергетичных партонов, распространяющихся в ней.

Для систематического исследования эффекта подавления выхода адронов в области больших поперечных импульсов необходимо измерять характеристики адронов в столкновениях ядер среднего размера, например ядер меди. Это позволяет оценить влияние геометрии области перекрытия ядер на среднюю величину энергетических потерь жестких партонов, а также улучшить точность измерений в области числа взаимодействующих нуклонов $N_{\text{участн}} < 100$. Это в свою очередь позволяет провести проверку уже существующих теоретических моделей, описывающих подавление выхода адронов в зависимости от энергии и центральности столкновений тяжелых ядер, а также способствовать их дальнейшему развитию.

В данной статье представлены результаты измерения инвариантных спектров рождения по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации для короткоживущего нейтрального K_s-мезона в столкновениях ядер меди при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ.

Отбор данных и методика измерений

Основной целью рассматриваемого физического анализа является измерение инклюзивного спектра рождения K_s-мезонов по поперечному импульсу в области малых быстрот, доступной центральным спектрометрам детектора PHENIX.

Инвариантный выход $Y_{\text{инв}}$ адронов определяется следующим выражением:

$$Y_{\text{инв}}(p_T) = \frac{1}{2\pi p_T}\frac{d^2N}{dp_T dy} =$$

$$= \frac{N(p_T)}{2\pi p_T N_{\text{соб}} \varepsilon(p_T) Br \Delta p_T \Delta y},$$

где p_T — поперечный импульс K_s-мезона; y — быстрота; $N(p_T)$ — выход K_s-мезонов; $\varepsilon(p_T)$ — функция коррекции; $N_{\text{соб}}$ — число анализируемых событий столкновений ядер меди; Br — вероятность распада по каналу $K_s \to \pi^0\pi^0$; Δp_T — диапазон поперечных импульсов, в пределах которого определяется выход K_s-мезона.

Измерение выходов K_s-мезонов осуществлялось путем регистрации мезонов в канале распада $K_s \to \pi^0\pi^0$ для четырех классов событий по центральности: 0–93 %, 0–20 %, 20–60 % и 60–94 % (центральностью столкновения называют параметр, определяющий степень перекрытия ядер при столкновении [3]). Для измерения центральности на эксперименте PHENIX используется система внутренних детекторов [4].

Первоначально были измерены основные характеристики π^0-мезонов в канале распада $\pi^0 \to \gamma\gamma$. Регистрация гамма-квантов и восстановление параметров π^0-мезонов осуществлялось с помощью электромагнитного калориметра экспериментальной установки PHENIX [5]. Для восстановления необходимых характеристик π^0-мезонов в пределах одного события комбинировались все возможные пары гамма-квантов (имеющих энергии $E1$ и $E2$), зарегистрированных калориметром, с применением одновременно трех критериев отбора:

1. По энергии гамма-кванта –

($E1$, $E2$) > 0,2 ГэВ (для класса событий по центральности 60 — 94 %);

($E1$, $E2$) > 0,4 ГэВ (для остальных классов событий по центральности);

2. По выполнению неравенства $\frac{|E2 - E1|}{E1 + E2} < 0{,}8$.

3. По выполнению условия, что оба гамма-кванта зарегистрированы в одном секторе калориметра.

Положение центров пиков в спектрах инвариантной массы двух гамма-квантов, соответствующих распаду нейтральных пионов, и их ширины были измерены и параметризованы как функции поперечного импульса. В качестве кандидатов в π^0-мезоны отбирались пары гамма-квантов, удовлетворяющие следующим условиям:

поперечный импульс пары $p_T^{\gamma\gamma} > 1{,}5$ ГэВ/c (для классов событий по центральности 60–94 % и 20–60 %) и $p_T^{\gamma\gamma} > 2$ ГэВ/c (для остальных классов событий по центральности);

инвариантная масса пары находится в пределах двух среднеквадратичных отклонений от параметризованного значения массы π^0-мезона.

Отобранным π^0-кандидатам приписывались табличная масса π^0-мезона и восстановленный импульс пары гамма-квантов. Для восстановления пиков от распада $K_s \to \pi^0\pi^0$ отобранные π^0-кандидаты в пределах одного события комбинировались друг с другом. Для определения выхода K_s-мезонов спектры инвариантной массы двух пионов в области пика, соответствующего распаду K_s-мезонов, были аппроксимированы функцией в виде суммы, состоящей из полинома второй степени, описывающего фон, и функции Гаусса, описывающей пик. Выход K_s-мезонов (число K_s-мезонов, восстановленных в установке) определялся как полный интеграл функции Гаусса.

Функция коррекции $\varepsilon(p_T)$ определяет эффективность регистрации K_s-мезонов в детекторе PHENIX. Она учитывает реальную геометрию детекторных подсистем экспериментальной установки PHENIX, включая их эффективность, мертвые зоны, пространственное, энергетическое и импульсное разрешение, влияние множественности частиц на эффективность регистрации K_s-мезонов. Она также учитывает критерии отбора нейтральных частиц, использованные при анализе экспериментальных данных. В качестве основного инструмента для расчета функции коррекции $\varepsilon(p_T)$ используется программа PISA (Phenix Integrated Simulation Application), созданная на базе пакета GEANT 3,21 [6]. Программа PISA специально разработана для корректного описания геометрии, разрешения, эффективности и материалов экспериментальной установки PHENIX. Входными параметрами для PISA являются характеристики изначальных частиц, такие как координаты точки рождения, полный импульс, заряд, масса, каналы распада и т. п. Выборка изначальных частиц создается с помощью Монте-Карло-генератора частиц Exodus. В задачи программы PISA входит моделирование прохождения частиц, а также всех продуктов их распада или взаимодействий, через экспериментальную установку PHENIX; моделирование откликов детекторов на уровне отдельных каналов электроники и создание файлов данных, имеющих такую же струк-

туру, как и для реальных событий. Это позволяет использовать при анализе смоделированных данных те же коды и алгоритмы, которые используются при анализе реальных данных.

В общем виде функция коррекции может быть представлена в следующем виде:

$$\varepsilon(p_T) = \frac{N_{\text{рек}}(p_T)}{N(p_T)},$$

где $N(p_T)$, $N_{\text{рек}}(p_T)$ — спектры по поперечному импульсу смоделированных и реконструированных частиц соответственно.

Для определения эффективности регистрации K_s-мезонов в установке PHENIX было смоделировано 10^9 K_s-мезонов с плоским распределением по поперечному импульсу $2{,}8 < p_T < 14$; быстроте $-0{,}5 < y < 0{,}5$; вершине взаимодействия $-30 < z$ (см) < 30; азимутальному углу $0 < \varphi$ (рад) $< 2\pi$. Число смоделированных событий выбиралось таким образом, чтобы обеспечить достаточную статистическую точность измерений во всем динамическом диапазоне.

Пространственное, энергетическое и импульсное разрешение детекторов при моделировании было настроено таким образом, чтобы восстановленные массы и ширины пиков в их распределении находились в соответствии с параметрами, наблюдаемыми в реальных данных.

Спектры выхода адронов измеряются при значениях поперечного импульса, соответствующих центрам промежутков по указанному импульсу, в пределах которых анализируются спектры инвариантной массы. Конечное разрешение детекторных подсистем приводит к тому, что восстановленный импульс адронов несколько отличается от истинного (первоначального) значения. В зависимости от формы спектра смоделированных частиц изменение импульса восстановленных частиц может преимущественно происходить либо в сторону его увеличения, либо уменьшения. Поэтому при вычислении функций коррекции необходимо учитывать реальную форму спектра смоделированных частиц по поперечному импульсу $N(p_T)$. Для решения данной задачи функция коррекции вычисляется методом итераций. На первом этапе функция вычисляется в предположении, что поперечные импульсы изначальных частиц равномерно распределены по поперечному импульсу. Данная функция используется для восстановления спектра выхода адронов. Восстановленный таким образом спектр адронов по поперечному импульсу аппроксимируется функцией (как правило, для этого используются либо функция Леви [7], либо функция Хагедорна, либо экспоненциальная функция). Полученная зависимость используется в качестве весовой функции для преобразования первоначального спектра сгенерированных частиц в спектр, близкий к реальному. После этого повторяется процедура вычисления функции коррекций. Исследования показали, что уже вторая итерация приводит к пренебрежимо малым поправкам к функциям коррекции.

Взаимодействия тяжелых релятивистских ядер на коллайдере RHIC характеризуются большой множественностью частиц в конечном состоянии в области малых быстрот. Из-за конечной сегментации и пространственного разрешения детекторных подсистем высокая плотность частиц приводит к уменьшению эффективности регистрации K_s-мезона за счет «слипания» γ-кластеров в калориметре. При значительном перекрытии двух γ-кластеров возникает вероятность того, что они будут восстановлены как один с суммарной энергией двух слипшихся кластеров. Данный эффект приводит к потере части кластеров (в основном низких энергий) и изменению энергии кластеров, что может влиять на положение центров пиков и их ширины в спектрах инвариантной массы. Для учета данного эффекта смоделированные события на уровне сигналов, поступающих с систем детектирования, были смешаны с реальными событиями, соответствующие взаимодействиям Cu + Cu.

Быстрое падение спектров рождения мезонов с увеличением поперечного импульса частиц приводит к тому, что положение восстановленных точек по горизонтальной оси не обязательно должно совпадать с центрами рассматриваемых промежутков по поперечному импульсу. Для учета данного эффекта экспериментальные точки сдвигаются, но не по горизонтальной, а по вертикальной оси. Это облегчает построение таких отношений, как факторов ядерной модификации и т. п. Алгоритм данной процедуры заключается в следующих шагах:

1. Восстановленный спектр частиц аппроксимируется функцией $f(p_T)$.

2. Вычисляется вес m для данного промежутка по поперечному импульсу, равный

$$m = \frac{1}{p_T^{\max} - p_T^{\min}} \int_{p_T^{\min}}^{p_T^{\max}} f(p_T)\,dp_T,$$

где $p_T^{\max}$, $p_T^{\min}$ — границы рассматриваемого промежутка.

3. Вычисляется отношение

$$r = \frac{m}{f\left(\dfrac{p_T^{\max} - p_T^{\min}}{2}\right)}.$$

4. Экспериментальная точка сдвигается вдоль вертикальной оси согласно выражению $Y_{\text{корр}} = Y/r$.

Так как при сдвиге точек изменяется форма спектра частиц, данная процедура должна носить итерационный характер. При анализе данных процедура повторялась два раза. Данная поправка включена в функцию коррекции.

Результаты вычисления функции коррекций $\varepsilon(p_T)$ для K_s-мезонов для различных классов событий по центральности показаны на рис. 1. Эффективность регистрации резко уменьшается в области поперечных импульсов $p_T < 4$ ГэВ/c, что естественным образом вводит ограничение на доступную динамическую область измерений в установке PHENIX. В области больших поперечных импульсов возможность измерения выхода K_s-мезонов ограничена исключительно накопленной статистикой.

Систематические ошибки измерения выходов адронов могут быть разделены на три типа:

A — не зависящие от поперечного импульса;

B — зависящие от поперечного импульса, но форма зависимости неизвестна;

C — связанные с неопределенностью нормировки спектров.

Неопределенность, связанная с нахождением выхода K_s-мезонов, в основном обуславливает систематическую ошибку типа A. Неточность энергетической калибровки калориметра определяет систематическую ошибку типа B. Ошибка типа C в основном связана с неточностью описания конструкционных материалов спектрометра в Монте-Карло-моделировании, что приводит к искажению оценки влияния конверсии гамма-квантов на рождение K_s-мезонов. Суммарная систематическая ошибка плавно увеличивается от 22 до 32 % при возрастании поперечного импульса K_s-мезонов от 3 до 12 ГэВ/c.

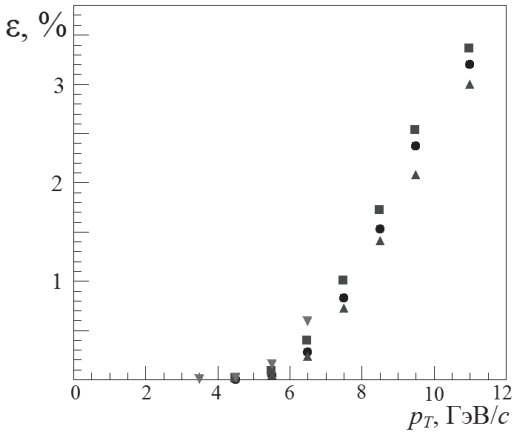


Рис. 1. Функция коррекций для K_s-мезонов для различных классов событий по центральности, %: 0 — 94 (●); 0 — 20 (▲); 20 — 60 (■); 60 — 94 (▼)

Факторы ядерной модификации R_{AA} [3] были вычислены по формуле:

$$R_{AA}(p_T) = \frac{dN_{AA}(p_T)}{N_{\text{столкн}}\,dN_{pp}(p_T)}.$$

Инвариантный выход K_s-мезонов в столкновениях ядер меди был измерен в данной статье, а их инвариантный выход в протонных столкновениях был ранее опубликован в работе [8]. Значения $N_{\text{столкн}}$ были вычислены в рамках модели Глаубера [9].

Для изучения зависимости фактора ядерной модификации от количества нуклонов $N_{\text{участн}}$, участвующих во взаимодействии, этот фактор интегрируется в определенном диапазоне поперечных импульсов согласно следующей формуле:

$$\langle R_{AA} \rangle = \frac{\sum_i p_{Ti}^{A+A}\,dp_{Ti}^{A+A}\,Y_{\text{инв}}^{A+A}(p_{Ti}^{A+A})}{\sum_i p_{Ti}^{p+p}\,dp_{Ti}^{p+p}\,Y_{\text{инв}}^{p+p}(p_{Ti}^{p+p})} \frac{1}{N_{\text{столкн}}}.$$

Данное отношение называется интегральным фактором ядерной модификации. Мы произвели интегрирование факторов ядерной модификации в области поперечных импульсов $p_T > 5$ ГэВ/c.

Результаты измерений

На рис. 2 показаны зависимости инвариантных выходов K_s-мезонов от поперечного им-

пульса, измеренные в столкновениях ядер меди при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ. Измерения выполнены для событий четырех классов событий по центральности. Впервые представлены результаты измерения рождения K_s-мезонов в столкновениях ядер меди в широкой области поперечных импульсов от 3 до 12 ГэВ/c.

Результаты измерения факторов ядерной модификации для K_s-мезона в центральных и периферийных столкновениях ядер меди при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ представлены на рис. 3. Там же приведены указанные величины для π^0-мезонов [10]. Анализ этих данных показывает, что наблюдается почти двукратное подавление выхода K_s- и π^0-мезонов в центральных столкновениях ядер меди. В периферийных столкновениях подавления выхода мезонов не наблюдается.

На рис. 4 показаны зависимости интегральных факторов ядерной модификации от $N_{\text{участн}}$, измеренные для K_s-мезонов в (Cu + Cu)- и (Au + Au)- столкновениях, а также для π^0-мезонов в столкновениях ядер золота [10]. Интегрирование проведено в области поперечных импульсов $p_T > 5$ ГэВ/c для K_s-мезонов и $p_T > 6$ ГэВ/c — для π^0-мезонов.

Как видно из рисунка, в пределах систематических и статистических ошибок экспериментальные точки лежат практически на одной кривой.

Представленные экспериментальные наблюдения показывают, что в центральных столкновениях ядер меди, а также ядер золота, формируется плотная и горячая среда, обуславливающая подавление выхода адронов. При этом величина подавления в основном определяется количеством нуклонов, которые участвуют во взаимодействии, и не зависит от геометрии перекрытия ядер.

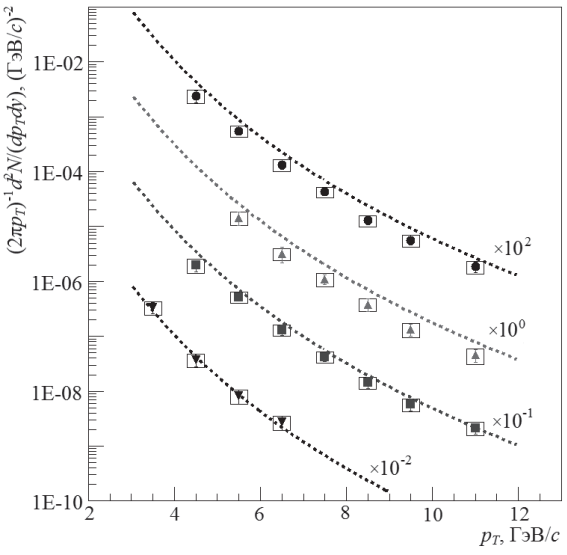


Рис. 2. Инвариантные спектры рождения K_s-мезонов по поперечному импульсу в столкновениях ядер меди при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ для различных классов событий по центральности (символы соответствуют приведенным на рис. 1).

Пунктиры — аппроксимации спектров $(p + p) \times N_{\text{столкн}}$; быстрота $|y| < 0{,}35$. Вертикальные «усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений соответственно

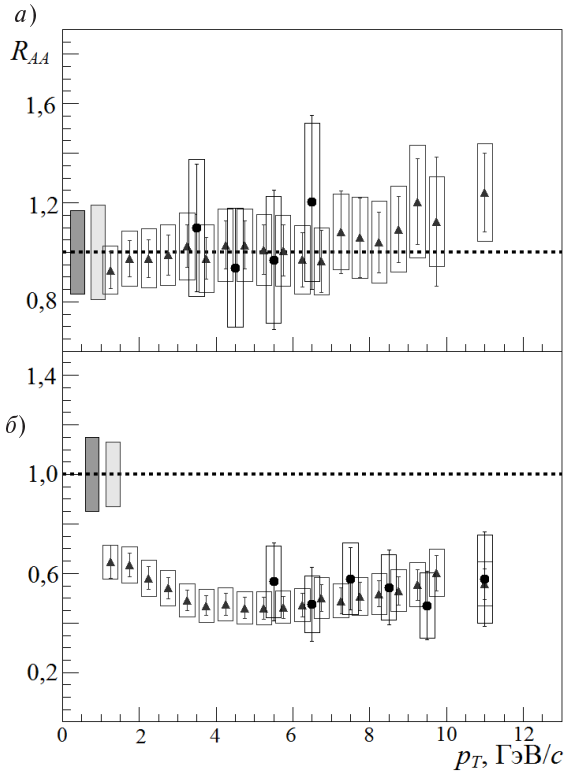


Рис. 3. Зависимости факторов ядерной модификации для K_s- (●) и π^0- (▲) мезонов от поперечного импульса в центральных (*а*) и периферийных (*б*) столкновениях ядер меди при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ.

«Усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим (типов A и B, сложенных квадратично) ошибкам соответственно; два вертикальных прямоугольника (темный и светлый) вблизи оси ординат — систематическим ошибкам типа C для K_s- и π^0-мезонов соответственно

Таким образом, в статье впервые представлены экспериментальные результаты по исследованию рождения K_s-мезонов в области больших поперечных импульсов в столкновениях ядер меди при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ. Измерения выполнены для различных классов событий по центральности в диапазоне поперечных импульсов от 3 до 12 ГэВ/c в области быстрот от $-0{,}35$ до $0{,}35$. В центральных столкновениях ядер меди наблюдается почти двукратное подавление выхода K_s-мезонов; аналогичная степень подавления наблюдается и для π^0-мезонов.

Анализ полученных данных показал, что в центральных столкновениях ядер меди, а также ядер золота формируется плотная и горячая среда, обуславливающая подавление адронов. Величина подавления в основном определяется количеством нуклонов, участвующих во взаимодействии, и не зависит от геометрии перекрытия ядер.

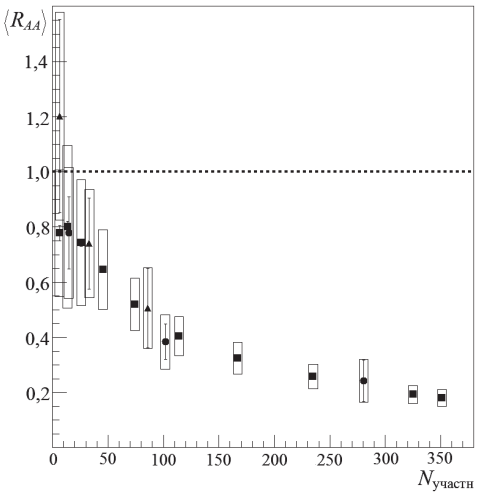


Рис. 4. Зависимости от количества нуклонов $N_{\text{участн}}$ интегральных факторов ядерной модификации для K_s- (●, ▲) и π^0-(■) мезонов в столкновениях ядер меди (▲) и ядер золота (●, ■) при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 ГэВ; быстрота $|y| < 0{,}35$. Обозначения ошибок измерений соответствуют рис. 2

Работа поддержана в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 — 2013 годы, II очередь (от 24.12.2009), лот №5, шифр 2010-1.1-125-015.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Adcox, K.** PHENIX detector overview [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A.— 2003.— Vol. 499.— P. 469–479.

2. **Иванищев, Д.А.** Изучение ультрарелятивистских ядро-ядерных столкновений в эксперименте ФЕНИКС [Текст] / Д.А. Иванищев, В.Г. Рябов, Ю.Г. Рябов // Ядерная физика.— 2009.— № 11(72).— С. 2005–2012.

3. **Adcox, K.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov [et al.] // Nuclear Physics A.— 2005.— Vol. 757.— Issues 1–2.— P. 184–283.

4. **Allen, M.** PHENIX inner detectors [Text] / M. Allen, M.J. Bennet, M. Bobrek [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A.— 2003.— Vol. 499.— P. 549–559.

5. **Aphecetche, L.** The PHENIX calorimeter [Text] / L. Aphecetche, T.C. Awes, J. Banning [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A.— 2003.— Vol. 499.— P. 521–536.

6. **Brun, R.** GEANT: simulation program for particle physics experiments [Text] / R. Brun, R. Hagelberg, M. Hansroul [et al.] // Preprint CERN.— 1978.— V.CERN-DD-78-2-REV.— P. 1–76.

7. **Wilk, G.** Interpretation of the nonextensivity parameter q in some applications of Tsallis statistics and Levy distributions [Text] / G. Wilk, Z. Wlodarczyk // Phys. Rev. Lett.— 2000.— Vol. 84.— P. 2770–2773.

8. **Бердников, Я.А.** Дифференциальные сечения рождения π, K, η, ω, η', φ-мезонов в $p + p$ взаимодействиях при энергии $\sqrt{S}$ = 200 ГэВ [Текст] / Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.— 2008.— № 6(67).— С. 65–70.

9. **Glauber, R.J.** High-energy scattering of protons by nuclei [Text] / R.J. Glauber, G. Matthiae // Nucl. Phys. B.— 1970.— Vol. 21.— P. 135–157.

10. **Adare, A.** Onset of π^0 suppression studied in Cu + Cu collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 22.4, 62.4, and 200 GeV [Text] / A. Adare, A. Berdnikov, D. Ivanischev [et al.] // Phys. Rev. Lett.— 2008.— Vol. 101.— P. 162301–162308.

УДК 532

А.Д. Гиргидов

О ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ ГРАДИЕНТНЫХ ЗАВИСИМОСТЯХ

Феноменологические зависимости градиентного типа, или градиентные зависимости, используются как эффективное средство в гидродинамике (закон Ньютона для вязких напряжений), в теории тепло- и массопереноса (законы Фурье и Фика).

При этом, как правило, не обсуждается вопрос о том, каким образом, например, в процессе молекулярной диффузии к выделенной молекуле газа поступает информация о воздействующем на нее градиенте концентрации: для того, чтобы двигаться, например, вправо, концентрация диффундирующих частиц слева от выделенной молекулы должна быть больше, чем справа, и эта информация должна быть доступна этой молекуле. Таким образом, молекула «должна иметь какие-то возможности» для оценки пространственной изменчивости воздействующего на нее поля концентрации в окрестности точки, в которой она находится. Естественно, информация о локальной изменчивости поля собирается и доносится до молекулы за конечный промежуток времени, так что на реальное значение градиента концентрации диффундирующие частицы реагируют с некоторой задержкой во времени.

Сходным образом обстоит дело и в случае распространения тепла и импульса. Рассмотрим описанные в литературе модели, позволяющие пояснить указанный выше вопрос.

Молекулярная диффузия в газах

Молекула примеси в газе, чтобы двигаться в сторону уменьшения концентрации примеси, должна многократно испытать столкновения при хаотическом тепловом движении с тем, чтобы в среднем (за конечный интервал времени, содержащий много отрезков времени между столкновениями) переместиться в ту сторону, в которой было меньше столкновений, т. е. где меньше концентрация частиц примеси. Согласно градиентной зависимости этот интервал равен нулю. В самом деле, согласно закону Фика плотность потока $\mathbf{S}$ диффундирующей примеси пропорциональна градиенту ее концентрации ϑ:

$$\mathbf{S} = -\chi \operatorname{grad} \vartheta, \tag{1}$$

где χ — коэффициент диффузии.

Подставив это равенство в дифференциальное уравнение, выражающее закон сохранения массы для консервативной примеси

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0, \tag{2}$$

где t — время, получим уравнение диффузии

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} = \chi \Delta \vartheta, \tag{3}$$

которое в случае диффузии в одном измерении (вдоль оси x) имеет вид:

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2}. \tag{4}$$

Решение этого уравнения для мгновенного (при $t = 0$) точечного источника, расположенного в начале координат (при $x = 0$), имеет вид:

$$\vartheta = \frac{M}{2\sqrt{\pi \chi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\chi t} \right), \tag{5}$$

где M — масса примеси, поступившая из источника.

Согласно зависимости (5) при сколь угодно малом $t > 0$ примесь имеет ненулевую концентрацию при любом (сколь угодно большом) x. Это возможно при условии, что частицы примеси движутся с бесконечно большими скоростями. Как показано в книге [1], бесконечно большие мгновенные скорости движения частиц примеси являются следствием принятия градиентной зависимости (1). Это же положение следует из статистического подхода к описанию диффузии.

Диффузионное уравнение Колмогорова [2] имеет вид (4), если координата x диффундирующей частицы является случайной марковской функцией времени. При таком предположении частица, находящаяся при $t = 0$ в точке $x = 0$ при $t > 0$ может быть обнаружена с ненулевой вероятностью в любой точке оси x.

Модель диффузии, основанная на законе Фика, успешно применяется для описания молекулярной диффузии в газах, так как хорошо соответствует реальному механизму процесса переноса молекул газа, являющегося примесью, в результате хаотического движения и столкновения молекул. Скорость теплового движения молекул, как правило, во много раз больше, чем скорость движения газа (в котором происходит диффузия) как сплошной среды. Поэтому бесконечно большие скорости движения диффундирующих частиц, следующие из закона Фика, являются неплохим приближением к реальности.

В случае турбулентной диффузии скорость хаотического движения жидких объемов, которое определяет квазидиффузионный процесс, имеет порядок стандарта пульсационной скорости; последний во много раз меньше осредненной скорости, характеризующей конвективный перенос согласно модели Рейнольдса — Буссинеска. Это предопределяет проблематичность использования градиентной зависимости Фика — Буссинеска для описания турбулентной диффузии [3].

Для более детального описания процесса диффузии используют модель диффузии с конечной скоростью (ДКС), предложенную В.А. Фоком [4] для описания диффузии фотонов на кристаллической решетке. Простейший вариант этой модели основан на предположении, что диффундирующие частицы имеют возможность перемещаться только с двумя фиксированными возможными скоростями — $u^{(1)}$ и $u^{(2)}$; в зависимости от того, с какой из этих скоростей движется частица, ее приписывают к первому или второму сорту и вводят парциальные концентрации частиц каждого сорта — ϑ_1 и ϑ_2. Очевидно, что физическая концентрация $\vartheta = \vartheta_1 + \vartheta_2$.

При изменении скорости частицы $u^{(1)}$ на $u^{(2)}$ (или наоборот), она изменяет свой сорт. Из условия консервативности примеси для каждой парциальной концентрации выводится дифференциальное уравнение:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \vartheta_1}{\partial t} + u^{(1)} \frac{\partial \vartheta_1}{\partial x} = \omega\left(\vartheta_2 - \vartheta_1\right); \\ \frac{\partial \vartheta_2}{\partial t} + u^{(2)} \frac{\partial \vartheta_2}{\partial x} = \omega\left(\vartheta_1 - \vartheta_2\right), \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

где ω — частота (количество за единицу времени) изменения скорости частиц.

При статистическом описании диффузии уравнения Колмогорова имеют вид (4), если предположить, что координаты частицы x и номера возможной скорости образуют непрерывно-дискретный марковский процесс $[x(t), n(t)]$, где n — номер возможной скорости; $n = 1, 2$.

В случае диффузии фотонов [4] $u^{(1)} = c$, $u^{(2)} = -c$, где c — скорость света, а $\omega = a/c$, где a — характерное расстояние свободного пробега фотона между столкновениями с молекулами, образующими кристаллическую решетку. В случае молекулярной диффузии в газах $u^{(1)} = -u^{(2)} = u$, где u — характерная скорость теплового движения молекул газа, $\omega = u/\lambda$, где λ — эффективная длина свободного пробега молекул.

Систему уравнений (6) можно преобразовать и представить в виде одного уравнения для $\vartheta = \vartheta_1 + \vartheta_2$:

$$\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial t^2} + 2\omega \frac{\partial \vartheta}{\partial t} = u^2 \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2}. \qquad (7)$$

Если положить $\chi = u^2/2\omega$, то решение задачи Коши для уравнения (7) при больших значениях t мало отличаются от решения уравнения (4); при малых значениях t решение уравнения (7) плохо соответствует экспериментальным данным. Поэтому, а также вследствие трудностей, связанных с численной реализацией решения, модель ДКС в простейшем варианте не получила широкого применения, несмотря на то, что уравнение (7) относится к гиперболическому типу и позволяет установить границы области, занятой примесью, что невозможно при использовании уравнения (4). Отметим, что уравнение (4) можно рассматривать как предельный случай уравнения (7), если $u \to \infty$ и $\omega \to \infty$ так, что $u^2/2\omega \to \chi$. Это обстоятельство позволяет представить реализацию градиентной зависимости (1) следующим образом. Диффундирующая частица (молекула газа, являющегося примесью), перемещаясь с бесконечно большой

скоростью и изменяя скорость с бесконечно большой частотой, мгновенно обегает окрестность точки, в которой она находится, и, сталкиваясь с однородными ей частицами (молекулами диффундирующего газа), «выясняет», с какой стороны этих молекул больше, а с какой меньше, и постепенно смещается (диффундирует) в ту сторону, где она испытывает меньше столкновений.

Модель ДКС оказывается эффективной при описании турбулентной диффузии, в особенности, когда примесью являются частицы, оседающие под действием силы тяжести [2].

Ввиду того, что направление движения для диффундирующей частицы (или скорость, с которой она начинает двигаться) в момент времени t зависит от того, в каком направлении или с какой скоростью эта частица двигалась до момента t, модель ДКС рассматривается как модель движения диффундирующих частиц с «памятью».

Теплоперенос

Распространение тепла с конечной скоростью было впервые рассмотрено А.В. Лыковым [5, 6].

В уравнение баланса тепла

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c_p \rho} \operatorname{div} \mathbf{q}, \tag{8}$$

где T — температура, c_p — удельная изобарная теплоемкость, ρ — плотность среды, $\mathbf{q}$ — плотность потока тепла, А.В. Лыков вместо закона Фурье

$$\mathbf{q} = -\lambda \operatorname{grad} T, \tag{9}$$

где λ — коэффициент теплопроводности, подставил зависимость

$$\mathbf{q} = -\lambda_r \operatorname{grad} T - \tau_r \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t}, \tag{10}$$

где λ_r — коэффициент теплопроводности, необязательно совпадающий с λ; τ_r — время релаксации.

Эту зависимость (10) называют обобщенным законом Фурье. В результате уравнение теплопереноса приобретает вид:

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\lambda_r}{w_r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \lambda_r \Delta T, \tag{11}$$

где $w_r^2 = \dfrac{\lambda_r}{c_p \rho \tau_r}$, а скорость распространения тепла в среде $a = w_r \left(\tau_r\right)^{-1/2}$.

Вопросы об эффектах, появляющихся при учете конечной скорости распространения тепла, обстоятельно изложены в монографии [7].

Формула (10) обобщенного закона Фурье, как нам представляется, становится более понятной, если представить $\mathbf{q} = \mathbf{q}(t)$ в виде ряда Тэйлора по малому параметру τ_r и предположить, что градиент температуры определяет поток тепла не мгновенно, а с запаздыванием:

$$\mathbf{q}(t+\tau_r) = \mathbf{q}(t) + \tau_r \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{1}{2}\tau_r^2 \frac{\partial^2 \mathbf{q}}{\partial t^2} + \ldots =$$

$$= -\lambda_r \operatorname{grad} T. \tag{12}$$

Оставляя только два члена ряда из зависимости (12), получим формулу (10).

Отметим, что уравнение диффузии (4) также можно обобщить, используя вместо (1) обобщенную зависимость

$$\mathbf{S} = -\chi \operatorname{grad} \vartheta - \tau_r \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t}. \tag{13}$$

В этом случае уравнение (4) приобретает форму

$$\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau_r}\frac{\partial \vartheta}{\partial t} - \frac{\chi}{\tau_r}\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} = 0, \tag{14}$$

которая совпадает с уравнением (7), если положить $\tau_r = 1/2\omega$, $\chi = u^2 \tau_r$.

Гидродинамика

Закон Ньютона для вязких напряжений в частном случае сдвигового течения вдоль оси x в плоскости (x, z) представим в виде (7):

$$p_{zx} = \nu \frac{\partial \rho u_x}{\partial z}, \tag{15}$$

где ν — кинематический коэффициент вязкости, p_{xz} — продольное касательное напряжение, u_x — проекция скорости на ось x.

При такой записи p_{zx} можно интерпретировать как плотность потока количества движения в направлении оси z, а зависимость (15) приобретает содержание, аналогичное зависимостям (1) и (9).

Чтобы получить уравнение движения вязкой жидкости (уравнения Навье — Стокса), в уравнение движения сплошной среды в напряжениях

$$\rho \frac{\mathrm{D}\mathbf{u}}{\mathrm{D}t} = \rho \mathbf{f} + \operatorname{Div} \Pi, \tag{16}$$

где $\mathbf{u}$ — скорость жидкости, $\mathbf{f}$ — плотность внешней массовой силы, Π — тензор напряжений,

$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}$ — субстанциальная производная, подставим градиентную зависимость для вязких напряжений (обобщенный закон Ньютона):

$$\Pi = 2\eta\dot{S} - pE, \qquad (17)$$

где η — динамический коэффициент вязкости, $\dot{S}$ — тензор скорости деформации, p — давление, E — единичный тензор.

Уравнение Навье — Стокса

$$\rho\frac{\mathrm{D}\mathbf{u}}{\mathrm{D}t} = \rho\mathbf{f} - \operatorname{grad} p + \eta\Delta\mathbf{u} \qquad (18)$$

относится к параболическому типу (по времени), и следовательно, согласно этому уравнению все возмущения, вносимые в среду, распространяются в ней мгновенно. В реальных физических телах скорость распространения возмущений (например импульса силы, приложенной к этому телу) конечна. Для того, чтобы ввести в модель несжимаемой жидкости ограниченную скорость распространения возмущений, наиболее естественно предположить, что возмущения в ней передаются благодаря упругим свойствам среды. Поэтому, чтобы получить уравнения механики несжимаемой жидкости, согласно которым возмущения распространяются с конечной скоростью, наряду с вязкими следует учесть также и упругие свойства жидкости. Наиболее простым реологическим законом, учитывающим упругие и вязкие свойства жидкости, является закон Максвелла, согласно которому

$$\dot{S} = \dot{S}_{\text{в}} + \dot{S}_{\text{у}}, \qquad (19)$$

где $\dot{S}_{\text{в}}$ и $\dot{S}_{\text{у}}$ — тензоры скорости деформации, обусловленной соответственно вязкими и упругими силами. Отметим, что для упрощения записи точка над буквой означает субстанциальную производную $\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}$.

Согласно обобщенному закону Ньютона (17)

$$\dot{S}_{\text{в}} = \frac{1}{2\eta}\left(\Pi + pE\right). \qquad (20)$$

Дифференцируя по времени закон Гука

$$S_{\text{у}} = \frac{1}{2\mu}\left(\Pi - \frac{\lambda}{3\lambda + 2\mu}pE\right), \qquad (21)$$

где $S_{\text{у}}$ — тензор деформации; λ, μ — коэффициенты Ляме, найдем

$$\dot{S}_{\text{у}} = \frac{1}{2\mu}\left(\dot{\Pi} - \frac{\lambda}{3\lambda + 2\mu}\dot{p}E\right). \qquad (22)$$

Подставляя выражения (20) и (22) в уравнение (19) и затем (19) в (17), получим:

$$\Pi = -\frac{\eta}{\mu}\dot{\Pi} + 2\eta\dot{S} + \left(\frac{\eta\lambda}{\mu\left(3\lambda + 2\mu\right)}\dot{p} - p\right)E. \qquad (23)$$

Совокупность равенств (16), (23) и условия несжимаемости $\operatorname{div}\mathbf{u} = 0$ образует систему десяти уравнений с десятью неизвестными: три проекции скорости, шесть компонент тензора напряжения и давление. Исключить компоненты напряжений, как в случае вязкой жидкости, удалось, сделав предположение о пренебрежимой малости конвективных составляющих субстанциальной производной, т. е. полагая $\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \approx \frac{\partial}{\partial t}$.

Подставив равенство (23) в уравнение (16), исключим $\dot{\Pi}$ с помощью уравнения (16), продифференцировав все его члены по времени. В результате получим уравнение

$$\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2} + \frac{\mu}{\eta}\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\mu}{\eta}\left(\mathbf{f} + \frac{2\eta}{3\mu}\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial t}\right) -$$

$$-\frac{\mu}{\eta\rho}\operatorname{grad}\left(p - \frac{\eta\lambda}{\mu\left(3\lambda + 2\mu\right)}\frac{\partial p}{\partial t}\right) + \frac{\mu}{\rho}\Delta\mathbf{u}. \qquad (24)$$

Уравнение (22) относится к гиперболическому типу, скорость распространения возмущений в среде согласно этому уравнению

$$a = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \qquad (25)$$

Время релаксации среды, подчиняющейся реологическому закону Максвелла,

$$\tau_{\text{р}} = \frac{\eta}{\mu}; \qquad (26)$$

Для жидкостей $\tau_{\text{р}} \approx 10^{-12}$ с (см. например [8, 9]). При этом из (26) и (25) получим $a \approx$ 1000 м/с, т. е. напряженное состояние распространяется в жидкости со скоростью, имеющей порядок скорости звука.

Как показано в монографии [10], уравнения механики для вязкоупругой среды, подчиняющиеся закону Максвелла, идентичны уравнениям для упругой среды. Уравнения для трансформант

Лапласа по времени отличаются лишь коэффициентами, константы которых характеризуют упругие и вязкие свойства физического тела и параметры преобразования Лапласа. Однако эти результаты относятся к уравнениям для решения квазистатических задач.

Дифференциальное уравнение гиперболического типа, выражающее закон изменения количества движения для вязкоупругих сред, получено в работе [11]; однако искомой величиной здесь является не скорость среды, а перемещение. Как и в данной статье, при выводе этого уравнения конвективная составляющая субстанциальной производной из рассмотрения исключается. Гиперболическое уравнение гидродинамики в форме (24) в доступных литературных источниках не найдено.

Итак, нами показано, что уравнения гиперболического типа, описывающие нестационарные процессы переноса, как правило, эффективны для описания особенностей кратковременных (начальных или переходных) процессов, соизмеримых по длительности со временем релаксации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Монин, А.С.** Статистическая гидромеханика [Текст]: В 2 ч. Ч. 1. / А.С. Монин, А.М. Яглом.— М.: Наука, 1965.— 640 с.
2. **Баруча-Рид, А.Т.** Элементы теории марковских процессов и их приложения [Текст] / А.Т. Баруча-Рид.— М.: Наука, 1969.— 511 с.
3. **Гиргидов, А.Д.** Турбулентная диффузия с конечной скоростью [Текст] / А.Д. Гиргидов.— СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1996.— 260 с.
4. **Фок, В.А.** Решение одной задачи теории диффузии методом конечных разностей и приложение его к диффузии света [Текст] / В.А. Фок // Труды Государственного оптического института, 1926.— Т. 4. № 4.— С. 1–32.
5. **Лыков, А.В.** Теплопроводность и диффузия [Текст] / А.В. Лыков.— М.: Гизлегпром,1941.— 252 с.
6. **Лыков, А.В.** Теория теплопроводности [Текст] / А.В. Лыков.— М.: Высшая школа, 1967.— 599 с.
7. **Машков, А.Г.** Волновые явления теплопроводности. Системно-структурный подход. [Текст] / А.Г. Машков, В.А. Бубнов, С.Ю. Бубнов.—Мн.: Навука і тэхніка, 1993.— 279 с.
8. **Лойцянский, Л.Г.** Механика жидкости и газа [Текст] / Л.Г. Лойцянский.— М.: Наука, 1978.— 736 с.
9. **Годунов, С.К.** Уравнение математической физики [Текст] / С.К. Годунов.— М.: Наука, 1971.— 416 с.
10. **Боли, Б.** Теория температурных напряжений [Текст] / Б. Боли, Дж. Уэйнер.— М.: Мир, 1964.— 517 с.
11. **Страхович, К.И.** Гидро- и газодинамика [Текст] / К.И. Страхович.— М.: Наука,1980.— 304 с.

УДК 629.7.015:533.6

Е.И. Соколов

ОЦЕНКА ТЯГОВОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОПЕЛ МИКРОРАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Современные тенденции развития техники свидетельствуют о неуклонном уменьшении габаритов и веса многих технических систем. Этот процесс коснулся и космической техники. В последние годы появились проекты спутников массой от 10 кг (наноспутники) до 1 кг (пикоспутники) [1]. Двигатели ориентации и маневра таких спутников должны иметь малые габариты и тяги (менее 1 Н). Далее будем называть такие двигатели микроракетными (МРД).

Важнейшим элементом МРД является сопло, представляющее собой сужающийся-расширяющийся канал, преобразующий запасенную энергию рабочего тела в кинетическую энергию потока газа. На рис. 1, *а* приведен общий вид типичного МРД [1], дающий представление о его характерных размерах. В общей длине МРД порядка 1 мм сопло составляет примерно половину. Диаметр критического сечения равен, как правило, нескольким сотням или десяткам микрон.

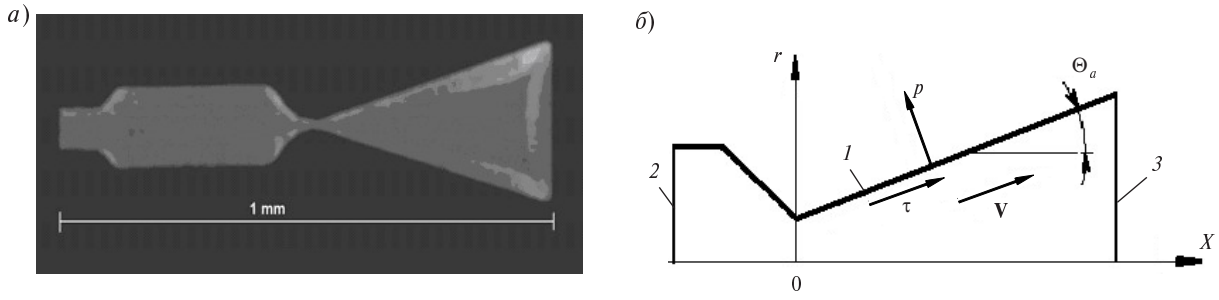


Рис. 1. Постановка расчетной задачи: *а* — общий вид МРД; *б* — геометрическая расчетная схема; *1* — стенка сопла, *2* — входное сечение, *3* — срез сопла; *X*, *r* — координаты, *p*, τ — нормальное и касательное напряжения, **V** — скорость газа, Θ_a — угол полураствора

Охарактеризуем сопло ракетного двигателя (РД) параметрами в его выходном сечении: числом Маха M_a; углом полураствора Θ_a; показателем адиабаты истекающего газа $\gamma = \text{const}$, а также числом Рейнольдса

$$\mathrm{Re}_* = \frac{\rho_0 U_* r_*}{\mu(T_0)}.$$

Здесь и далее нижним индексом (*) обозначены параметры в критическом сечении сопла, нижним нулевым индексом — параметры торможения; для газодинамических функций используются стандартные обозначения. С помощью соотношений изоэнтропического течения газа можно легко показать, что при фиксированной температуре торможения T_0 величина Re_* пропорциональна $p_0 r_*$.

Размер сопел двигателей современных ракетносителей космических аппаратов составляет единицы метра, числа $M_a \approx 5$ и $\mathrm{Re}_* \approx 10^8$. Для таких сопел разработаны эффективные методы расчета, основанные на математической модели течения невязкой, химически реагирующей смеси газов [2]. Пограничный слой в расширяющейся части сопла является турбулентным, а его влияние на тягу РД учитывается поправками. Современные спутники массой несколько сотен килограмм имеют двигатели с характерным размером менее 0,5 м, для которых $\mathrm{Re}_* \approx 10^6$. Пограничный слой в расширяющейся части сопла является ламинарным. Дальнейшее уменьшение размеров сопла РД, сопровождающееся также уменьшением величины p_0, приводит к уменьшению числа Re_* до значений порядка 10^3. Расчет таких сопел производится как с применением уравнений Навье — Стокса [3], так и метода Монте-Карло динамики разреженного газа [4].

Вместе с тем течение в соплах с характерным числом $\mathrm{Re}_* \approx 10^5$ было предметом интенсивных исследований в 1960–1970-е гг. в связи с проектированием гиперзвуковых аэродинамических труб (АДТ). При существенном отличии от сопел РД по числу Маха (значения M_a от 12 до 36,6 для гелиевой АДТ) эти сопла имеют ламинарный пограничный слой в расширяющейся части [5]. Указанное свойство позволяет использовать разработанные ранее методы расчета сопел АДТ для анализа течения в соплах МРД с параметрами, соответствующими формированию в них ламинарного пограничного слоя. Ниже такой подход применяется для оценки тяговой эффективности осесимметричного конического сопла при уменьшении его геометрических размеров и давления p_0 при нулевом противодавлении $p_н$, т. е. в космических условиях.

В общем случае полная сила, действующая на сверхзвуковую часть осесимметричного сопла заданной степени расширения, есть интеграл напряжений, действующих на его боковую поверхность *S*. Вклад расширяющейся части в тягу определяется как *X*-компонента этой силы (рис. 1, *б*):

$$N = \int_S \left(p \sin\Theta - \tau\cos\Theta \right) dS = \\ = 2\pi \int_y r(p - \tau \mathrm{ctg}\Theta)\, dr, \qquad (1)$$

где *p*, τ — нормальное и касательное напряжения в текущей точке, $\Theta(x)$ — угол наклона стенки к оси *X*.

Классическая вариационная задача построения сверхзвуковой части сопла состоит в подборе формы его стенки, доставляющей максимум функционала (1) при зачастую противоречивых

ограничениях. Опыт решения таких задач, накопленный в процессе развития ракетной техники и обобщенный в виде законченной теории, изложен в ряде монографий. Краткое изложение теории оптимального профилирования сопел и библиографию по этому вопросу можно найти в книге [6]. Следует, однако, подчеркнуть, что все подходы к профилированию используют только первое слагаемое в выражении (1). Иными словами, в расчетах принимается во внимание только вклад давления в формирование тяги сверхзвуковой части сопла. Вклад трения учитывается эмпирическими поправками. Такой подход полностью оправдан для сопел метрового и дециметрового размерного ряда, где вклад трения в формирование тяги пренебрежимо мал.

Для определения полной тяги сопла используем закон изменения количества движения, согласно которому тяга при $p_н = 0$ определяется путем вычисления интеграла в выходном сечении, называемом срезом сопла:

$$F = \int_{S_a} (\rho U^2 + p)_a \, dS, \qquad (2)$$

где S_a — площадь среза сопла; ρ, U, p — плотность, скорость и давление на срезе.

Оценим тягу сверхзвуковой части сопла при истечении в вакуум ($p_н = 0$) идеального совершенного газа. Считая течение при $\Theta << 1$ одномерным, преобразуем выражение (2) к следующему виду [6]:

$$F = \frac{\gamma+1}{2\gamma} \dot{m} a_* z(\lambda_a) \cos^2 \frac{\Theta_a}{2}, \qquad (3)$$

где $\lambda_a = U_a / a_*$ — коэффициент скорости в сечении S_a, $z(\lambda) = \lambda + \lambda^{-1}$ — табличная функция, $\dot{m}$ — секундный расход рабочего тела через сопло.

Последнее слагаемое представляет собой поправку на неравномерность потока в выходном сечении. Формула (3) показывает, что тяга сопла с фиксированными температурой и давлением торможения увеличивается с ростом z. Для сопла без расширяющейся сверхзвуковой части, выходное сечение которого соответствует $x = 0$ (рис. 1, *б*), тяга выражается формулой (3) при $\lambda_a = 1 (z_a = 2)$:

$$F_* = \frac{\gamma+1}{2\gamma} \dot{m} a_* . \qquad (4)$$

Охарактеризуем прирост тяги МРД за счет сверхзвуковой части сопла.

Для этого отнесем прирост тяги, создаваемой ею, к тяге сопла при $\lambda_a = 1$:

$$P = \frac{F - F_*}{F_*} = \frac{F}{F_*} - 1. \qquad (5)$$

Из формул (3), (4) легко получить формулу для величины прироста тяги МРД:

$$P = \left(\frac{z_a}{2} - 1 \right) \cos^2 \frac{\Theta_a}{2}. \qquad (6)$$

Данная формула и будет служить основой дальнейшего анализа. С ее помощью можно рассчитать максимально возможный прирост тяги, который дало бы сопло бесконечной длины, расширяющее идеальный газ до $p_a = 0$ и $\lambda_a = \lambda_m = \sqrt{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}$. В таблице приведены значения величины $P_m = P(\lambda_m)$ для разных газов при $\Theta_a = 0$.

Зависимость максимально возможного прироста тяги МРД от показателя адиабаты истекающего газа

γ	1,67	1,40	1,33	1,25	1,13
P_m	0,2467	0,4256	0,5128	0,6616	1,1387

Для любой реальной степени расширения сопла S_a / S_* величина $\lambda_a < \lambda_m$. На рис. 2 приведены графики прироста тяги P конических сопел для идеального газа ($\gamma = 1{,}40$) и двух значений Θ_a (пунктирные кривые). С их помощью можно оценить прирост тяги произвольной сверхзвуковой части сопла.

Подчеркнем, что область значений P, лежащих выше пунктирных кривых на рис. 2, недостижима, так как значения, задаваемые формулой (6), являются максимально возможными. Очевидно, при любом конечном числе Re_* тяга такого сопла, расширяющего поток до величины λ_m, будет, согласно выражению (1), отрицательна в силу неограниченного роста второго слагаемого за счет бесконечного увеличения боковой поверхности. В то же время из формулы (5) легко увидеть, что с уменьшением P вклад сужающейся части сопла в полную силу тяги возрастает.

Рассмотрим влияние уменьшения линейного масштаба на эффективность сверхзвуковой части сопел. Будем исходить из того, что в диапазоне тяг, характерных для МРД, пограничный

слой в расширяющейся части сопла является ламинарным [1].

На рис. 1, *б* изображены нормальное и касательное напряжения p и τ, действующие на элемент стенки сверхзвуковой части сопла. Осевая составляющая полной силы, действующая на сверхзвуковую часть сопла заданной степени расширения, определяется интегралом (1) и в точности равна $F - F_*$. Для сопоставления ее со значениями, рассчитанными по формуле (6), необходимо полученную величину отнести к тяге F_*, выраженной формулой (4).

В данной работе величины p и τ, необходимые для расчета интеграла (1), определяются в следующем порядке.

Исходными данными являются форма сопла (в данном случае коническая, с углом Θ_a), параметры торможения в камере МРД, размеры критического и выходного сечений, либо число Маха на срезе сопла. Течение вне пограничного слоя сопла считается одномерным изоэнтропическим, рабочее тело во всем сопле — совершенным газом с показателем адиабаты $\gamma = \text{const}$. Перечисленные данные используются для расчета толщины вытеснения пограничного слоя по длине сопла и коррекции его формы путем «перенесения внутрь» стенки на величину $\delta^*(l)$ [5]:

$$\frac{\delta^*}{r_*} = \frac{F_1(\bar{H})F_2(\mathrm{M})\sqrt{\bar{X}}}{\sqrt{\sqrt{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}\mathrm{Re}_*}}, \qquad (6)$$

где $F_1(\bar{H}) = T_0/T_w$ — температурный фактор стенки сопла; $\bar{X} = X/r_*$;

$$F_2(\mathrm{M}) = 1{,}36\,\mathrm{M}^2 - 1{,}10\,\mathrm{M} - 0{,}26.$$

Распределение чисел Маха в изоэнтропическом ядре пересчитывается затем по эффективной площади сопла. Полученные значения $\mathrm{M}(l)$ вновь используются в формуле (6). Данный процесс, предложенный в статье [5], сходится за 3–4 итерации. Окончательные значения $\mathrm{M}(\lambda)$ используются для вычисления давления в формуле (1) по изоэнтропической функции $\pi(\mathrm{M})$. Величина τ в этой формуле вычисляется в предположении локальной автомодельности, согласно которому напряжение трения в рассматриваемой точке определяется только параметрами течения в этой точке и не зависит от характера их изменения вдоль внешней границы пограничного

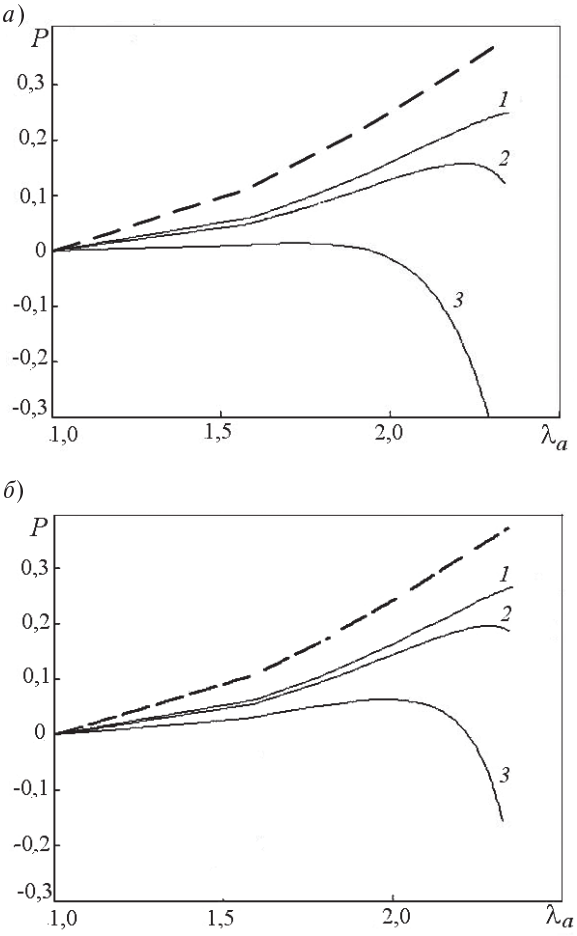


Рис. 2. Прирост тяги конических сопел МРД в зависимости от коэффициента скорости в их сечении для двух значений угла Θ_a, град: 10 (*а*) и 20 (*б*), а также различных значений диаметра d_*, мм: 1(*1*), 0,1(*2*), 0,01 (*3*).

Параметры торможения фиксированы: $p_0 = 2\cdot10^5$ Па, $T_0 = 1500$ К, $\gamma = 1{,}40$.

Пунктирные кривые соответствуют течению идеального газа

слоя. Такое предположение оправдано для сопловых течений и широко используется в инженерной практике.

Определим τ через местный коэффициент трения, рассчитываемый по известной формуле Янга для плоской пластины в потоке сжимаемого газа [7]:

$$\tau_w\left(\frac{\rho_\infty u_\infty^2}{2}\right)^{-1} = 0{,}664\times$$

$$\times\left[0{,}45+0{,}55\frac{T_w}{T_\infty}+0{,}09(\gamma-1)\mathrm{M}_\infty^2\sqrt{\mathrm{Pr}}\right]^{\frac{\omega-1}{2}}\times$$

$$\times\left(\mathrm{Re}_l\right)^{-0,5},$$

где $\mathrm{Re}_l = \dfrac{\rho_\infty u_\infty l}{\mu_\infty}$ — местное число Рейнольдса; l — длина образующей сверхзвуковой части сопла; T_w — температура стенки.

Все параметры с индексом «∞» определяются по значению числа M_l на внешней границе пограничного слоя, т. е. в изоэнтропическом ядре течения по соплу. В итоге для расчета интеграла (1) используется следующее соотношение:

$$N(i) = N(i-1) + \pi\left[p(i) - \tau(i)\mathrm{ctg}\Theta_a\right]\times$$

$$\times\left[r^2(i) - r^2(i-1)\right]. \qquad (7)$$

В зависимости от длины сверхзвуковой части для расчета использовалось 30–50 сечений по соплу. Вязкость газа принята зависящей от температуры как $\mu/\mu_0 = \left(T/T_0\right)^\omega$.

Проиллюстрируем эффект уменьшения масштаба сопла МРД на прирост тяги конкретными примерами. Сплошные кривые на рис. 2 соответствуют значениям P, рассчитанным по формулам (7) и (4) для конических сопел при фиксированных параметрах торможения и различных значениях d_*. Число Re_* изменялось в пределах $1{,}23\cdot10^5$–$1{,}23\cdot10^3$, температура стенки сопла $T_w = 300$ K.

Как и следовало ожидать, все кривые при конечных Re_* расположены ниже пунктирных кривых, соответствующих течению идеального газа (см. рис. 2). Если кривые *1*, соответствующие $d_* = 1$ мм, монотонно возрастают, то кривые *2* и *3* имеют максимум. Такой характер изменения тяги с увеличением длины сверхзвуковой части объясняется тем, что с уменьшением Re_l вместе с Re_* при прочих равных условиях увеличивается вклад напряжения трения в общую силу, действующую на стенку сопла, и второе слагаемое в выражении (1) начинает превалировать над первым. Особенно это заметно в сопле с $\Theta_a = 10^\circ$, где при $\mathrm{Re}_* = 1{,}23\cdot10^3$ сверхзвуковая часть сопла вообще не дает прироста тяги (кривая *3* на рис. 2, *а*). Данные на рис. 2 позволяют сделать вывод, что с уменьшением Re_* конические сопла с большим углом полураствора дают больший прирост тяги. Этот результат противоположен известным выводам для случая идеального газа, где сопло с $\Theta_a = 0^\circ$, как видно из формулы (6), дает наибольшую тягу. Кроме того, характер кривых *1–3* показывает, что для определенного числа Re_* существует оптимальная длина сверхзвуковой части, дающая наибольший прирост тяги, а при малых значениях Re_* целесообразно применять сужающиеся сопла без сверхзвуковой части.

Этот вывод подтверждают расчеты (рис. 3), проведенные для сопла с заданной степенью расширения $S_a/S_* = 200$ (число $\mathrm{M}_a = 8$) при тех же определяющих параметрах и числах Re_*, как на рис. 2 (обозначения те же).

Видно, что практически при всех рассмотренных значениях Re_* сопло с углом полураствора 20° дает больший прирост тяги, причем при наименьшем диаметре критического сечения существует четко выраженная оптимальная длина сверхзвуковой части, соответствующая геометрическому числу $\mathrm{M}_a = 2{,}57$.

Путем расчета функции $P(x)$ можно оценить эффективность различных видов топлива. Так, расчет прироста тяги сопла с параметрами: $d_a = 0{,}001$мм; $\Theta_a = 10^\circ$; $p_0 = 10^6$ Па; $T_0 = 1500$ K; $T_w = 300$ K дает результат, приведенный на рис. 4. При использовании в качестве рабочего тела азота или воздуха максимальное значение $P = 0{,}026$ достигается при $X = 2{,}8$, а при дальнейшем увеличении длины резко убывает. Для рабочего тела с $\gamma = 1{,}29$ и вязкостью, на порядок меньшей, чем вязкость азота, максимальное значение $P = 0{,}19$ заметно превосходит значение для азота и достигается при $X = 11$, однако максимум выражен не столь резко.

Такая оценка может послужить свидетельством в пользу более глубокого подхода к выбору рабочего тела с учетом заметного роста длины, а с нею и массы сопла с большей тягой.

Как известно, при изготовлении изделий микроразмерного ряда преобладают плоскостные технологии, которые могут быть использованы и для изготовления микросопел [1]. Произведем оценку эффективности такого сопла, пользуясь разработанным методом. Пусть сопло имеет квадратное выходное сечение, две наклонные и две параллельные стенки (рис. 3, *в*). На основе полученных ранее результатов угол наклона стенок $\Theta_a = 10^\circ$, остальные параметры примем теми же. Величина Re_* определялась по минимальному размеру (высоте) критического сечения. Очевидно, что параллельные стенки сопла не вносят вклада в создание тяги, а лишь уве-

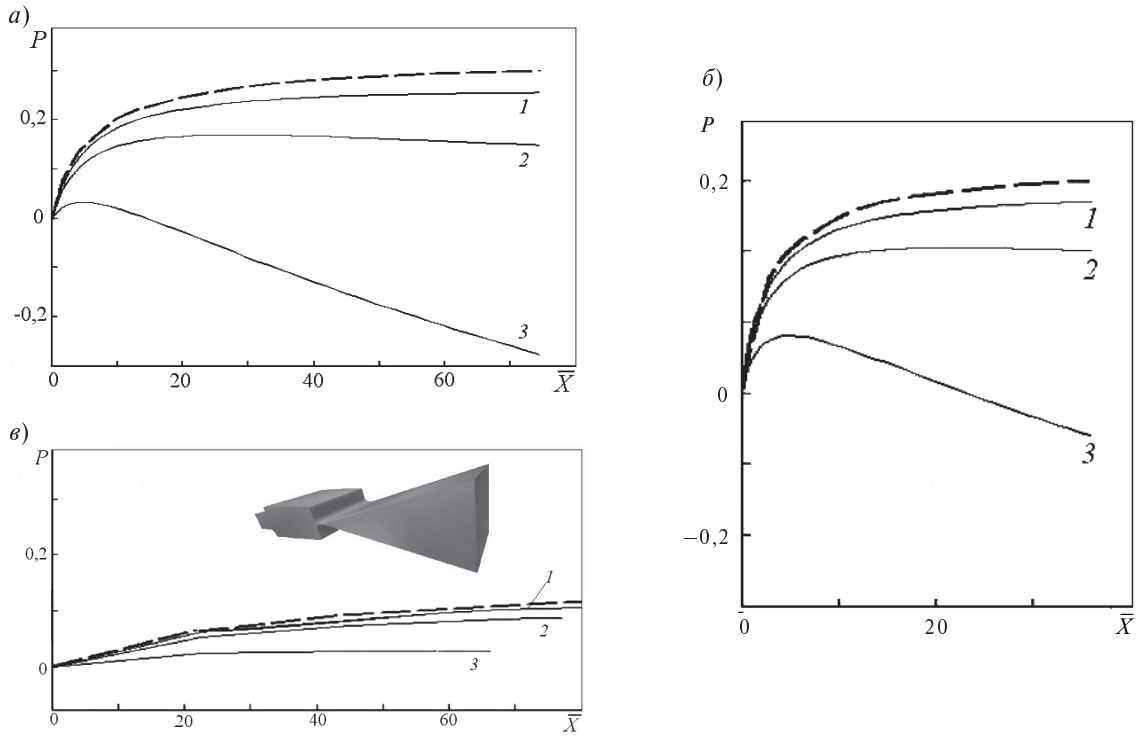


Рис. 3. Прирост тяги конических сопел (*а, б*) и сопла специальной формы (*в*) МРД в зависимости от безразмерной длины для двух значений угла Θ_a, град: 10 (*а*, *в*) и 20 (*б*), а также различных значений диаметра d_* при фиксированных значениях других параметров (соответствуют приведенным на рис. 2)

личивают общие потери на трение. Формула (1) примет в этом случае следующий вид:

$$N = \int_{S_1} \left(p\sin\Theta - \tau\cos\Theta \right) dS_1 - \int_{S_2} \left(\tau\cos\Theta \right) dS_2, \quad (8)$$

где S_1, S_2 — площади наклонных и параллельных стенок, соответственно.

При определении параметров газа в изоэнтропическом ядре толщина вытеснения пограничного слоя на параллельных стенках в рассчитываемом сечении принималась такой же, как и на наклонных. Вычисленное значение используется далее для определения величины *P*.

Результаты расчета, приведенные на рис. 3, *в*, свидетельствуют о весьма малом приращении тяги с увеличением длины сверхзвуковой части даже в случае идеального газа (пунктир). Расчеты, проведенные для сопла с квадратной формой критического сечения, свидетельствуют, что в исследованном диапазоне величин Re_* рост толщины пограничного слоя на параллельных стенках приводит к так называемому «запиранию» сопла. Этот эффект хорошо известен из опыта создания гиперзвуковых аэродинамических труб. При некоторой комбинации определяющих параметров увеличение толщины вытеснения пограничного слоя приводит к уменьшению эффективного сечения сопла, что в итоге ведет к немонотонному изменению параметров изоэнт-

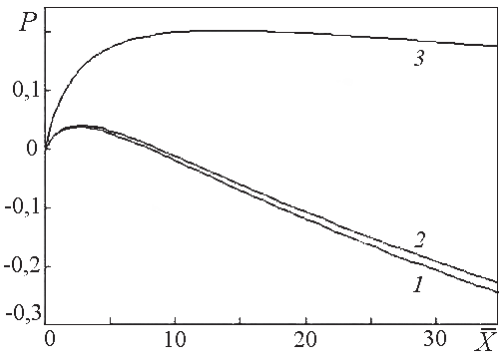


Рис. 4. Прирост тяги конических сопел МРД в зависимости от безразмерной длины для различных рабочих тел: воздуха (*1*), азота (*2*) и продуктов сгорания двухкомпонентного топлива (γ = 1,29) (*3*).

Расчетные параметры: d_* = 0,001 мм; Θ_a = 10°; $p_0 = 2\cdot10^6$ Па, , T_0 = 1500 K, T_w = 300 K

ропического ядра. Уменьшение числа M и скорости ведет в итоге к уменьшению количества движения в рассматриваемом сечении (см. формулу (2)) и, в итоге, к уменьшению параметра P до нуля.

Очевидно, если искомую функцию P представить в зависимости от площади боковой поверхности сверхзвуковой части сопла, то при малых значениях Re_* она будет иметь максимум, аналогичный наблюдаемому на рис. 2, 3. Поскольку в первом приближении вес сопла можно принять пропорциональным S, подобный расчет позволяет оценить параметры сопла наименьшего веса.

Укажем на ограничения предлагаемой модели.

Первое из них связано с корректностью применения одномерной модели течения в невязком ядре сопла при увеличении угла Θ_a. Представляется, что расширение диапазона допустимых углов полураствора сопла может быть достигнуто переходом от модели цилиндрического канала к модели сферического сверхзвукового источника.

Второе ограничение связано с относительной площадью загромождения поперечного сечения расширяющейся части, диктующего необходимость перехода от модели пограничного слоя к полным уравнениям Навье — Стокса. Так, если принять, что пограничный слой должен занимать не более половины сечения, то очевидно отсюда следует ограничение $\delta^* < 0,41 r_w$.

Можно предположить, что при больших Θ_a пограничный слой не займет заметной части поперечного сечения потока. В этом случае становится необходимым контроль нарушения модели сплошной среды. Для этого необходимо вычислить число Кнудсена Kn как отношение длины свободного пробега, определяемого по числу Маха на границе пограничного слоя в рассматриваемом сечении, к известной величине δ^*. Для рассматриваемого класса течений можно принять, что значение $\mathrm{Kn} < 0,1$.

Применение предложенных критериев к результатам, представленным на рис. 3, подтвердило корректность используемой модели ламинарного пограничного слоя. Что касается применимости этой модели для расчета сопел бесконечной длины, то граница ее применимости в масштабе рис. 2 практически сливается с величиной λ_m.

Сопоставим полученные результаты с расчетами течений в микросоплах, использующих более строгие модели. Численный расчет течения в микросоплах при значениях Re_* от 15 до 800 и Θ_a от 10 до 50° с использованием уравнений Навье — Стокса [3] показал, что наибольшая тяга достигается при угле Θ_a около 30°, когда потери на уменьшение потерь на трение «уравновешивает» увеличение потерь на неравномерность потока. Расчет тяги сопла МРД методом Монте-Карло при $\mathrm{Re}_* = 60$ показал заметный ее рост при увеличении Θ_a от 20 до 40°. Зафиксировано также увеличение тяги сопла с уменьшением длины сверхзвуковой части [4].

Подводя итог, отметим, что в настоящее время численные расчеты, подобные отмеченным, не составляют труда. Тем не менее, выявленные с помощью предложенной модели закономерности качественного характера отражают основные особенности рассматриваемого течения, а элементарный характер вычислений делает метод удобным инструментом для применения на предварительной стадии разработки сопел МРД.

Настоящее исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 11-08-00422-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Micci, M.M.** Micropropulsion for small spacecraft. [Text]/ M.M. Micci, A.D. Ketsdever // Progress in Astronautics and Aeronautics. Vol. 187. AIAA, Reston, VA, 2000.— 495 p.

2. **Дорофеев, А.А.** Основы теории тепловых ракетных двигателей. Теория, расчет и проектирование [Текст] / А.А. Дорофеев.— 2-е изд.— М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009.— 463 с.

3. **Louisos, W.F.** Viscous effects on performance of two-dimensional supersonic linear micronozzles [Text] / W.F. Louisos, D.L. Hitt //Journal of Spacecraft and Rockets.— 2008.— Vol. 45.— No. 4.— P. 706–715.

4. **Ketsdever, A.D.** Experimental and numerical determination of micropropulsion device efficiencies at low Reynolds numbers [Text] / A.D. Ketsdever, M.T. Clabough, S.F. Gimelshein [et al.] // AIAA Journal.— 2005.— Vol. 43.— No. 3.— P. 633–641.

5. **Быркин, А.П.** О расчете течения газа в гиперзвуковом сопле с учетом влияния вязкости

(прямая задача) [Текст] / А.П. Быркин, И.И. Межиров // Уч. зап. ЦАГИ.— 1971.— Т. 2.— № 1.— С. 105–113.

6. **Стернин, Л.Е.** Основы газовой динамики [Текст] / Л.Е. Стернин.— М.: Изд-во МАИ, 1998.— 236 с.

7. **Абрамович, Г.Н.** Прикладная газовая динамика [Текст] / Г.Н. Абрамович.— М.: Наука, 1969.— 824 с.

УДК 539.4.019.1

А.П. Рыбаков, О.Ю. Вшивков

УДЕЛЬНЫЙ МЕХАНИЧЕСКИЙ ИМПУЛЬС УДАРНОЙ ВОЛНЫ КАК ФИЗИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР НАГРУЖЕНИЯ

Поведение конденсированных тел и в частности их разрушение имеет свои особенности при ударном нагружении. Это обусловлено волновым характером происходящих процессов, течений, реализующихся под воздействием нагрузки длительностью в доли микросекунды. Такие длительности можно осуществить при различных способах нагружения. Практически осуществимыми в настоящее время можно считать следующие виды воздействия на поверхность преграды-мишени (позволяют достигать давления в мишени более 10 ГПа): удар пластиной; взрыв листового заряда взрывчатого вещества; интенсивный поток излучения (например электромагнитного излучения оптического квантового генератора, СВЧ-излучения). Кроме длительностей, оказываются близкими и амплитуды импульсов нагрузки. При нормальном падении детонационной волны на контактную поверхность между зарядом взрывчатого вещества и преградой начальная амплитуда ударной волны, идущей в преграду, имеет значение 20–30 ГПа для жидкостей и многих твердых тел и 40–70 ГПа для металлов. При взрыве листового заряда взрывчатого вещества в режиме скользящей детонации значения амплитуды ударной волны уменьшаются примерно в полтора раза [1, 2] вследствие поворота контактной границы на несколько градусов. Начальные давления на нагружаемой поверхности лежат в диапазоне десятков гигапаскалей. При ударе по поверхности преграды пластиной со скоростью около 1 км/с давления на нагружаемой поверхности имеют значения в десятки гигапаскалей. Длительности ударных волн, идущих в преграду, можно оценить по времени двойного пробега волны либо по толщине листового заряда взрывчатого вещества, либо по толщине пластины ударника. Характерное значение времени двойной циркуляции волны по толщине листа или пластины составляет десятые доли микросекунды, т. е. 10^{-7} с. При воздействии потока излучения на поверхность преграды, непрозрачной для этого излучения, вследствие испарения слоя вещества с нагружаемой поверхности и его разлета преграда получает механический импульс отдачи [3]. Начальные значения амплитуды ударно-волнового импульса, идущего в преграду, составляют десятки гигапаскалей, а длительности — десятые доли микросекунды. Таким образом, при рассмотренных способах нагружения начальные параметры ударно-волновых нагрузок близки по своим значениям.

В силу вышесказанного при описании поведения преграды в условиях ударного нагружения можно абстрагироваться от способа нагружения преграды, то есть от способа генерирования ударной волны, и рассматривать процессы, происходящие в преграде под воздействием такой нагрузки. Незначительный разброс в начальных амплитудах и длительностях можно скорректировать, если ввести в рассмотрение в качестве критерия нагрузки удельное количество движения ударной волны (удельный механический импульс) [4]:

$$J = \int_0^{\tau} P(t)dt, \qquad (1)$$

где P — давление; t — время; τ — длительность ударной волны.

Для начальных параметров рассматриваемых ударных волн характерное значение удельного количества движения равно 10^3 кг/(м · с).

В процессе распространения ударной волны неизбежно происходит ее трансформация даже при отсутствии диссипации энергии в преграде: уменьшается ее амплитуда и возрастает длительность; тогда говорят о затухании этой волны. Однако удельное количество движения остается постоянным. В частности, при треугольной форме профиля волны справедливо равенство

$$P_0\tau_0 = P\tau. \qquad (2)$$

Изменение амплитуды со временем либо с пройденным расстоянием обусловлено законом затухания. Курант и Фридрихс [5] дают для любой Римановой волны следующие соотношения:

$$P \approx x^{-1/2};$$

$$P \approx t^{-1/2}. \qquad (3)$$

Ландау, рассматривая судьбу акустического импульса, нашел, что закон (3) является предельным законом затухания любой ударной волны при достаточно большом времени ее распространения [6]. Справедливость закона (3) подтверждена и для некоторых частных случаев: при взрыве блока взрывчатого вещества на поверхности преграды [7]; при взрыве листового заряда взрывчатого вещества на поверхности преграды [8]; при ударе пластиной [9–11]; а также в некоторых других случаях [12–14]. На ранней стадии процесса распространения ударной волны ее затухание более сильное, и оно еще более усиливается вследствие существования упругих негидродинамических волн разгрузки [15]. Из (3) и (2) следует, что

$$\tau \approx x^{1/2};$$

$$\tau \approx t^{1/2}. \qquad (4)$$

При выходе ударной волны на свободную поверхность преграды в результате суперпозиции падающей волны сжатия и отраженной от свободной поверхности волны разрежения в преграде вблизи свободной поверхности возникает нестационарная область растягивающих напряжений. В результате происходит разрыв материала, нарушение его сплошности. Это явление называется отколом. Напряжение разрыва для данного материала преграды не является постоянной величиной и зависит от изменяющихся во времени условий в области разрыва. Целесообразно сопоставлять изменение напряжения разрыва со скоростью деформирования $\dot{\varepsilon}$ [16]. При волновом характере течения

$$\dot{\varepsilon} = du/dx, \qquad (5)$$

где u — массовая скорость.

Для некоторых типов конденсированных тел найдены зависимости разрывающего напряжения от скорости деформирования [16, 17]. С возрастанием величины $\dot{\varepsilon}$ разрывающее напряжение увеличивается либо линейно, либо по степенному закону; такой характер его изменения позволяет объяснить так называемый «масштабный эффект», отмеченный многими исследователями откола (например [18]). Этот эффект заключается в следующем: при одинаковых начальных параметрах ударных волн преграды большей толщины разрушались при меньших значениях разрывающего напряжения.

Оценим изменение параметров ударной волны при ее подходе к свободной поверхности преграды. Рассмотрим две преграды, отличающиеся толщинами в k раз (масштаб опыта); толщина второй преграды больше толщины первой в k раз. В этом случае отношение амплитуд вблизи свободных поверхностей

$$P_2/P_1 \approx k^{-1/2}, \qquad (6а)$$

длительностей —

$$\tau_2/\tau_1 \approx k^{1/2}, \qquad (6б)$$

длин ударных волн —

$$l_2/l_1 \approx k^{1/2}. \qquad (6в)$$

Скорость деформирования в области разрыва

$$\dot{\varepsilon} \approx P/l. \qquad (7)$$

В итоге получаем, что

$$\dot{\varepsilon}_2/\dot{\varepsilon}_1 \approx k^{-1}. \qquad (8)$$

Для преграды большей толщины скорость деформирования меньше, и необходимо меньшее растягивающее напряжение для осуществления откольного разрушения.

Рассмотрим физическое явление разлета стеклянных осколков окон зданий наружу при взрывах боеприпасов и зарядов взрывчатых веществ вне этих зданий (например работы [19, 20]). На первый взгляд, это парадоксальное явление. Стекла вылетают в ту сторону, с которой действовала воздушная ударная волна. Стекла

выдерживают кратковременную ударную волну сжатия длительностью до 10 мкс, хотя и со значительной амплитудой, но следующая позади волна разрежения имеет длительность до десятков секунд, т. е. в 10^6 раз длительнее участка сжатия, хотя имеет существенно меньшую амплитуду (рис. 1).

Площадь под кривой давления есть численное значение удельного механического импульса. Следовательно, критерием разрушения оконных стекол является удельный импульс участка разрежения. Стекла вылетают наружу, поскольку с внешней стороны создается разрежение. Снаружи давление меньше, чем внутри здания.

Выполненный теоретико-экспериментальный анализ явлений соударения тел, откольного разрушения и образования пробки позволил установить, что на основе теории размерностей можно получить критерий разрушения η (см. например [21]). Он учитывает как параметр нагрузки — удельный механический импульс J, так и свойства материала преграды — плотность ρ и скорость звука c, а также геометрию преграды — ее толщину H:

$$\eta = \left(\frac{J}{\rho H c} \right)^{1/2}. \qquad (9)$$

При значениях $\eta < 0{,}1$ разрушение отсутствует; при $0{,}1 < \eta < 0{,}5$ реализуется откольное разрушение; при $\eta > 0{,}5$ происходит разрушение по механизму выбивания пробки (рис. 2).

На рис. 2 по оси абсцисс отложены значения параметра η, по оси ординат — параметра χ: отношения толщины откола δ к толщине преграды H; $\chi = \delta / H$.

В области I $\delta = 0$, $\chi = 0$, разрушение отсутствует и преграда подвергается только воздействию ударных волн и волн разгрузки, циркулирующих по толщине преграды. В области II $\delta \neq 0$, $\chi \sim \eta$, реализуется откольное разрушение и толщина откола линейно зависит от параметра η. Заметим, что количественная зависимость $\chi(\eta)$ для различных типов материалов преград [21] позволяет определить толщину отколовшегося слоя δ, то есть позволяет получить ответы на наиболее трудные для теории вопросы — о локализации области откольного разрушения, о толщине откола. В области III $\delta = H$, $\chi = 1$ и ударник выбивает пробку. За пределами преграды ударник и пробка движутся как единое целое со скоростью, определяемой из условия сохранения импульса, сообщенного ударником.

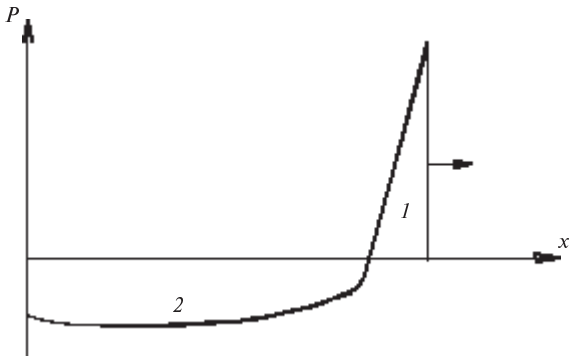


Рис. 1. Распределение по координате x давления P в воздушной ударной волне на двух участках: кратковременного сжатия (*1*) и длительного разрежения (*2*)

В случае использования панели бронежилета, если при ударе по панели реализуются условия, соответствующие зоне III на рис. 2, то в тело человека распространяется ударная волна, а за нею — движущиеся как единое целое пробка и ударник. Основными поражающими факторами в этом случае являются движущиеся пробка и ударник.

Если реализуются условия, соответствующие зоне II на рис. 2, то в тело человека распространяется ударная волна а за нею — отколовшийся слой бронежилета. Поражающее действие в этом случае определяется совокупно.

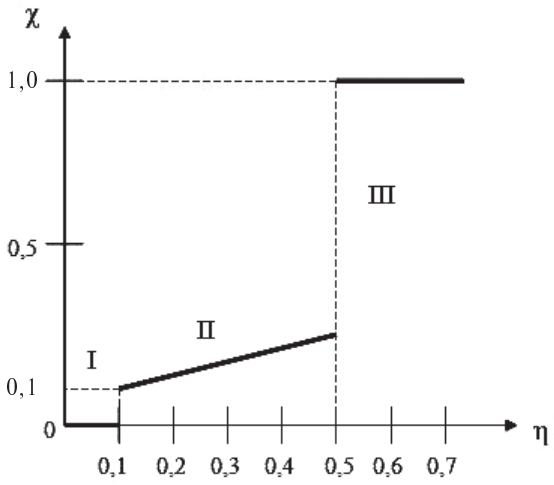


Рис. 2. Области, относящиеся к разрушению материалов: I — отсутствие разрушения; II — откольное разрушение; III — разрушение по механизму выбивания пробки

Если реализуются условия, соответствующие зоне I на рис. 2, то в тело человека распространяется ударная волна, и поражающим фактором является удельный механический импульс нагрузки. Результат действия близок к эффекту контузии человека.

Форма профиля ударной волны, распространяющейся в тело человека, существенно зависит от соотношения акустических жесткостей ударника, бронежилета и тела [17]. Под жесткостью здесь понимается величина, равная произведению плотности на скорость звука. Для тела человека жесткость будет близка к жесткости воды. Для бронежилета, скорее всего, нужно принять эффективную жесткость, поскольку панель бронежилета представляет собой слоистую систему.

Итак, в работе выполнен анализ механизмов затухания ударной волны в конденсированных средах при различных способах нагружения, создающих в нагружаемых преградах давления в десятки гигапаскалей. На основании проведенного анализа обосновано использование параметра нагружения — удельного механического импульса. Это позволяет рассмотреть применение этого параметра при различных видах разрушения преграды, причем критерием того или иного вида разрушения является удельный механический импульс.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Райнхарт, Дж.С.** Взрывная обработка металлов [Текст] / Дж.С. Райнхарт, Дж. Пирсон.— М.: Мир, 1966.— 392 с.

2. **Рыбаков, А.П.** Гидродинамика косых волн в конденсированных средах [Текст] / А.П. Рыбаков.— Даугавпилс: Изд-во Даугавпилс. ун-та, 1993.— 142 с.

3. **Анисимов, С.И.** Действие излучения большой мощности на металлы [Текст] / С.И. Анисимов, Я.И. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходынко; под ред. А.М. Бонч-Бруевича и М.А. Ильяшевича.— М.: Наука, 1970.— 272 с.

4. **Вшивков, О.Ю.** Удельный импульс как физический критерий определения параметров откола [Текст] / О.Ю. Вшивков, В.В. Ильин, В.В. Козлов // Вестник ПГТУ. Прикладная математика и механика.— 2006.— № 1.— С. 159–163.

5. **Курант, Р.** Сверхзвуковые течения и ударные волны [Текст] / Р. Курант, К. Фридрихс.— М.: Изд-во ИЛ, 1950.— 426 с.

6. **Ландау, Л.Д.** Механика сплошных сред [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.— М.: Гостехиздат, 1954.— 460 с.

7. **Любошиц, В.Л.** О законе затухания плоской ударной волны в плотной среде [Текст] / В.Л. Любошиц // Физика горения и взрыва.— 1967.— Т. 3.— № 3.— С. 93–95.

8. **Рыбаков, А.П.** Твердые тела в условиях давлений и температур ударного сжатия [Текст] / А.П. Рыбаков.— М.: Цниатоминформ.— 1978.— С. 68–69.

9. **Fowles, G.R.** Attenuation of a shock wave in a solid by a flying plate [Текст] / G.R. Fowles // Journal of Applied Physics.— 1960.— Vol. 31.— № 4.— P. 655–661.

10. **Рыбаков, А.П.** Затухание ударной волны при соударении пластин [Текст] / А.П. Рыбаков // Журнал прикладной механики и технической физики.— 1976.— № 5.— С. 147–149.

11. **Козлов, В.П.** Два случая распространения ударной волны по металлу [Текст] / В.Н. Козлов // Журнал технической физики.— 1966.— Т. 36.— № 7.— С. 1305–1309.

12. **Романова, В.Н.** О затухании плоской ударной волны в конденсированной неоднородной среде [Текст] / В.Н. Романова // Физика горения и взрыва.— 1974.— Т. 48.— № 8.— С. 73–77.

13. **Андрианкин, З.И.** О затухании волны при высокоскоростном ударе [Текст] / З.И. Андрианкин, М.М. Кононенко // Физика горения и взрыва.— 1973.— Т. 9.— № 4.— С. 52–56.

14. **Дерибас, А.А.** Исследование процесса затухания ударных волн в металлах при нагружении контактным взрывом [Текст] / А.А. Дерибас, В.Ф. Нестеренко, Ф.А. Сапожников [и др.] // Физика горения и взрыва.— 1979.— Т. 15.— № 2.— С. 126–132.

15. **Curran, D.R.** Nongydrodynamic attennation of shock wave in aluminium [Текст] / D.R. Curran // Journal of Applied Physics.— 1963.— Vol. 34.— № 91.— P. 2677–2690.

16. **Rybakov, A.P.** Spall in non-one dimensional shock waves [Текст] / A.P. Rybakov // Jnt. Jornal of Jmpact Eng.— 2000.— Vol. 24.— P. 1041–1082.

17. **Рыбаков, А.П.** Механика откольного разрушения [Текст] / А.П. Рыбаков.— Пермь: Изд-во Пермского военного ин-та ракетных войск, 1996.— 200 с.

18. **Альтшулер, Л.В.** Связь критических разрушающих напряжений со временем разрушения при взрывном нагружении металлов [Текст] / Л.В. Альтшулер, С.А. Новиков, И.И. Дивнов // Докл. АН СССР.— 1966.— Т. 166.— № 1.— С. 67–70.

19. **Покровский, Г.И.** Взрыв [Текст] / Г.И. Покровский.— М.: Недра, 1980.— 190 с.

20. **Дорофеев, А.Н.** Авиационные боеприпасы [Текст] / А.Н. Дорофеев, А.П. Морозов, Р.С. Саркисян.— М.: Изд-во Военно-возд. инж. академии им. Н.Е. Жуковского.— 1978.— 446 с.

21. **Вологжанин, О.Ю.** Границы областей применения моделей поведения преграды при воздействии ударников [Текст] / О.Ю. Вологжанин, О.Ю. Вшивков, Н.А. Рыбаков // Вестник ИжГТУ.— 2010.— № 2 (46).— С. 16–18.

УДК 519.63: 539.3

М.Е. Фролов

РЕАЛИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПОДХОДА К АПОСТЕРИОРНОМУ КОНТРОЛЮ ТОЧНОСТИ РЕШЕНИЙ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ

Значительный интерес к проблеме построения надежных методов, позволяющих апостериорно контролировать погрешность вычисленных приближенных решений, возник к началу 80-х годов XX века. Он был вызван в первую очередь необходимостью проверки результатов, получаемых в процессе математического и инженерного моделирования.

Уже к концу XX века в вычислительной математике сформировалось отдельное направление, в рамках которого на основе метода конечных элементов было предложено несколько подходов к построению апостериорных оценок погрешности (см. монографии [1–6] и цитируемую там литературу). Однако подходы, ставшие за эти десятилетия классическими, основаны на дополнительных предположениях о свойствах приближенного решения, в частности, это должно быть точное решение соответствующей конечномерной задачи (галёркинская аппроксимация). Такие ограничения лишают их необходимой общности.

Идея создания более универсального подхода на основе привлечения методов математической физики, вариационного исчисления и функционального анализа, нашедшая отражение еще в работах С.Г. Михлина, на современном этапе получила свое существенное развитие в исследованиях профессора С.И. Репина и его коллег в 1996–2010 гг. Для многих задач получены мажоранты погрешности, удовлетворяющие важным требованиям — они дают надежные (гарантированные) оценки точности интегральной величины погрешности и подходят для широкого класса приближенных решений, построенных различными методами. Теоретические основы подхода, названного функциональным, интенсивно развиваются и обобщаются уже более десяти лет (см. монографию [6] и цитируемую там литературу). Тем не менее вопрос его практического применения для контроля точности решений задач механики исследован недостаточно. Особенно это касается реализации предлагаемых методов как независимой надстройки над коммерческими пакетами для инженерных вычислений, которые широко используются в современной инженерной практике. Надежный контроль погрешности таких решений другими (нефункциональными) методами для большинства задач вообще видится крайне затруднительным. Основная причина как раз заключается в том, что стандартные подходы к построению апостериорных оценок основаны на специальных предположениях о свойствах приближенного решения. Гарантировать выполнение всех требований в случае коммерческого программного обеспечения с закрытым кодом невозможно. С вычислительной точки зрения пакеты все-таки выглядят как «черный ящик». Отдельные детали реализации скрыты или описаны не в полном объеме.

Данная работа связана с реализацией функционального подхода к оценке точности решений трехмерных задач линейной теории упругости, полученных в пакете ANSYS. Для этого на языке программирования FORTRAN создан внешний вычислительный модуль, а эффективность применения методики проверена численными экспериментами.

Математическая постановка задачи

Исходная классическая задача заключается в определении в трехмерной области Ω поля перемещений u, поля напряжений σ и поля деформаций ε, которые связаны системой соотношений

$$\operatorname{div}\sigma + F = 0;$$

$$\sigma = L\varepsilon;$$

$$\varepsilon(u) = \frac{1}{2}\left(\nabla u + (\nabla u)^T\right), \qquad (1)$$

где F — плотность объемных сил; L — тензор упругих модулей, связывающий напряжения и деформации.

Будем предполагать, что среда однородна и изотропна; тогда в линейном случае этот тензор определяется двумя постоянными, связанными со свойствами материала. Это могут быть, например, коэффициент Пуассона и модуль Юнга. К системе уравнений (1), выполняющихся в области, занимаемой упругим телом, добавляются граничные условия в терминах перемещений

$$u = u_0 \quad \text{на} \quad \Gamma_U \qquad (2)$$

и в терминах напряжений

$$\sigma n = g \quad \text{на} \quad \Gamma_N \qquad (3)$$

где Γ_U, Γ_N — две непересекающиеся части границы, объединение которых представляет собой всю границу области Ω; u_0, g — перемещения, заданные на первой части границы, и поверхностные силы, заданные на второй части границы, соответственно; n — нормаль к поверхности тела.

Основой для вывода апостериорной оценки для задачи (1) – (3), как и для применения метода конечных элементов, служит ее обобщенная (слабая) постановка. При этом рассматривается решение так называемой прямой задачи, в которой основной неизвестной характеристикой является поле перемещений, а поля деформаций и напряжений определяются по нему. Эта задача выглядит следующим образом:

найти элемент $u \in \mathrm{V}$ такой, что

$$\int_\Omega L\varepsilon(u) : \varepsilon(w)d\Omega = \int_\Omega F \cdot w d\Omega + \int_{\Gamma_N} g \cdot w d\Gamma, \quad \forall w \in \mathrm{V}_0, \qquad (4)$$

где

$$\mathrm{V} = \left\{ u \in W_2^1\left(\Omega, R^3\right) \middle| u = u_0 \quad \text{на} \quad \Gamma_U \right\};$$

$$\mathrm{V}_0 = \left\{ w \in W_2^1\left(\Omega, R^3\right) \middle| w = 0 \quad \text{на} \quad \Gamma_U \right\}.$$

Функционал энергии, соответствующий задаче, выглядит следующим образом:

$$J(u) = \frac{1}{2}\int_\Omega L\varepsilon(u) : \varepsilon(u)d\Omega - \int_\Omega F \cdot u d\Omega - \int_{\Gamma_N} g \cdot u d\Gamma. \qquad (5)$$

Если рассмотреть произвольное приближенное решение $v \in V$ задачи (4), то несложно показать, что энергетическая норма погрешности этого решения выражается через разность значений функционала на приближенном и точном решениях, а именно

$$\left|\!\left|\!\left| u - v \right|\!\right|\!\right|^2 := \int_\Omega L\varepsilon(u - v) : \varepsilon(u - v)d\Omega = 2(J(v) - J(u)). \qquad (6)$$

Если подставить точное решение u в функционал J, то в силу слабой постановки (4), мы получим функционал в виде

$$J(u) = -\frac{1}{2}\int_\Omega L\varepsilon(u) : \varepsilon(u)d\Omega = -\frac{1}{2}\int_\Omega \sigma(u) : \varepsilon(u)d\Omega. \qquad (7)$$

Таким образом, значение функционала на точном решении дает значение энергии деформации с обратным знаком. Таким же свойством обладают галёркинские аппроксимации — точные решения конечномерных задач, соответствующих задаче (4) .

В работе [7] с привлечением методов теории двойственности вариационного исчисления А.В. Музалевским и С.И. Репиным получена апостериорная оценка функционального типа для задачи (4) и ее двумерных аналогов (плоское напряженное состояние, плоская деформация, осесимметричная задача). В ней также приведены два примера численного расчета для случая плоских задач.

Если ввести обозначения для невязок соотношения (3) и первых двух соотношений (1) как

$$R(\sigma) := \mathrm{div}\sigma + F \quad \text{в} \quad \Omega;$$
$$\mathcal{D}(v,\sigma) := \sigma - L\varepsilon(v) \quad \text{в} \quad \Omega; \qquad (8)$$
$$r(\sigma) := \sigma n - g \quad \text{на} \quad \Gamma_N,$$

то оценка погрешности, предложенная в работе [7], может быть преобразована к виду

$$|||u - v||| \le \sqrt{D(v,\sigma)} + c_\Omega \sqrt{\|R(\sigma)\|_\Omega^2 + \|r(\sigma)\|_{\Gamma_N}^2}, \qquad (9)$$

где

$$D(v,\sigma) := \int_\Omega L^{-1}\mathcal{D}(v,\sigma) : \mathcal{D}(v,\sigma); \qquad (10)$$

c_Ω — константа, не зависящая от разбиения области конечными элементами и удовлетворяющая неравенству

$$\|w\|_\Omega^2 + \|w\|_{\Gamma_N}^2 \le c_\Omega |||w|||^2, \qquad \forall w \in \mathrm{V}_0;$$

символами $\|...\|_\Omega$, $\|...\|_{\Gamma_N}$ обозначены стандартные нормы в пространствах функций, суммируемых с квадратом в смысле интеграла Лебега, соответствующих области и части ее границы.

С точки зрения практической реализации более удобной является форма оценки погрешности, в которой стоят квадраты норм без извлечения корня. С учетом того, что поиск значения константы c_Ω, близкого к оптимальному, для произвольной области является непростой задачей, в численных исследованиях упор сделан на вычисление индикатора погрешности $\sqrt{D(v,\sigma)}$. При этом уточненное поле напряжений, необходимое для его вычисления, получается из минимизации функционала следующего вида:

$$D(v,\sigma) + \alpha_1 \|R(\sigma)\|_\Omega^2 + \alpha_2 \|r(\sigma)\|_{\Gamma_N}^2,$$

где α_1, α_2 – малые весовые множители, позволяющие учесть в функционале независимо уравнения равновесия и граничные условия в напряжениях.

Численные результаты

Важное место в применении любых вычислительных технологий занимает их верификация. Поскольку коммерческие пакеты (такие как ANSYS) разрабатываются большим коллективом профессионалов — инженеров, вычислителей, программистов, и подвергаются тестированию в промышленных масштабах, то их можно брать за основу при проверке собственного программного кода. Поэтому в процессе реализации метода конечных элементов, необходимого для вычисления функционала оценки погрешности, была проведена отладка кода при помощи сравнения по ряду основных характеристик решения исходной задачи в пакете с результатами работы авторской программы. В качестве характеристик были выбраны узловые значения перемещений, которые являются базовыми неизвестными величинами, подлежащими определению, а также значение энергии деформации (как производная величина, включающая градиент перемещений). Для эффективной и быстрой отладки программы были разработаны простые тестовые задачи, включающие в себя определенные характерные особенности.

В силу ограниченности объема публикации ниже представлены только три примера, которые, тем не менее, позволяют сделать и обосновать все необходимые выводы. Примеры направлены в первую очередь на оценку эффективности методики апостериорного контроля погрешности. Для этого используется равенство (6), в котором точное решение в правой части заменено на приближенное решение, вычисленное на более мелкой сетке. Такая замена позволяет достаточно хорошо оценить истинную погрешность; при этом мы лишь незначительно занижаем ее величину. С другой стороны, такой подход дает возможность рассматривать любые примеры и даже те, в которых гладкое аналитическое решение невозможно построить или его не существует; а таких задач, как известно, большинство.

Отметим, что в пакете ANSYS реализован один из классических методов построения апостериорных оценок, который был предложен в работе [8] и нашел достаточно широкое применение в инженерной практике для случая простых задач. По этой причине кажется разумным провести сравнение реализованной функциональной методики оценки погрешности и стандартного средства пакета.

Пример 1. В данном примере рассматривается задача, в которой присутствуют только условия в перемещениях в области, изображенной на рис. 1. Известно, что наличие входящих углов в области решения задачи может влиять на качество оценки погрешности. На рис. 1 также пред-

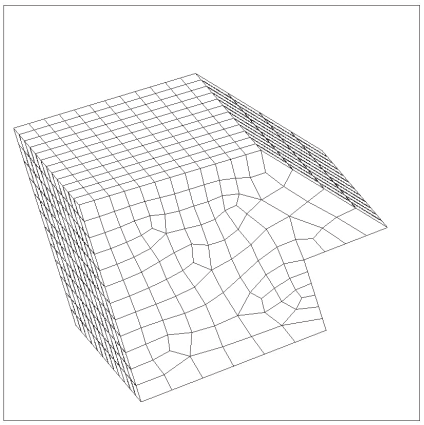


Рис. 1. Геометрия расчетной области и начальное разбиение конечными элементами (пример 1)

ставлено начальное разбиение конечными элементами. Последующие сетки получены из предыдущих разбиений путем их равномерного измельчения по каждой стороне в два раза ($R1$ из $R0$, $R2$ из $R1$ и т. д.). Таким образом, число элементов каждый раз увеличивается в восемь раз.

Для оценки эффективности методики оценки погрешности вычисляется решение на мелкой сетке, обозначенной REF. Основные параметры сеток указаны в таблице. Отметим, что максимальная размерность задачи, которую пришлось решить при оценке погрешности, составила почти 0,5 млн. уравнений, а решение задачи на мелкой сетке связано уже с системой порядка 2 млн. уравнений.

Данные для рассматриваемой задачи следующие: перемещения всех граничных узлов фиксированы, ускорение $a_Z = 9{,}8$ м/с^2 (учет собственного веса конструкции), модуль Юнга $E = 10{,}7$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0{,}15$; плотность $\rho = 1{,}83 \cdot 10^3$ кг/м^3.

Результаты, полученные при помощи реализованного решателя, практически совпадают с теми, что дает решатель ANSYS. Отклонение в значениях поля перемещений составляет менее 0,01 %. Данные об оценке погрешности также приведены в таблице. В ней представлена оценка ошибки снизу, полученная при помощи решения, вычисленного на мелкой REF-сетке (столбец 4). Поскольку такая оценка практически совпадает

Данные о сетках и эффективности оценок

Разбиение	Число		Истинная погрешность, %	Индикатор погрешности, %	
	узлов	элементов		Функциональный	ANSYS
Пример 1					
$R0$	1820	1404	15,6	16,5	22,2
$R1$	11200	9672	9,4	10,8	14,3
$R2$	81095	75168	4,2	5,5	7,9
REF	732253 (~2 млн. уравнений)	707808	–	–	–
Пример 2					
$R0$	3345	2368	9,6	10,8	13,1
$R1$	22689	18944	5,3	5,6	7,7
REF	166209 (~0,5 млн. уравнений)	151552	–	–	–
Пример 3					
$R0$	369	160	69,4	50,7	75,8
$R1$	2025	1280	43,5	39,6	59,4
$R2$	13041	10240	23,6	23,4	37,3
REF	698049 (~2 млн. уравнений)	655360	–	–	–

с истинной погрешностью, мы пренебрегаем этой разницей и сравниваем остальные данные с ней; тем более, что такая замена может привести только к недооценке, но никак не к переоценке эффективности исследуемой методики. В последнем столбце дается значение индикатора относительной точности решения, которое выдает пакет. Вычисляется этот индикатор при помощи методики, предложенной в работе [8].

Из данных таблицы можно сделать вывод, что наличие входящих углов незначительно влияет на качество полученных оценок погрешности. ANSYS несколько завышает истинную величину погрешности. Отметим, что хотя нарушения неравенства «истинная погрешность ≤ оценка» не происходит, используемые индикаторы не являются гарантированными верхними оценками погрешности. Они стали бы гарантированными, если применять неравенство (9), но с практической точки зрения это связано с некоторыми затруднениями.

Пример 2. Во втором примере рассматривается стальная конструкция, закрепленная с одного конца и нагруженная с другого постоянным давлением (рис. 2). Фиксировано перемещение точек торцевой грани $X = 0$. Давление на отмеченные участки поверхности составляет 1 МПа. Учитывается также и собственный вес конструкции $a_Y = -9{,}8$ м/с^2. Параметры материала: $E = 207$ ГПа; $\nu = 0{,}30$; $\rho = 7{,}83 \cdot 10^3$ кг/м^3.

Параметры конечно-элементных разбиений и результаты расчетов для этого примера также представлены в таблице. Из анализа приведенных данных можно сделать вывод о том, что качество оценки погрешности оказывается высоким, поскольку используемые объемные конечные элементы (SOLID) хорошо подходят для решения данной задачи. Поэтому и точность приближенного решения быстро достигает отметки почти в 95 %, считающейся в инженерной практике вполне достаточной.

Пример 3. Заключительный пример — это по сути незначительно модифицированный VM184 (ANSYS 12.0 Verification Manual), в котором рассматривается стержень малого прямоугольного сечения. Его размеры вдоль каждой из осей составляют, соответственно: $l_X = 152{,}4$ мм, $l_Y = 5{,}08$ мм, $l_Z = 2{,}54$ мм. Фиксированы перемещения узлов одного из торцов, а вблизи свободного торца приложено давление 0,23 МПа в направлении оси $0Z$. Свойства материала следующие: модуль Юнга $E = 68{,}95$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0{,}30$ (плотность в данном случае не требуется). При таких параметрах прогиб левого края должен быть близок к значению, приведенному в оригинале (VM184), а оно составляет 10,97 мм.

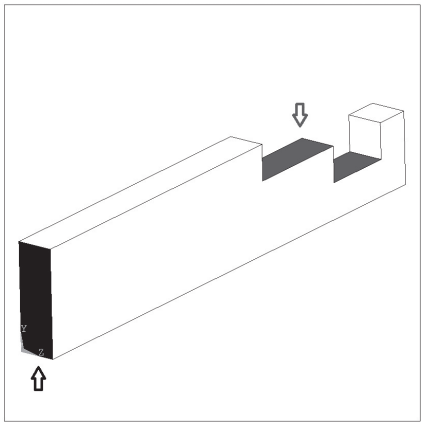


Рис. 2. Геометрия области и граничные условия для примера 2 (стрелка вверх указывает зону закрепления, стрелка вниз — зону и направление приложения давления)

В данном примере обращает на себя внимание существенная недооценка погрешности на грубой сетке (см. таблицу — сетка $R0$ 160 элементов). Это вполне объяснимо, поскольку для вычисления индикатора нам необходимо решить систему уравнений и определить уточненное поле напряжений. Но если сетка грубая, то это поле не может достаточно точно удовлетворить и граничным условиям в напряжениях, и уравнениям равновесия внутри области. Видно, что с измельчением сетки ситуация исправляется. Отметим, что для задачи об изгибе стержня Тимошенко в работе автора [9] получена и численно протестирована другая оценка функционального типа. Если исходную задачу можно свести к одномерной, то следует решать ее посредством балочных элементов (BEAM) и применять соответствующую оценку погрешности. В работе [9] решение в ANSYS получается при помощи BEAM-элементов, и также контролируется его точность посредством внешней программы, реализованной на языке FORTRAN. Результаты указывают на высокую эффективность методики и точность гарантированных верхних оценок даже на грубых сетках.

Итак, в результате исследования был реализован на языке FORTRAN и отлажен вычисли-

тельный модуль оценки погрешности решений трехмерных задач линейной теории упругости. Методика была применена к приближенным решениям, вычисленным в пакете ANSYS 12.0. При сравнении со стандартным индикатором погрешности ANSYS также следует учесть тот факт, что предлагаемые в рамках функционального подхода методы могут быть обобщены на случай нелинейных задач и задач, в которых нарушается требование соответствия точному решению конечномерной задачи. В этих ситуациях стандартный индикатор пакета недоступен.

При помощи разработанной серии численных экспериментов различной направленности модуль оценки погрешности был протестирован на задачах, анализ которых приводит к решению систем до 0,5 млн. уравнений. При этом решение системы, связанной с исходной задачей, на мелкой сетке, необходимое нам для оценки эффективности метода, потребовало существенных вычислительных затрат, поскольку число уравнений доходило до 2 млн.

Результаты подтвердили высокую эффективность предлагаемых методик расчета апостериорных оценок функционального типа, по крайней мере, в области их обоснованного применения.

Исследование выполнено при поддержке Правительства Санкт-Петербурга в рамках конкурса грантов 2010 года для молодых ученых и молодых кандидатов наук (диплом ПСП №10699).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Verfürth, R.** A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques [Text] / R. Verfürth.— Chichester, Stuttgart: John Wiley & Sons, B.G. Teubner, 1996.— 127 p.

2. **Ainsworth, M.** A posteriori error estimation in finite element analysis [Text] / M. Ainsworth, J.T. Oden.— New York: John Wiley & Sons, 2000.— 240 p.

3. **Babuška, I.** The finite element method and its reliability [Text] / I. Babuška, T. Strouboulis.— New York: The Clarendon Press Oxford University Press, 2001.— 802 p.

4. **Neittaanmäki, P.** Reliable methods for computer simulation. Error control and a posteriori estimates [Text] / P. Neittaanmäki, S.I. Repin. — Studies in Mathematics and its Applications 33.— Amsterdam: Elsevier, 2004.— 305 p.

5. **Ladevèze, P.** Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics [Text] / P. Ladevèze, J.-P. Pelle.— Mechanical Engineering Series.–New York: Springer, 2005.–413 p.

6. **Repin, S.I.** A posteriori estimates for partial differential equations [Text]: Radon Series on Computational and Applied Mathematics 4 / S.I. Repin.— Berlin: de Gruyter, 2008.— 316 p.

7. **Muzalevsky, A.V.** On two-sided error estimates for approximate solutions of problems in the linear theory of elasticity [Text] / A.V. Muzalevsky, S.I. Repin // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.— 2003.— Vol. 18, № 1.— P. 65–85.

8. **Zienkiewicz, O.C.** A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis [Text] / O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu // Internat. J. Numer. Methods Engrg.— 1987.— Vol. 24.— № 2.— P. 337–357.

9. **Frolov, M.E.** Functional a posteriori error estimates for certain models of plates and beams [Text] / M.E. Frolov // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.— 2010.— Vol. 25.— № 2.— P. 117–129.

УДК 539.3

В.В. Тихомиров

ТРЕЩИНА ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА, ЧАСТИЧНО ПРОНИКАЮЩАЯ В УПРУГОЕ КРУГОВОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ С ПОКРЫТИЕМ

Проблема взаимодействия трещин с включениями различной формы в рамках линейной механики разрушения привлекала и привлекает внимание многих исследователей. С одной стороны, интерес к ней вызывается потребностями механики неоднородных сред (геомеханики)

и механики композиционных материалов, поскольку рассмотрение упругих полей на микромеханическом уровне дает понимание процессов, происходящих в гетерогенных структурах, и позволяет прогнозировать сопротивление подобных сред появлению и развитию трещин. С другой стороны, включение может интерпретироваться как особая зона материала достаточно малых размеров вокруг вершины трещины — зона предразрушения или зона поврежденности. С этой точки зрения появляется возможность моделирования процесса разрушения путем придания этой зоне неких эффективных свойств. При этом структура и свойства самого включения играют исключительно важную роль.

По-видимому, первой работой рассматриваемого направления является статья [1], в которой исследовалось взаимодействие радиальной трещины конечной длины с круговым включением методом комплексных потенциалов Колосова — Мусхелишвили. Аналогичная задача рассматривалась методом дислокаций Аткинсоном [2] и была сведена к сингулярному интегральному уравнению относительно плотности краевых дислокаций, распределенных по длине разреза. Решение в замкнутой форме для той же постановки задачи было получено в статье [3]. В работе [4] методом суперпозиции совместно с дислокационным подходом (для вспомогательной задачи) построено решение в случае трещины произвольной ориентации. Влияние кругового включения на напряженное состояние в вершинах двух радиальных трещин, расположенных симметричным образом, изучено в работе [5] с помощью комплексных потенциалов. П.С. Стейф [6] получил приближенное аналитическое решение в случае полубесконечной трещины продольного сдвига, внедрившейся вплоть до центра неоднородного включения круговой формы. На основе этого решения показано, что осреднение модуля сдвига включения приводит к значительной погрешности при определении коэффициента интенсивности напряжений (КИН). Криволинейные трещины (круговая и параболическая), расположенные в однородной матрице и взаимодействующие с круговым включением, рассматривались в работе [7]. Точное решение в случае антиплоской задачи для трещины конечной длины, частично проникающей в круговое включение, с помощью процедуры конформного отображения и аппарата аналитических функций построено в статье [8]. Внешняя сдвиговая нагрузка в этом случае принималась однородной и приложенной на бесконечности.

Асимптотика сингулярного поля напряжений в вершинах разреза, упирающихся в упругие круговые зерна, получена Н.Ф. Морозовым [9]. При этом показано, что возникающая особенность в вершинах разреза имеет степенной характер, но ее показатель отличен от классического значения, равного 1/2.

В работе [10] с использованием теории эквивалентного включения Эшелби в рамках плоской задачи получены выражения для КИН первой и второй моды в случае прямолинейной трещины конечной длины, частично внедрившейся во включение произвольной формы.

Кроме аналитических подходов к исследованию проблемы привлекались и численные методы. Так например, в работе [11] для исследования композиции Al-SiC с включением круговой и квадратной формы использовался метод конечных элементов. Авторы статьи [12] для анализа проблемы применяли метод граничных элементов; с помощью этого метода и критерия максимального главного напряжения они определили направление квазистатического роста трещины.

Количество решенных задач в случае, когда у включения имеется промежуточный слой, значительно меньше. В работах [13, 14] для трещин конечной длины, находящихся вне или внутри включения, проблема сведена к решению сингулярных интегральных уравнений относительно распределения плотности дислокаций на линии разреза. Скорость освобождающейся энергии в вершине внешней (по отношению к включению) трещины в рамках плоской задачи методом граничных элементов рассматривалась в статье [15].

В данной работе методом, отличным от подходов, указанных в приведенном кратком обзоре, рассматривается взаимодействие полубесконечной трещины продольного сдвига с круговым включением как с покрытием, так и при его отсутствии.

Решение вспомогательной задачи

Сначала рассмотрим простую вспомогательную антиплоскую задачу для полубесконечной трещины, находящейся в неограниченной одно-

родной и изотропной среде, и получим ряд полезных соотношений. Будем считать, что берега трещины нагружены самоуравновешенными сосредоточенными силами T_0, расположенными на расстоянии r_0 от ее вершины. Как известно, в этом случае задача сводится к решению двумерного уравнения Лапласа относительно перемещения $w_0(r, \varphi)$, где r и φ — полярные координаты, при граничных условиях

$$w_0(r, 0) = 0; \qquad \tau_{\varphi z 0}(r, \pi) = T_0 \delta(r - r_0) \qquad (1)$$

($\delta(r)$ — дельта-функция),

а касательные напряжения определяются формулами

$$\tau_{\varphi z} = \frac{\mu}{r}\frac{\partial w}{\partial \varphi}; \quad \tau_{rz} = \mu \frac{\partial w}{\partial r}. \qquad (2)$$

Решение задачи строится с помощью интегрального преобразования Меллина и имеет вид

$$w_0(r, \varphi) = \frac{T_0}{2\pi\mu} \ln \frac{r + r_0 + 2\sqrt{r r_0}\sin\frac{\varphi}{2}}{r + r_0 - 2\sqrt{r r_0}\sin\frac{\varphi}{2}}; \qquad (3)$$

$$\tau_{\varphi z 0}(r, \varphi) = \frac{T_0}{\pi} \frac{(r_0 + r)\cos\frac{\varphi}{2}}{r^2 + r_0^2 + 2 r r_0 \cos\varphi}\sqrt{\frac{r_0}{r}};$$

$$\tau_{rz 0}(r, \varphi) = \frac{T_0}{\pi} \frac{(r_0 - r)\cos\frac{\varphi}{2}}{r^2 + r_0^2 + 2 r r_0 \cos\varphi}\sqrt{\frac{r_0}{r}};$$

$$0 \le r < \infty, \quad 0 \le \varphi \le \pi.$$

Определим коэффициент интенсивности напряжений в вершине трещины формулой

$$K_{\mathrm{III}}^0 = \lim_{r \to 0} \sqrt{2\pi r}\, \tau_{\varphi z}(r, 0); \qquad (4)$$

тогда будем иметь выражение

$$K_{\mathrm{III}}^0 = \sqrt{\frac{2}{\pi r}} T_0. \qquad (5)$$

Взаимодействие полубесконечной трещины с упругим включением

Рассмотрим неограниченную упругую среду, находящуюся в состоянии антиплоской деформации и содержащую полубесконечную трещину, проникающую в упругое круговое включение до его центра. Модули сдвига матрицы и включения будем считать постоянными и равными μ_0 и μ_1, соответственно. Так же как и во вспомогательной задаче, к берегам трещины приложены самоуравновешенные сосредоточенные силы величины T_0 на расстоянии r_0 от ее вершины (рис. 1, *а*). В предположении идеального контакта на границе раздела фаз, т. е. непрерывности перемещений и напряжений, вследствие наличия симметрии задача сводится к решению дифференциального уравнения для неоднородной среды:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\mu \frac{\partial w}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(\frac{\mu}{r}\frac{\partial w}{\partial \varphi}\right) + \frac{\mu}{r}\frac{\partial w}{\partial r} = 0 \qquad (6)$$

при граничных условиях

$$w(r, 0) = 0, \quad \tau_{\varphi z}(r, \pi) = T_0 \delta(r - r_0);$$

$$w(r_1 - 0, \varphi) = w(r_1 + 0, \varphi),$$

$$\tau_{rz}(r_1 - 0, \varphi) = \tau_{rz}(r_1 + 0, \varphi). \qquad (7)$$

где $\mu = \mu(r)$ — модуль сдвига композиции, причем $\mu(r) = \mu_1$ для $0 \le r < r_1$ и $\mu(r) = \mu_0$ для $r_1 < r < 8$.

Для решения задачи воспользуемся обобщенным интегральным преобразованием Меллина (преобразованием через дефект) [16]:

$$W(p, \varphi) = \int_0^\infty \mu(r) w(r, \varphi) r^{p-1} dr;$$

$$\mu(r) w(r, \varphi) = \frac{1}{2\pi i} \int_L W(p, r) r^{-p} dp,$$

где L — контур интегрирования.

В результате интегрирования по частям слагаемых в уравнении (6) и использования условий (7) идеального контакта материалов приходим к следующей неоднородной краевой задаче:

$$W''(p, \varphi) + p^2 W(p, \varphi) = (\mu_1 - \mu_0)\, p r_1^p w(r_1, \varphi); \quad (8)$$

$$W(p, 0) = 0, \quad W'(p, \pi) = T_0 r_0^p,$$

в которой $w(r_1, \varphi)$ — неизвестная функция, определяющая распределение перемещений на границе раздела фаз.

Согласно работе [16] решение задачи (8) может быть представлено в форме

$$W(p, \varphi) = (\mu_1 - \mu_0) \times$$

$$\times p r_1^p \int G(\varphi, \theta) w(r_1, \theta) d\theta + \frac{\sin p\varphi}{p \cos p\pi} T_0 r_0^p,$$

где функция Грина имеет вид

$$G(\varphi,\theta)=\frac{1}{p\cos p\pi}\begin{cases}\cos p(\pi-\theta)\sin p\varphi, & \varphi\le\theta;\\ \cos p(\pi-\varphi)\sin p\theta, & \varphi\ge\theta.\end{cases}$$

Отсюда, используя обратное преобразование Меллина, получаем соотношение

$$\mu(r)w(r,\varphi)=$$

$$=\omega_0(r,\varphi)+(\mu_1-\mu_0)\int_0^{\pi}w_1(\theta)J(r,\varphi,\theta)\,d\theta. \qquad (9)$$

Здесь $\omega_0(r,\varphi)$ — решение $w_0(r,\varphi)$ вспомогательной задачи, домноженное на μ;

$$w_1(\theta)=w(r_1,\theta);$$

$$J_1(r,\varphi,\theta)=R_1(r)\chi_1(r,\varphi,\theta)\,; \qquad (10)$$

$$R_1(r)=(r_1-r)\sqrt{r_1 r}\,/\,(2\pi);$$

$$\chi_1(r,\varphi,\theta)=\frac{\cos(\theta+\varphi)/2}{r_1^2+r^2-2r_1 r\cos(\theta+\varphi)}-$$

$$-\frac{\cos(\theta-\varphi)/2}{r_1^2+r^2-2r_1 r\cos(\theta-\varphi)}.$$

Таким образом, согласно выражению (9) перемещения в рассматриваемой задаче представляются в виде суммы перемещений соответствующей задачи для однородной среды и добавки (интегральное слагаемое), обусловленной наличием включения. Подчеркнем, что левая и правая части в (9) являются разрывными функциями вследствие разрыва модуля упругости на границе раздела материалов.

Переходя в соотношении (9) к пределу при $r\to r_1-0$, с учетом формул (10) находим распределение перемещений на границе матрица — включение:

$$w_1(\varphi)=\frac{2}{\mu_1+\mu_0}\omega_{01}(\varphi);\quad \omega_{01}(\varphi)=\omega_0(r_1,\varphi).$$

В результате подстановки полученной функции в формулу (9) будем иметь при $r<r_1$:

$$\mu_1(r)w(r,\varphi)=\omega_0(r,\varphi)+$$

$$+2\frac{(\mu_1-\mu_0)}{(\mu_1+\mu_0)}R(r)\int_0^{\pi}\omega_{01}(\theta)\chi(r,\varphi,\theta)\,d\theta. \qquad (11)$$

Отсюда на основе представлений (2) находятся касательные напряжения на продолжении трещины и их асимптотика при $r\to 0$

$$\tau_{rz}(r,0)=$$

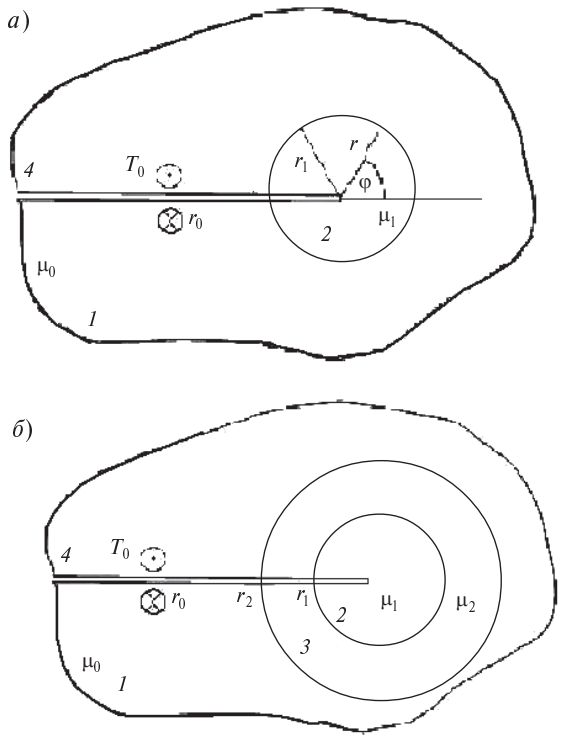


Рис. 1. Геометрия рассматриваемых систем трещина — включение:
а — без покрытия, *б* — с покрытием;
1 — матрица, *2* — включение,
3 — покрытие, *4* — трещина

$$=\frac{T_0}{\pi\sqrt{r_0}}\left[1-\frac{M}{2\pi}\sqrt{\frac{r_0}{r_1}}\int_0^{\pi}\ln\frac{A+\sin\theta/2}{A-\sin\theta/2}\sin\theta/2\,d\theta\right]\frac{1}{\sqrt{r}},$$

где $A=0,5(\rho+1/\rho)\qquad\left(\rho=\sqrt{r_0/r_1}\right),$

$$M=(1-\mu_0/\mu_1)/(1+\mu_0/\mu_1).$$

Вычисляя интеграл и учитывая определение (5), получаем выражение для нормированного коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины как функцию параметра M, характеризующего соотношение упругих модулей материалов, и безразмерного расстояния ρ:

$$N=\frac{K_{\mathrm{III}}}{K_{\mathrm{III}}^0}=\begin{cases}1-M, & \rho\ge 1;\\ 1-M\rho^2, & \rho\le 1,\end{cases} \qquad (12)$$

где K_{III}^0 — КИН для трещины в однородной среде, определяемый формулой (5).

Биупругий параметр M при $0<\mu_0/\mu_1<\infty$ изменяется от -1 до 1. Для включения, более жесткого по сравнению с матрицей, $0<M<1$, а для

мягкого включения $-1 < M < 0$. Случаю $M = 0$ соответствует гомогенная среда.

Предельные ситуации, когда $M \to \pm 1$ отвечают абсолютно твердому включению и отверстию, соответственно. Согласно монографии [17], например, для керамического материала Al_2O_3/SiC (окись алюминия/карбид кремния) $M = 0{,}1749$, а для композиции сталь/алюминий — биупругий параметр $M = -0{,}4386$.

Из формулы (12) вытекает, что в случае жесткого включения, когда $\mu_1 > \mu_0$ и, следовательно, $0 < M < 1$, величина КИН снижается и распространение трещины тормозится. Мягкое включение, у которого $\mu_0 > \mu_1$, а $-1 < M < 0$, напротив, приводит к возрастанию КИН и способствует распространению трещины. При этом, если точка приложения сосредоточенных сил расположена вне включения ($\rho > 1$, а $r_0 > r_1$), то нормированный КИН остается постоянным. Если же эта точка лежит внутри включения ($\rho < 1$, а $r_0 < r_1$), то КИН является линейной функцией полярного радиуса.

Построенное фундаментальное решение для нормированного КИН позволяет получить путем интегрирования решение для произвольной самоуравновешенной нагрузки $f(r)$, приложенной на берегах трещины.

С целью определения зон возможного нарушения идеальности контакта материалов (проскальзывания материалов) рассмотрим распределение касательных напряжений на границе раздела при $r = r_1$. С помощью формул (2), (3), (10) и (11) получаем выражение

$$\tau_{rz}(r_1, \varphi) = \tau_{rz0}(r_1, \varphi) -$$

$$-\frac{T_0 M}{4\pi^2 r_1}\int_0^{\pi} \ln\frac{A + \sin\theta/2}{A - \sin\theta/2}\chi_1(r_1, \theta, \varphi)\,d\theta. \qquad (13)$$

Производим вычисление сингулярного интеграла, входящего в (13), с использованием значения квадратуры [18]:

$$\int_0^{\pi}\frac{d\theta}{\cos\theta - \cos\varphi} = 0;$$

тогда окончательно будем иметь формулу

$$\tau_{rz}(r_1, \varphi) = (1 \mp M)\tau_{rz0}(r_1, \varphi), \qquad (14)$$

где верхний знак соответствует значениям $r_0 > r_1$, а нижний — $r_0 < r_1$.

Отсюда вытекает, что контактные напряжения (14) пропорциональны напряжениям в однородной среде $\tau_{rz0}(r_1, \varphi)$. Максимум касательных напряжений на интерфейсной границе имеет место, когда $\varphi = \pi$. При этом следует отметить, что в случае жесткого включения ($0 < M < 1$) точечная нагрузка, приложенная в пределах матрицы, уменьшает напряжения на интерфейсе, а приложенная внутри включения приводит к увеличению этих напряжений по сравнению с гомогенной средой. Для мягкого включения — ситуация противоположная.

Взаимодействие полубесконечной трещины с включением, имеющим покрытие

Рассмотрим теперь взаимодействие трещины моды III с включением, имеющим интерфейсный слой (покрытие), модуль сдвига которого μ_2 (рис. 1, *б*). Нагружение трещины считаем таким же, как и в рассмотренных задачах. В данном случае трехфазной композиции имеется две межфазных границы, на которых контакт материалов предполагается идеальным, а упругие модули и, следовательно, производные перемещений по радиальной координате терпят разрывы.

Действуем по той же схеме, что и в задаче для включения без покрытия, но вводим в рассмотрение две неизвестные функции $w_k(\theta) = w(r_k, \theta)$ ($k = 1, 2$), которые определяют распределение перемещений на границах раздела; тогда придем к соотношению, аналогичному (9):

$$\mu(r)w(r, \varphi) =$$

$$= \omega_0(r, \varphi) + (\mu_1 - \mu_2)\int_0^{\pi} w_1(\theta)J_1(r, \varphi, \theta)\,d\theta +$$

$$+ (\mu_2 - \mu_0)\int_0^{\pi} w_2(\theta)J_2(r, \varphi, \theta)\,d\theta, \qquad (15)$$

в котором функции при $k = 2$ получаются по формулам (10) с помощью замены r_1 на r_2.

Переходим в соотношении (15) к пределам при $r \to r_k - 0$; тогда неизвестные перемещения можно представить в виде

$$w_1(\varphi) = \frac{2}{\mu_1 + \mu_2}\omega_{01}(\varphi) +$$

$$+ \frac{\varepsilon}{2\pi}\frac{\mu_2 - \mu_0}{\mu_1 + \mu_2}\int_0^{\pi} w_2(\theta)g(\theta, \varphi)\,d\theta; \qquad (16)$$

$$w_2(\varphi) = \frac{2}{\mu_2 + \mu_0}\omega_{02}(\varphi) -$$

$$-\frac{\varepsilon}{2\pi}\frac{\mu_1-\mu_2}{\mu_2+\mu_0}\int_0^{\pi} w_1(\theta)g(\theta,\varphi)\,d\theta, \qquad (17)$$

где

$$\omega_{0n}(\varphi)=\omega_0(r_n,\varphi)\ \ (n=1,2),\ \ \varepsilon=(r_2-r_1)\Big/\left(2\sqrt{r_1 r_2}\right);$$

$$g(\theta,\varphi)=\frac{\cos(\theta+\varphi)/2}{\varepsilon^2+\sin^2(\theta+\varphi)/2}-\frac{\cos(\theta-\varphi)/2}{\varepsilon^2+\sin^2(\theta-\varphi)/2}.$$

Параметр ε характеризует относительную толщину покрытия.

Вводя в рассмотрение две безразмерные функции

$$\omega_1(\varphi)=\frac{\mu_1+\mu_2}{2T_0}w_1(\varphi);\ \ \omega_2(\varphi)=\frac{\mu_2+\mu_0}{2T_0}w_2(\varphi),$$

из (16) и (17) получаем два отдельных интегральных уравнения Фредгольма второго рода с одинаковым симметричным ядром относительно перемещений на интерфейсных границах:

$$\omega_n(\varphi)+\varepsilon^2 M_1 M_2\int_0^{\pi} K(\varphi,\psi)\,\omega_n(\psi)\,d\psi=F_n(\varphi)$$

$$(n=1,2), \qquad (18)$$

где

$$F_1(\varphi)=\bar{\omega}_{01}(\varphi)+\frac{\varepsilon M_2}{2\pi}\int_0^{\pi}\bar{\omega}_{02}(\theta)g(\theta,\varphi)\,d\theta,$$

$$F_2(\varphi)=\bar{\omega}_{02}(\varphi)-\frac{\varepsilon M_1}{2\pi}\int_0^{\pi}\bar{\omega}_{01}(\theta)g(\theta,\varphi)d\theta,$$

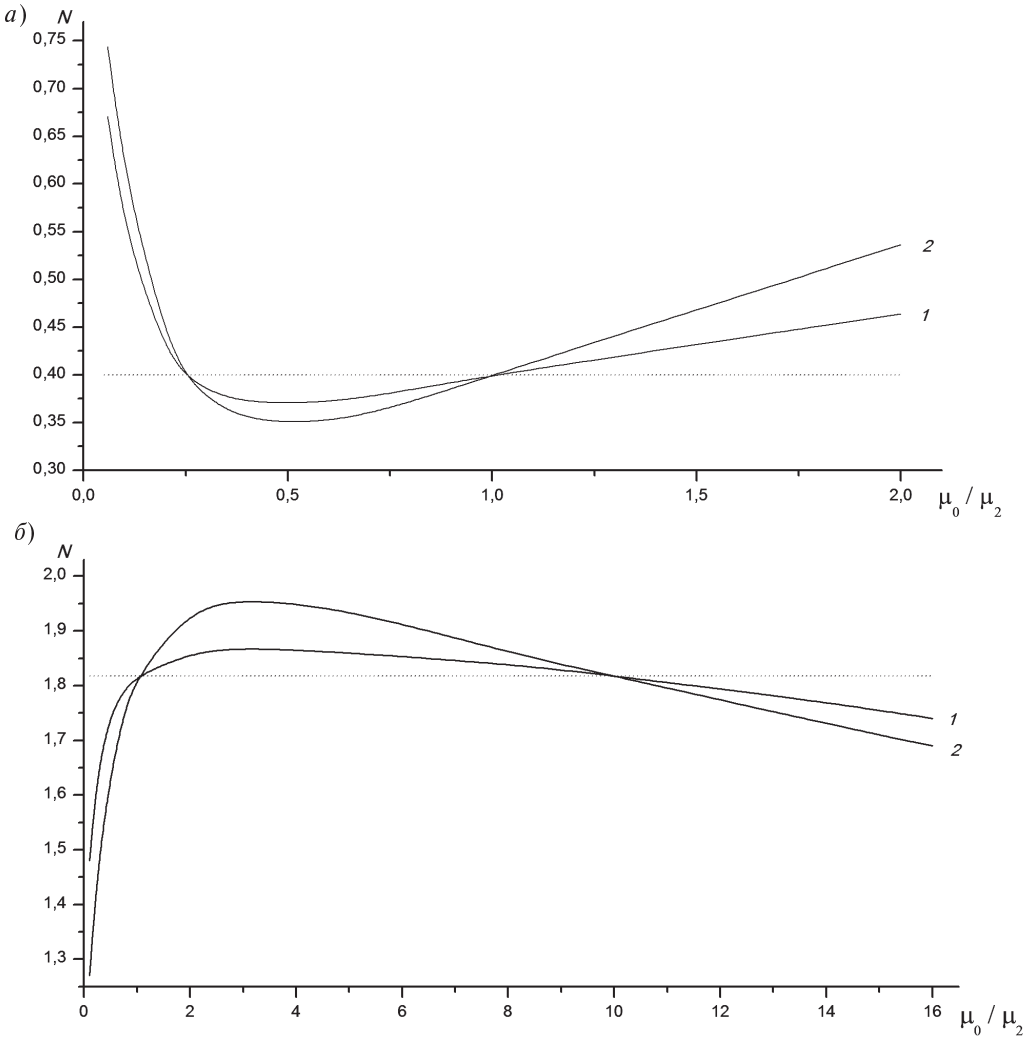


Рис. 2. Зависимости нормализованного КИН от приведенного модуля сдвига покрытия для жесткого (*а*) и мягкого (*б*) ядер включения:
$\mu_0/\mu_1 = 0{,}25$ (*а*) и 10 (*б*);
$\varepsilon = 0{,}20$ (*1*) и 0,75 (*2*). Пунктирная прямая соответствует КИН для включения без покрытия

$$\bar{\omega}_{0n}(\varphi) = \omega_{0n}(\varphi)/T_0,$$

$$K(\varphi,\psi) = \frac{1}{4\pi^2}\int_0^{\pi} g(\theta,\varphi)g(\theta,\psi)\,d\theta.$$

Нормированный коэффициент интенсивности напряжений в вершине трещины выражается через решения уравнений (18) и имеет вид

$$N = \frac{K_{\text{III}}}{K_{\text{III}}^0} = 1 - M_1\sqrt{\frac{r_0}{r_1}}\int_0^{\pi}\omega_1(\theta)\sin\frac{\theta}{2}\,d\theta -$$

$$- M_2\sqrt{\frac{r_0}{r_2}}\int_0^{\pi}\omega_2(\theta)\sin\frac{\theta}{2}\,d\theta. \qquad (19)$$

Заметим, что в соотношения (18), (19) входят только отношения упругих модулей. Для изучения влияния модуля сдвига μ_2 промежуточного слоя на КИН фиксировалось отношение упругих модулей матрицы μ_0 и ядра включения μ_1, а модуль μ_2 подвергался варьированию. Зависимости нормализованного КИН (19) для покрытий конечной толщины от параметра относительной жесткости пары матрица — покрытие μ_0/μ_2 приведены на рис. 2 для жесткого ($\mu_0/\mu_1 = 0{,}25$) и мягкого ($\mu_0/\mu_1 = 10$) по сравнению с матрицей ядра включения. Для сравнения на этих рисунках указаны величины КИН для двухфазных композиций, когда покрытия отсутствуют. Представленные кривые даны для двух значений параметра относительной толщины интерфейсного слоя: $\varepsilon = 0{,}20$ и $0{,}75$ при сосредоточенных нагрузках, приложенных вне включения ($r_0/r_1 = 2$).

На кривых можно выделить три участка. В случае жесткого ядра включения (см. рис. 2, *а*), когда $0 < \mu_0/\mu_2 < \mu_0/\mu_1 < 1$ модуль сдвига промежуточного слоя больше чем у ядра, наличие покрытия снижает эффект шилдинга. Данный эффект усиливается при $\mu_0/\mu_1 < \mu_0/\mu_2 < 1$. Жесткость интерфейсного слоя при этом меньше жесткости ядра включения, но больше жесткости матрицы. Следует отметить, что этот эффект усиливается с возрастанием относительной толщины покрытия. В интервале $1 < \mu_0/\mu_2 < \infty$, когда покрытие имеет самый малый в композиции модуль сдвига, эффект уменьшения КИН снижается по сравнению с двухфазной системой — системой без покрытия. Аналогичные выводы в отношении усиления или ослабления усиливающего эффекта можно сделать и в случае мягкого по сравнению с матрицей ядра включения (см. рис. 2, *б*).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Tamate, O.** The effect of a circular inclusion on the stresses around a line crack in a sheet under tension [Text] / O. Tamate// Int. J. Fracture Mech.— 1968.— Vol. 4.— № 3.— P. 257–266.

2. **Atkinson, C.** The interaction between a crack and an inclusion [Text] / C. Atkinson // Int. J. Eng. Sci.— 1972.— Vol. 10.— № 2.— P. 127–136.

3. **Bhargava, R.R.** A misfitting elastic inclusion in an infinite plane containing a crack [Text] / R.R. Bhargava // J. of Elast.— 1977.— Vol. 7.— № 2.— P. 201–211.

4. **Erdogan, F.** Interaction between a circular inclusion and arbitrary oriented crack [Text] / F. Erdogan, G.D. Gupta, M. Ratwani // Trans. ASME. Ser. E.J. Appl. Mech.— 1974.— Vol. 41.— № 4.— P. 1007–1013.

5. **Hsu, Y.C.** Interaction between a circular inclusion and two symmetrically placed collinear cracks. [Text] / Y.C. Hsu, V. Shivakumar // Int. J. Fracture— 1976.— Vol. 12.— № 4.— P. 619–630.

6. **Steif, P.S.** A semi-infinite crack partially penetrating a circular inclusion. [Text] / P.S. Steif // Trans. ASME. Ser. E.J. Appl. Mech.— 1987.— Vol. 54.— № 1.— P. 87–92.

7. **Cheeseman, B.A.** The interaction of a curved crack with a circular elastic inclusion [Text] / B.A. Cheeseman, M.H. Santare // Int. J. Fracture.— 2000.— Vol. 103.— № 2.— P. 259–277.

8. **Wang, X.** Closed-form solutions for a mode III radial matrix crack penetrating a circular inho-mogeneity [Text] / X. Wang, E. Pan, W.J. Feng // Appl. Math. Modelling— 2008.— Vol. 32.— P. 2925–2935.

9. **Морозов, Н.Ф.** Математические вопросы теории трещин [Текст] / Н.Ф. Морозов.— М.: Наука, 1984.— 256 с.

10. **Li, Z.** The stress intensity factors for a short crack partially penetrating an inclusion of arbitrary shape [Text] / Z. Li, L. Yong, S. Li, J. Sun // Int. J. Fracture.— 2007.— Vol. 148.— № 3.— P. 243–250.

11. **Lipetzky, P.** Crack-particle interaction in two-phase composites. Part I: Particle shape effects [Text] / P. Lipetzky, S. Schmauder//Int. J. Fracture— 1994.— Vol. 65.— № 3.— P. 345–358.

12. **Williams, R.C.** SGBEM analysis of crack-particle(s) interaction due to elastic constants mismatch [Text] / R.C. Williams, A.V. Phan, H.V. Tippur [et al.] // Eng. Fract. Mech.— 2007.— Vol. 74.— № 2.— P. 314–331.

13. **Xu, Y.L**. Stress intensity factors for a crack encircled by an annular inclusion in an infinite plane [Text] / Y.L. Xu, F. Delale// Int. J. Fracture— 1993.— Vol. 59.— № 1.— P. 1–22.

14. **Xiao, Z.M**. Stress intensity factor for a Griffith crack interacting with a coated inclusion [Text] / Z.M. Xiao, B.J. Chen// Int. J. Fracture— 2001.— Vol. 108.— № 2.— P. 193–205.

15. **Knight, M.G**. A study of the interaction between a propagating crack and an uncoated/coated inclusion using BE technique [Text] / M.G. Knight, L.C. Wrobel, J.L. Henshall, L.A. De Lacerda // Int. J. Fracture— 2002.— Vol. 114.— № 1.— P. 47–61.

16. **Попов, Г.Я.** Концентрация упругих напряжений возле штампов, разрезов, тонких включений и подкреплений [Текст] / Г.Я. Попов.— М.: Наука, 1982.— 344 с.

17. **Ванин, Г.А**. Микромеханика композиционных материалов [Текст] / Г.А. Ванин.— Киев: Наук. думка, 1985.— 304 с.

18. **Градштейн, И.С.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений [Текст]: справочник / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик.— М.: Наука, 1971.— 1108 с.

УДК 524.3-17, 524.354

А.М. Быков, А.Е. Владимиров,
А.М. Красильщиков, Г.Г. Павлов

СПЕКТРАЛЬНАЯ ДИАГНОСТИКА РАДИАТИВНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН В МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЕ

Ударные волны (УВ) рождаются в межзвездной среде повсюду, где происходит значительное выделение энергии: в остатках сверхновых звезд, взаимодействующих с атомными или молекулярными облаками [1], в объектах Хербига — Аро [2], в новых звездах [3], в аккреционных потоках около активных галактических ядер [4]. Отличительные особенности УВ в межзвездной среде галактик связаны с тем, что релаксационные процессы во фронтах быстрых УВ со скоростями выше нескольких десятков км/с часто имеют бесстолкновительный характер, т. е. обусловлены коллективными плазменными процессами. Отдельный важный класс ударных волн — радиативные волны характеризуются наличием как ионизованной компоненты, так и частично ионизованной плазмы, нейтральных атомов, пыли и электромагнитного излучения. Как следствие, в таких УВ имеют место несколько релаксационных процессов существенно различной временной протяженности. В отличие от адиабатических УВ, радиативные волны переизлучают значительную долю кинетической энергии натекающего потока в спектральных линиях различных ионов и атомов. Это позволяет непосредственно наблюдать излучение и исследовать спектры радиативных УВ в межзвездной среде. Фотоны уносят часть энергии газа, что приводит к увеличению степени сжатия и является важным фактором в динамике межзвездной среды.

Численные модели радиативных ударных волн разрабатываются несколькими научными группами с 1970-х годов [5–8]. Основные отличия модели, представленной в настоящей работе, от работ других авторов состоят в использовании современной базы данных CHIANTI, содержащей информацию об энергетических состояниях и скоростях спонтанных и столкновительных переходов в нескольких десятках ионов основных химических элементов от водорода до никеля [9], и учете ряда физических эффектов, которые могут оказать существенное влияние на формирование излучения в окрестности радиативной ударной волны. К таким эффектам относится модификация ударного фронта ускоренными частицами, нагрев газа за ударным фронтом за счет диссипации турбулентности, генерированной при развитии неустойчивостей тока ускоренных частиц в предфронте, а также разрушение пыли в области за ударным фронтом, обогащающее излучающий газ железом, кремнием и кислородом.

Представленная модель позволяет вычислять спектр излучения радиативной ударной волны с заданными параметрами (скорость волны, плотность невозмущенной межзвездной среды и ее химический состав, величина поперечного магнитного поля) от мягкого рентгеновского до дальнего инфракрасного диапазона. Сопоставление семейства модельных спектров, и, в частности, отношений наиболее сильных спектральных линий с наблюдениями позволяет дать оценки на параметры межзвездной среды в космических объектах с экстремальным энерговыделением.

Эволюция потока газа за фронтом радиативной ударной волны в межзвездной среде

Эволюция одномерного потока за фронтом ударной волны, распространяющегося вдоль направления x, может быть описана следующей системой уравнений:

$$\rho u = \rho_0 u_0; \qquad (1)$$

$$\rho u^2 + p_e + p_i + p_m = \Pi\rho_0 u_0; \qquad (2)$$

$$\frac{3}{2} n_i u \frac{dT_i}{dx} = -n_i T_i \frac{du}{dx} - \frac{3m_e}{\mu} \frac{n_e}{\tau_{ei}} (T_i - T_e); \qquad (3)$$

$$\frac{3}{2} n_e u \frac{dT_i}{dx} = -n_e T_e \frac{du}{dx} + \frac{3m_e}{\mu} \frac{n_e}{\tau_{ei}} (T_i - T_e) -$$

$$-\Lambda - \frac{3}{2} n_i T_e u \frac{dz}{dx}, \qquad (4)$$

где z, μ — средний заряд и масса иона; p_e, p_i — давление электронов и ионов, подчиняющиеся уравнению состояния идеального газа, т. е.

$$p_e + p_i = n_i k_B (zT_e + T_i);$$

p_m — магнитное давление, которое следует выражению $p_m = \frac{B_0^2 \rho^2}{8\pi\rho_0^2}$, $\Pi = \frac{u_a}{u_0} + \frac{B_0^2}{8\pi\rho_0 u_0 u_a} + k_B M T_i^a \times$

$\times \frac{z\beta + 1}{u_0 u_a \mu}$ $\left(M = \frac{\mu}{z m_e + \mu} \right)$; Λ — функция охлаждения; последнее слагаемое в уравнении (4) описывает уменьшение температуры электронов за счет ионизации; величины u_0, B_0, ρ_0 — скорость потока, величина поперечного магнитного поля и плотность газа в невозмущенной области перед фронтом ударной волны; u_a, T_i^a, β — скорость потока, температура ионов и отношение температур электронов и ионов сразу за ударным фронтом.

Характеристики потока перед фронтом ударной волны являются, наряду со скоростью волны и химическим составом вещества в невозмущенной области, параметрами модели, а величины скорости потока и температуры ионов сразу за ударным фронтом либо определяются адиабатой Гюгонио, либо зависят от доли энергии, уносимой ускоренными частицами.

Функция охлаждения Λ определяется как

$$\Lambda = n^2 \Lambda_c + n_e \sum_{i,j} (n_{i,j} \alpha_{i,j} E^r_{i,j} + n_{i,j} C_i h\nu_j) -$$

$$-4\pi \sum_{i,j} \int_{\nu_j}^{\infty} d\nu \sigma^p_{i,j} (1 - \nu_j / \nu) n_{i,j} J_\nu, \qquad (5)$$

где i — номер химического элемента, j — ионизационное состояние; слагаемое Λ_c включает охлаждение в результате тормозного излучения электронов и излучения в линиях ионов, возбужденных электронным ударом, но не включает охлаждение за счет радиативной рекомбинации; $\alpha_{i,j}$ — скорость рекомбинации элемента i из состояния $j+1$ в состояние j; $E_{i,j}$ — средняя энергия рекомбинирующих электронов; $C_{i,j}$ — скорость столкновительной ионизации; $\sigma_{i,j}^p$ — сечение фотоионизации; J_ν — усредненная по углу плотность ионизирующего излучения на частоте ν.

Эволюция ионизационного состояния j элемента i определяется уравнением

$$u \frac{dn_{i,j}}{dx} = n_e (n_{i,j-1} C'_{i,j-1} - n_{i,j} C'_{i,j} - n_{i,j} \alpha'_{i,j} +$$

$$+ n_{i,j+1} \alpha'_{i,j+1}) + n_{i,j-1} R_{i,j-1} - n_{i,j} R_{i,j} +$$

$$+ \sum_{s=\mathrm{H,He,He^+}} n_s \left[n_{i,j-1} V_{s,i,j-1} - n_{i,j} (V_{s,i,j} + U_{s,i,j}) + \right.$$

$$\left. + n_{i,j+1} U_{s,i,j+1} \right], \qquad (6)$$

где R_{ij} — скорости фотоионизации; V_s, U_s — скорости ионизации и рекомбинации в реакциях перезарядки с ионом s; $C'_{i,j} = C_{i,j} + C^a_{i,j}$, $\alpha'_{i,j} = \alpha_{i,j} + \alpha^{2e}_{i,j}$ (C_{ij}^a — скорость автоионизации, α_{ij}^{2e} — скорость диэлектронной рекомбинации).

Поле ионизующего излучения в предфронте и за фронтом вычисляется с помощью стандартного уравнения переноса:

$$\cos\theta \frac{dI_\nu}{dx} = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu, \qquad (7)$$

где θ — угол между нормалью к ударному фронту и направлением распространения излучения; в коэффициент поглощения κ_ν вносят вклад только связанно-свободные переходы

$$\kappa_\nu = \sum_{i,j} n_{i,j} \sigma^p_{i,j},$$

а в коэффициенте излучения j_ν суммированы следующие вклады:

разрешенных ультрафиолетовых и оптических линий, возбуждаемых электронным ударом;

рекомбинационных каскадов водорода и гелия;

свободно-свободного излучения электронов, рассеивающихся на ионах;

двухфотонного континуума, излучаемого водородо- и гелиеподобными ионами, метастабильные уровни которых заселяются столкновительным образом; рекомбинационного континуума.

Все спектральные линии, за исключением лаймоновской L_α, считаются оптически тонкими, а перенос в линии L_α рассчитывается при помощи формализма двухуровневого атома [10].

Уравнение переноса излучения интегрируется в рамках глобальной итерационной схемы совместно с газодинамическими уравнениями, описывающими течение газа как за фронтом, так и в области предфронта. В предфоронте перенос ионизирующего излучения существенно влияет на ионизационное состояние вещества, втекающего в ударный фронт (а следовательно, и на эмиссионный спектр этого вещества в нагретой области за фронтом).

Модификация ударного фронта ускоренными частицами. Условия разрыва термодинамических величин на ударном фронте при наличии магнитного поля могут быть найдены из стандартных уравнений магнитной гидродинамики и законов сохранения числа частиц, импульса и энергии. Вытекающее из этих условий уравнение для степени сжатия газа r при переходе через фронт имеет вид

$$r^3 + r^2\left(2c_1 + 5c_2 + 4\right) - \\ -r\left(10c_1 + 5c_2 + 5\right) + 8c_1 = 0, \qquad (8)$$

где $c_1 = \dfrac{8\pi\rho_0 u_0^2}{2B_0^2}$ — отношение плотностей кинетической и магнитной энергии газа; а $c_2 = \dfrac{8\pi n_0\left(1+z_0\right)k_{\mathrm{B}}T_0}{B_0^2}$ — отношение плотностей тепловой и магнитной энергии.

В сильной ударной волне $c_1 \to \infty$ и степень сжатия r стремится к классическому значению 4.

Современные модели ударных волн, учитывающие ускорение частиц на фронте, предсказывают более сложные соотношения между величинами, описывающими состояние газа перед и за фронтом УВ. Ускоренные частицы создают предфронт — примыкающий к фронту слой газа, нагретого диссипацией турбулентных магнитных полей, которые порождаются неустойчивостями тока ускоренных частиц. При этом сам фронт, на котором термодинамические величины меняются скачком, оказывается достаточно слабым, с локальной степенью сжатия около 3, в то время как глобальная степень сжатия r может существенно превышать максимальное для классической ударной волны значение 4 [11, 12]. Температура за фронтом такой модифицированной ударной волны, оказывается ниже, чем в классическом случае, и пропорциональна r^{-2}.

Нагрев газа за ударным фронтом за счет диссипации флуктуирующего магнитного поля. Неустойчивости тока космических лучей в предфронте бесстолкновительной ударной волны могут приводить к эффективной конверсии кинетической энергии потока газа во флуктуирующие продольные магнитные поля, которые затем проникают за фронт и могут служить источником дополнительного нагрева газа [12]. Согласно работе [13] затухание таких полей связано со столкновениями заряженных частиц с нейтральными, и его инкремент пропорционален доле нейтральных частиц в среде. Поскольку плотность энергии турбулентных полей возрастает при сжатии газа, соответствующая скорость нагрева пропорциональна локальному значению плотности среды. Таким образом, часть плотности энергии натекающего потока

$$W_f = \eta\frac{\rho_0 u_0^2}{2},$$

где η может составлять величину порядка 0,1—0,3, может быть конвертирована в энергию флуктуаций, которая выделяется в той области за ударным фронтом, где температура газа опускается ниже 10000 K и в результате рекомбинации появляется заметное количество нейтральных частиц. Соответствующее слагаемое, которое добавляется к правой части уравнения (5), можно записать как

$$\Lambda_f = -\frac{W_f u_0 n f_n}{N_f}, \qquad (9)$$

где f_n — доля нейтральных частиц; а N_f, см$^{-2}$ — нормировочный множитель; он по смыслу является размером области, в которой выделяется энергия флуктуаций (в единицах колонковой толщи).

Разрушение пыли за ударным фронтом. Состав межзвездной среды, в которой распространяется ударная волна в остатке сверхновой звезды, существенно отличается от солнечного состава. В частности, значительная часть железа, кремния, кислорода и некоторых других элементов содержится не в газовой, а в пылевой фазе. При прохождении ударного фронта эти

пылинки могут разрушаться, в основном, за счет скалывания при столкновениях с горячими протонами, и таким образом, состав газа в области за ударным фронтом может обогащаться указанными выше элементами, содержание которых по мере прохождения через нагретую область может возрастать вплоть до солнечного [1]. Изменение состава газа за фронтом, несомненно, влияет на излучаемые спектры, причем в случае кислорода, мощное излучение в линиях которого динамически важно для всего охлаждающегося потока газа, это влияние оказывается существенно нелинейным. Помимо обогащения состава газа за фронтом, пыль вносит некоторый вклад и в функцию охлаждения, который, впрочем, не очень велик в рассматриваемом диапазоне параметров волн и невозмущенной межзвездной среде.

В представленной модели разрушение пыли описывается как линейный по колонковой толще процесс для каждого из выделяемых химических элементов. Количество выделенного из пыли в газ элемента и характерный масштаб, на котором происходит это выделение, являются параметрами модели и позволяют качественно понять, как влияет такой процесс на спектры, излучаемые за фронтом ударной волны. Детальное моделирование процессов разрушения пыли, обсуждение типоразмеров и составов пылинок выходит за рамки настоящей работы.

Профили течения и модельные спектры

С помощью представленной модели можно адекватно описывать ударные волны со скоростями 80–200 км/с в межзвездной среде плотностью 1–100 см$^{-3}$. Более медленные течения могут не иметь разрывов (так называемая С-волна [1]) и, следовательно, требуют других средств описания. Более быстрые волны или волны в сильно разреженной среде не будут радиативными (так называемые бальмеровские волны) — излучение в спектральных линиях металлов, генерируемое за фронтом таких волн, имеет малую интенсивность и не оказывает влияния на их динамику. Для изучения бальмеровских волн с успехом используются данные о профиле линии H_α, структура которого содержит важную информацию о физических процессах в предфронте быстрой ударной волны и об эволюции ионизационного состоянии водорода за ее фронтом. Распространение УВ в плотных облаках и сгустках газа с невозмущенной плотностью более 100 см$^{-3}$ невозможно адекватно описать без детального учета процессов рождения и диссоциации молекул, эффективного охлаждения потока за счет излучения линий молекулами водорода H_2 и оксида углерода CO. Такое рассмотрение находится за рамками настоящей работы.

При расчете модельных профилей течения и спектров использовались два типа химических составов. Состав «А» соответствует составу межзвездного облака в направлении на звезду ζ Змееносца, где по сравнению с солнечным изобилием большая часть железа, кремния и примерно половина кислорода содержатся не в газовой, а в пылевой фазе. Состав «В» соответствует начальному составу типа «А», но на масштабе $N_H \sim 3\cdot10^{18}$ см$^{-2}$ большая часть указанных элементов возвращается линейно по N_H в газовую фазу из-за разрушения пылинок.

На рис. 1 представлены профили течения газа за ударным фронтом для различных значений скорости ударной волны от 100 до 200 км/с. Плотность невозмущенной среды n_0 для всех расчетов составляла 10 см$^{-3}$. На рис. 2 представ-

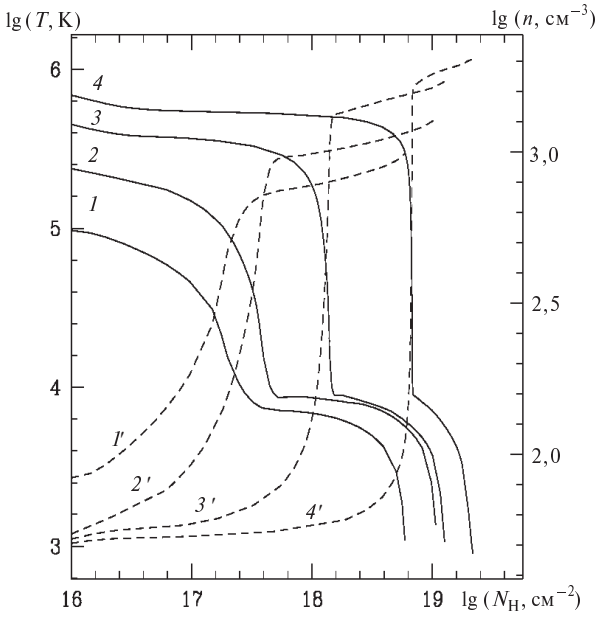


Рис. 1. Расчетные профили температуры газа (*1–4*) и его плотности (*1′–4′*) за ударным фронтом для различных значений скорости ударной волны u_0, км/с: 100 (*1,1′*);130 (*2,2′*); 170 (*3,3′*); 200 (*4,4′*).

Плотность невозмущенной среды n_0 = 10 см$^{-3}$. Состав среды соответствует составу облака в направлении звезды ζ Змееносца

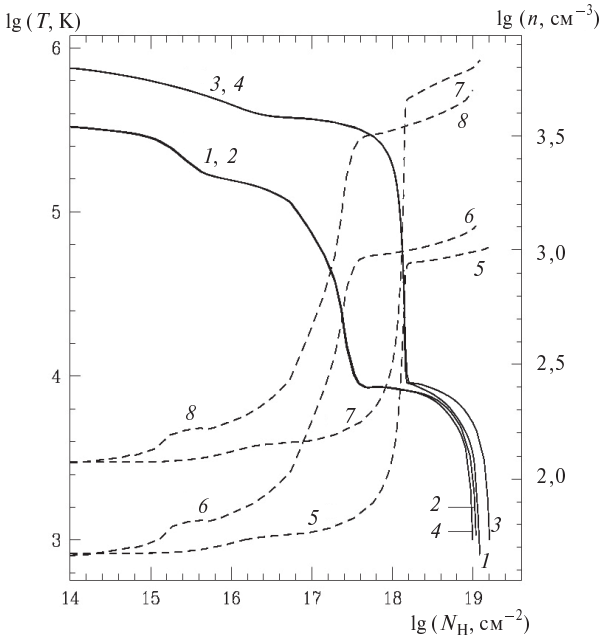


Рис. 2. Расчетные профили температуры газа (*1–4*) и его плотности (*5–8*) за ударным фронтом для двух типов ударных волн — классической (*1*, *3*, *5*, *7*) и модифицированной ускоренными частицами (*2*, *4*, *6*, *8*), а также для двух значений невозмущенной плотности n_0, см$^{-3}$: 10 (*1*, *3*, *5*, *7*) и 25 (*2*, *4*, *6*, *8*).

Скорость ударной волны u_0 = 170 км/с. Состав среды соответствует составу облака в направлении звезды ζ Змееносца

лены профили течения газа за ударным фронтом для случаев как классической, так и модифицированной ускоренными частицами ударных волн, движущихся со скоростью u_0 = 170 км/с в среды со значениями невозмущенной плотности n_0, равными 10 и 25 см$^{-3}$. В модифицированных волнах около 1 % энергии потока конвертируется в ускоренные частицы, что примерно соответствует степени сжатия r = 4,1. В расчетах, представленных на рис. 1 и 2, предполагалось, что межзвездная среда имеет состав типа «А». В табл. 1 приведены интенсивности наиболее ярких эмиссионных линий, излучаемых перпендикулярно фронту ударной волны, распространяющейся со скоростью u_0 = 130 км/с в среду с плотностью n_0 = 10 см$^{-3}$ для составов типа «А» и «В». В табл. 2 приведены зависимости яркости наиболее значимых линий ИК-диапазона от скорости ударного фронта при распространении в среду с плотностью n_0 = 10 см$^{-3}$ для составов типа «А» и типа «В». В табл. 3 приведена яркость наиболее значимых линий ИК-диапазона для случая стандартной волны и волны, модифицированной ускоренными частицами, распространяющихся с одной и той же скоростью u_0 = 170 км/с.

Итак, в настоящей работе рассчитаны интенсивности спектральных линий ультрафиолетового, видимого и инфракрасного диапазонов, излучаемых за фронтом радиативной ударной волны в межзвездной среде. Чувствительность рассчитанных интенсивностей линий и отношений этих интенсивностей к параметрам модели позволяет использовать модельные расчеты как диагностический инструмент для исследования физических параметров межзвездной среды в остатках сверхновых звезд, объектах Хербига — Аро, и в окрестности других космических объектов с экстремальным энерговыделением.

Таблица 1

Наиболее яркие линии, излучаемые в среды составов «А» и «В» в направлении, перпендикулярном фронту УВ

Спектральный диапазон	Характеристика и идентификация линии излучения					
	Состав «А»			Состав «В»		
	B, 10^{-6} эрг/(см^2·с·ср)	λ, мкм	Ион	B, 10^{-6} эрг/(см^2·с·ср)	λ, мкм	Ион
УФ	188,0	0,0304	He II	187,0	0,0304	He II
	45,7	0,1216	H I	46,6	0,1216	H I
	37,4	0,1549	C IV	37,3	0,1549	C IV
	23,6	0,0256	He II	23,9	0,0554	O IV
	23,6	0,0554	O IV	23,5	0,0256	He II
	22,8	0,0789	O IV	23,1	0,0789	O IV
	21,2	0,0765	N IV	21,8	0,0765	N IV

Окончание табл. 1

Спектральный диапазон	Характеристика и идентификация линии излучения					
	Состав «А»			Состав «В»		
	B, 10^{-6} эрг/(см^2·с·ср)	λ, мкм	Ион	B, 10^{-6} эрг/(см^2·с·ср)	λ, мкм	Ион
Оптический	40,1	0,6724	S II	32,0	0,6724	S II
	24,8	0,3728	O II	23,2	0,3728	O II
	21,2	0,6577	N II	20,3	0,6577	N II
	17,9	0,6565	H I	16,9	0,6565	H I
	9,8	0,4996	O III	9,9	0,4996	O III
	6,1	0,4863	H I	5,7	0,4863	H I
	5,0	0,6300	O I	3,7	0,6300	O I
Ближний ИК	3,55	0,9823	C I	3,94	1,2714	Fe II
	1,68	1,0323	S II	2,98	0,9823	C I
	1,18	1,0833	He I	2,83	5,2932	Fe II
	0,57	1,0800	S I	2,27	1,2600	Fe II
	0,33	1,0126	He II	1,42	1,0324	S II
	0,31	1,0400	N I	1,17	1,0833	He I
	0,15	1,2714	Fe II	1,10	1,4400	He I
Средний и дальний ИК	6,28	12,8	Ne II	7,87	34,8	Si II
	3,87	63,1	O I	5,41	12,8	Ne II
	2,14	15,6	Ne III	2,72	63,1	O I
	1,49	34,8	Si II	2,08	15,6	Ne III
	0,85	157,7	C II	1,61	26,0	Fe II
	0,51	25,9	O IV	0,52	157,7	C II
	0,45	145,6	O I	0,51	25,9	O IV

Примечания. 1. Яркости линий приведены на одну поляризацию.
2. Скорость распространения УВ $u_0 = 130$ км/с.
3. Плотность сред $n_0 = 10$ см$^{-3}$.

Таблица 2

Зависимость яркостей наиболее значимых эмиссионных линий ИК-диапазона от скорости ударного фронта при распространении в среды двух составов

Состав среды	u_0, км/с	Яркость спектральной линии B, 10^{-6} эрг/(см^2·с·ср) и отношение яркостей B_k/B_l						
		Ne II 12,8 мкм	O I 63,1 мкм	Ne III 15,6 мкм	Si II 34,8 мкм	C II 157,7 мкм	$B_{\text{NeIII}}/B_{\text{NeII}}$	$B_{\text{CII}}/B_{\text{OI}}$
«А»	100	2,18	1,63	0,41	0,69	0,48	0,19	0,29
	130	6,28	3,87	2,14	1,49	0,85	0,34	0,22
	170	8,66	5,12	3,10	1,78	0,99	0,36	0,19
	200	10,40	6,54	4,11	2,08	1,27	0,40	0,19
«В»	100	1,79	0,95	0,42	1,84	0,24	0,23	0,25
	130	5,41	2,72	2,08	7,87	0,52	0,38	0,19
	170	7,31	3,43	2,93	10,8	0,62	0,40	0,18
	200	6,27	3,56	3,15	11,0	0,71	0,50	0,20

См. примечания 1,3 к табл. 1.

Таблица 3

Спектральные характеристики наиболее значимых эмиссионных линий ИК-диапазона для двух типов ударных волн: классической и модифицированной ускоренными частицами

Ион	λ, мкм	Яркость спектральной линии B, 10^{-6} эрг/(см^2·с·ср) и отношение яркостей B_k/B_l			
		Классическая УВ		Модифицированная УВ	
		$n_0 = 10$ см$^{-3}$	$n_0 = 25$ см$^{-3}$	$n_0 = 10$ см$^{-3}$	$n_0 = 25$ см$^{-3}$
Ne II	12,8	8,66	23,7	6,63	17,8
Ne III	15,6	3,10	6,90	1,97	4,50
Si II	34,8	1,78	2,65	1,47	2,33
O I	63,1	5,12	12,6	3,96	9,81
C II	157,7	0,99	0,95	0,90	0,86
NeIII/NeII		0,36	0,29	0,30	0,25
CII/OI		0,19	0,075	0,23	0,088

Примечания. 1. Яркости линий приведены на одну поляризацию.
2. Скорость распространения УВ $u_0 = 170$ км/с.
3. УВ распространяется в среду состава «А».

Нелинейные процессы в предфронте бесстолкновительных ударных волн в межзвездной среде, в частности ускорение частиц и генерация турбулентных магнитных полей, существенным образом влияют на спектры, излучаемые за фронтом таких волн. Таким образом, сопоставление отношений интенсивностей спектральных линий, наблюдаемых вблизи ударных волн в остатках сверхновых звезд, с модельными расчетами позволяет дать независимую оценку эффективности конверсии энергии ударной волны в ускоренные частицы, жесткое гамма-излучение которых зарегистрировано с помощью современных гамма-обсерваторий AGILE, VERITAS, H.E.S.S. и Fermi [14, 15].

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 11-02-12082-офи-м-2011; часть расчетов в данной работе выполнена в суперкомпьютерных центрах президиума РАН и ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Draine, B.T.** Theory of interstellar shocks [Текст] / B.T. Draine, C.F. McKee // Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 1993.— Vol. 31.— P. 373— 432.

2. **Teşileanu, O.** Time-dependent MHD shocks and line intensity ratios in the HH-30 jet: A focus on cooling function and numerical resolution [Текст] / O. Teşileanu, S. Massaglia, A. Mignone, [et al.] // Astronomy and Astrophysics, 2009.—Vol. 507.— P. 581— 588.

3. **Evans, A.** Spitzer and ground-based infrared observations of the 2006 Eruption of RS Ophiuchi [Текст] / A. Evans, C.E. Woodward, L.A. Helton [et al.] // Astrophysical Journal, 2007.—Vol. 663.— P. L29— L32.

4. **Farage, C.L.** Optical IFU observations of the brightest cluster Galaxy NGC 4696: the case for a Minor Merger and shock-excited filaments [Текст] / C.L. Farage, P.J. McGregor, M.A. Dopita, [et al.] // Astrophysical Journal, 2010.—Vol. 724.— P. 267— 284.

5. **Cox, D.P.** Theoretical structure and speectrum of a shock wave in the interstellar medium [Текст] / D.P. Cox // Astrophysical Journal, 1972.— Vol. 178.— P. 143— 158.

6. **Shull, J.M.** Theoretical models of interstellar shocks. I— Radiative transfer and UV precursors [Текст] / J.M. Shull, C.F. McKee) // Astrophysical Journal, 1979.— Vol. 227.— P. 131— 149.

7. **Raymond, J.** Shock waves in the interstellar medium [Текст] / J. Raymond // Astrophysical Journal Supplement Series, 1979.— Vol. 39.— P. 1— 27.

8. **Dopita, M.A.** Spectral signatures of fast shocks. I— Low density model grid [Текст] / M.A. Dopita, R. Sutherland // Astrophysical Journal. Supplement Series.— 1996.— Vol. 102.— P. 161— 188.

9. **Dere, K.** CHIANTI— an atomic database for emission lines [Текст] / K. Dere, E. Landi,

P.R. Young, [et al.] // Astronomy and Astrophysics, 2009.— Vol. 498.— P. 915— 929.

10. **Mihalas, D.** Foundations of radiation hydrodynamcs [Текст] / D. Mihalas, B.W. Mihalas.— New York: Oxford University Press.— 1984.— 731 p.

11. **Bykov, A.M.** Shocks and particle acceleration in SNRs: Theoretical aspects [Текст] / A.M.Bykov // Advances in Space Research, 2004.— Vol. 33.— P. 366— 375.

12. **Vladimirov, A.E** Turbulence dissipation and particle injection in nonlinear diffusive shock acceleration with magnetic field amplification [Текст] / A.E. Vladimirov, A.M. Bykov, D.C. Ellison // Astrophysical Journal.— 2008.— Vol. 688.— P. 1084–1101.

13. **Bykov, A.M.** Generation of magnetic fluctuations near a shock front in a partially ionized medium [Текст] / A.M. Bykov, I.N. Toptygin // Astronomy Letters, 2005.— Vol. 31.— P. 748— 754.

14. **Ohira, Y**. Gamma-rays from molecular clouds illuminated by cosmic rays escaping from interacting supernova remnants [Текст] / Y. Ohira, K. Murase, R. Yamazaki // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.— 2011.— Vol. 410.— P. 1577— 1582.

15. **Torres, D.** The GeV to TeV connection in the environment of SNR IC 443 [Текст] / D. Torres, A. Marrero, E. de Cea del Pozo // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society.— 2010.— Vol. 408.— P. 1257— 1266.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

АБРАМЁНОК Оксана Анатольевна — *студентка радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-16
n.k.krasnova@mail.ru

БАБИЧЕВ Андрей Владимирович — *аспирант лаборатории физики анизотропных материалов ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, инженер научно-образовательного центра нанотехнологий РАН Санкт-Петербургского академического университета.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 297-22-45
scientific.ocean@gmail.com.

БАГАЕВ Кирилл Александрович — *аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
kirickbagaev@mail.ru

БАГРАЕВ Николай Таймуразович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812)292-73-15
bagraev@mail.ioffe.ru

БЕРДНИКОВ Александр Ярославич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

БОСАК Алексей Александрович — *доктор физико-математических наук, ответственный исследователь Европейского центра синхротронных исследований, г. Гренобль, Франция.*

6 Rue Jules Horowitz BP 220 38043 Grenoble Cedex 9 France
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

БРИЛИНСКАЯ Елена Станиславовна — *аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812)552-77-90
lyalka-bes@rambler.ru

БУТКО Владимир Юрьевич — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики анизотропных материалов ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, доцент научно-образовательного центра нанотехнологий РАН Санкт-Петербургского академического университета.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 297-22-45
vladimirybutko@gmail.com.

БЫКОВ Андрей Михайлович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий лабораторией астрофизики высоких энергии ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 292-73-26
byk@astro.ioffe.ru

ВАСИЛЬЕВ Александр Электронович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-74
kozlovski@physics.spbstu.ru

ВАХРУШЕВ Сергей Борисович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий лабораторией нейтронных исследований ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-73-33
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

ВИННИЧЕНКО Максим Яковлевич — *аспирант кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
mvin@spbstu.ru

ВЛАДИМИРОВ Андрей Евгеньевич — *доктор философии (Ph.D), научный сотрудник Стэндфордского университета, США.*
Stanford University 450 Serra Mall Stanford, CA 94305
1(650) 723-43-44
avladim@stanford.edu

ВОРОБЬЕВ Леонид Евгеньевич — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
lvor@rphf.spbstu.ru

ВШИВКОВ Олег Юрьевич — *кандидат технических наук, докторант, старший научный сотрудник Научного центра порошкового материаловедения Пермского государственного технического университета.*
614099 г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 239-11-99
olyvol206@mail.ru.

ГАСУМЯНЦ Виталий Эдуардович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
vgas@rphf.spbstu.ru

ГЕЦ Дмитрий Станиславович — *аспирант лаборатории атомной радиоспектроскопии Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 292-73-15
smart_insulator@mail.ru

ГИРГИДОВ Артур Давидович — *доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29.
(812) 552-64-01.
hydraulika@cef.spbstu.ru

ГРИГОРЬЕВ Петр Юрьевич — *студент физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
grigorievpit@gmail.com

ДАМЯНОВИЧ Драганн — *доктор наук, профессор лаборатории керамики Швейцарского технологического института, г. Лозанна, Швейцария.*
EPFL CH-1015 Lausanne, Switzerland
[+41 21 69] 32989
dragan.damjanovic@epfl.ch

ДЕМИДОВ Дмитрий Михайлович — *кандидат технических наук, старший научный сотрудник ЗАО «Полупроводниковые приборы», заместитель генерального директора по научно-техническому развитию.*
194156, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, д. 27
(812) 294-25-32
sales@atcsd.ru.

ЕМЦЕВ Вадим Валентинович — *кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 552-75-74
kozlovski@physics.spbstu.ru

ЖУРКИН Евгений Евгеньевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
ezhurkin@phmf.spbstu.ru

ЗЕГРЯ Георгий Георгиевич — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-77-90
zegrya@theory.ioffe.ru

ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович — *младший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
ivanishchev@gmail.com

КЛЯЧКИН Леонид Ефимович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 292-73-15
klyachkin@mail.ioffe.ru

КОЗЛОВСКИЙ Виталий Васильевич — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-74
kozlovski@physics.spbstu.ru

КОЗЛОВСКИЙ Станислав Станиславович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
kirickbagaev@mail.ru

КОЛГАТИН Сергей Николаевич — *доктор технических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-77-90
sergey.kolgatin@str-soft.com

КОМАРОВА Ольга Сергеевна — *аспирант кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
olik-komarik@rambler.ru

КОРАБЛЕВ-ДАЙСОН Максим Александрович — *аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-73-33
maxdyson@gmail.com

КОТОВ Дмитрий Олегович — *кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
dmitriy.kotov@gmail.com

КРАСИЛЬЩИКОВ Александр Михайлович — *кандидат физико-математических наук, заместитель заведующего межфакультетской научной лабораторией 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., д. 29.
(812) 292-71-80
kra@astro.ioffe.ru

КРАСНОВА Надежда Константиновна — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-16
n.k.krasnova@mail.ru

ЛЕУС Роман Викторович — *начальник участка ЗАО «Полупроводниковые приборы».*
194156, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, д. 27
(812) 294-25-32
sales@atcsd.ru.

МАЛЯРЕНКО Анна Михайловна — *кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории атомной радиоспектроскопии Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 292-73-15,
malyarenko@mail.ioffe.ru

МАРТЫНОВА Ольга Александровна — *инженер кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
olya218@yandex.ru

МЕЛЕНТЬЕВ Григорий Александрович — *аспирант кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
melenxxx@rambler.ru

МОКРУШИН Юрий Михайлович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-63-14
yrmok@yandex. ru

ОГАНЕСЯН Гагик Араратович — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26
(812) 552-75-74
kozlovski@physics.spbstu.ru

ОРЛЕНКО Федор Евгеньевич — *аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-77-90
fadler@mail.ru

ПАВЛОВ Георгий Георгиевич — *кандидат физико-математических наук, заведующий межфакультетской научной лабораторией астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, профессор Пенсильванского государственного университета, США.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29.
(814) 865-94-82
pavlov@astro.psu.edu

РОМАНОВ Владимир Викторович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-77-90
romanov@phmf.spbstu.ru

РЫБАКОВ Анатолий Петрович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Пермского государственного технического университета.*

614099, г. Пермь, Комсомольский пр., д. 29
(342) 219-82-12
anatryb@yandex.ru

РЯБОВ Виктор Германович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
riabovvg@gmail.com

РЯБОВ Юрий Германович — *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
yuriy.riabov@gmail.com

САВИН Максим Вячеславович — *студент физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29.
(812) 294-42-76
vtalalov@phmf.spbstu.ru

САЖИН Сергей Степанович — *кандидат физико-математических наук, профессор университета г. Брайтона, Великобритания*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 294-42-76
vtalalov@phmf.spbstu.ru

САМСОНОВ Владимир Михайлович — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-31
samsonov@pnpi.spb.ru

СВЕРДЛОВ Михаил Александрович — *начальник отдела технического контроля ЗАО «Полупроводниковые приборы».*

194156, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, д. 27
(812) 294-25-32
sales@atcsd.ru

СНЕГИРЁВ Александр Юрьевич — *доктор технических наук, профессор кафедры компьютерных технологий и эксперимента в теплофизике Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, профессор кафедры математического и программного обеспечения высокопроизводительных вычислений Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-70
a.snegirev@phmf.spbstu.ru

СОКОЛОВ Евгений Иванович — *доктор физико-математических наук, начальник научно-исследовательского отдела Центра перспективных исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 594-95-13
falcon_falcon@list.ru

СОФРОНОВ Антон Николаевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
sofronov@rphf.spbstu.ru

СУДАКОВ Иван Алексеевич — *аспирант кафедры климатологии и мониторинга окружающей среды Санкт-Петербургского государственного университета, старший преподаватель кафедр высшей математики Санкт-Петербургского государственного университета технологии и дизайна и Российского государственного гидрометеорологического университета, младший научный сотрудник Международного центра по окружающей среде и дистанционному зондированию им. Нансена.*

199034, г. Санкт-Петербург, 14-я линия В.О., д. 7
(812) 324-51-03
ivan.sudakov@gmail.com

ТАЛАЛОВ Виктор Алексеевич — *кандидат технических наук, заведующий кафедрой компьютерных технологий и эксперимента в теплофизике Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29.
(812) 294-42-76
vtalalov@phmf.spbstu.ru

ТЕР-МАРТИРОСЯН Александр Леонович — *кандидат технических наук, генеральный директор ЗАО «Полупроводниковые приборы».*

194156, г. Санкт-Петербург, Энгельса пр., д. 27
(812) 294-25-32
sales@atcsd.ru.

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-65-08
victikh@mail.ru

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич — *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
dmfir@rphf.spbstu.ru

ФРОЛОВ Максим Евгеньевич — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-75-25
frolov_me@mail.ru

ЧЕРНЫШЕВ Дмитрий Юрьевич — *кандидат физико-математических наук, ответственный исследователь на швейцарско-норвежской линии в Европейском центре синхротронных исследований, г. Гренобль, Франция*

ESRF 6 Rue Jules Horowitz BP 220 38043 Grenoble Cedex 9 France
dmitry.chernyshov@esrf.fr

ШАЛЫГИН Вадим Александрович — *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
shalygin@rphf.spbstu.ru

ШЕЙНМАН Ирина Яковлевна — *кандидат технических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник ФГУП «Российский научный центр «Прикладная химия»»*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-77-90
sheinman@cisp.spb.ru

ШОРОХОВ Павел Вадимович — *студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29
(812) 552-96-71
p_shorokhoff@rambler.ru

АННОТАЦИИ

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Бабичев А. В., Гасумянц В. Э., Бутко В. Ю. ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В CVD-ГРАФЕНЕ САНТИМЕТРОВОГО РАЗМЕРА.

Приведены результаты экспериментального исследования электронного транспорта в образцах графена, полученных CVD-методом. Впервые получены данные о поведении коэффициента термоэдс в таких образцах. Проведен краткий анализ полученных результатов в сравнении с данными для образцов графена, выращенных методом scotch-tape и демонстрирующих наилучшие свойства в плане практических применений.

ГРАФЕН. CVD-ТЕХНОЛОГИЯ. ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ. КОЭФФИЦИЕНТ ТЕРМОЭДС.

Багаев К. А., Козловский С. С. ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ КАЛИБРОВКИ ДЕТЕКТОРОВ В ВОДНОЙ СРЕДЕ.

В статье предлагается методика калибровки детекторов для измерения активности водной среды при помощи компьютерного моделирования. С помощью созданной авторами компьютерной программы «MCC 3D» были определены радиусы сферы, имитирующей бесконечную среду, предложена методика ускорения расчетов. В результате были получены функции отклика детектора и проведено их сравнение с экспериментальными данными.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. АКТИВНОСТЬ СРЕДЫ. ФУНКЦИЯ ОТКЛИКА. «MCC 3D».

Баграев Н. Т., Брилинская Е. С., Гец Д. С., Клячкин Л. Е., Маляренко А. М., Романов В. В. КВАНТОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОДОЛЬНОГО ТРАНСПОРТА ДЫРОК В КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ.

Зависимости продольного сопротивления и статической магнитной восприимчивости от магнитного поля, перпендикулярного плоскости сверхузкой кремниевой квантовой ямы, ограниченной дельта-барьерами, сильно легированными бором, демонстрируют соответственно осцилляции Шубникова — де Гааза (ШдГ) и де Гааза — Ван Альфена (дГВА) при высоких температурах в слабых магнитных полях. Полученные результаты свидетельствуют о реализации в этих условиях приближения сильного поля $\mu B >> 1$ благодаря малой эффективной массе двумерных тяжелых дырок; это подтверждается измерениями температурных зависимостей дГВА-осцилляций.

НАНОСТРУКТУРА. ОСЦИЛЛЯЦИЯ ШУБНИКОВА — ДЕ ГААЗА. ОСЦИЛЛЯЦИЯ ДЕ ГААЗА — ВАН АЛЬФЕНА. МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ. КВАНТОВАЯ ЯМА.

Бердников А. Я., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Рябов В. Г., Рябов Ю. Г., Самсонов В. М. ПОДАВЛЕНИЕ ВЫХОДА КОРОТКОЖИВУЩИХ НЕЙТРАЛЬНЫХ КАОНОВ В ЦЕНТРАЛЬНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ.

Представлены результаты исследования рождения K_s-мезонов в области больших поперечных импульсов в столкновениях ядер золота при энергии в системе центра масс на пару нуклонов, равной 200 ГэВ. Обнаружено, что в центральных столкновениях ядер золота выход K_s-мезонов подавлен примерно в 4 — 5 раз.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. РОЖДЕНИЕ. МЕЗОНЫ. ПОДАВЛЕНИЕ. АНАЛИЗ. НЕЙТРАЛЬНЫЙ КАОН. ПОПЕРЕЧНЫЙ ИМПУЛЬС. ЯДРА ЗОЛОТА.

Бердников А. Я., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Рябов В. Г., Рябов Ю. Г., Самсонов В. М. РОЖДЕНИЕ КОРОТКОЖИВУЩИХ НЕЙТРАЛЬНЫХ КАОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР МЕДИ ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ.

Представлены результаты измерения инвариантных спектров рождения по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации для короткоживущего нейтрального K_s-мезона в области больших поперечных импульсов в столкновениях ядер меди при энергии в системе центра масс на пару нуклонов, равной 200 ГэВ. Обнаружено, что в центральных столкновениях ядер меди выход K_s-мезонов подавлен примерно в 2 раза, что свидетельствует об образовании горячей и плотной ядерной материи в таких столкновениях.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. РОЖДЕНИЕ. МЕЗОНЫ. ПОДАВЛЕНИЕ. АНАЛИЗ. НЕЙТРАЛЬНЫЙ КАОН. ПОПЕРЕЧНЫЙ ИМПУЛЬС. ЯДРА МЕДИ.

Быков А. М., Владимиров А. Е., Красильщиков А. М., Павлов Г. Г. СПЕКТРАЛЬНАЯ ДИАГНОСТИКА РАДИАТИВНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН В МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЕ.

В работе построена модель радиативной ударной волны в межзвездной среде и вычислена яркость излучения в континууме и спектральных линиях химических элементов от водорода до железа, формирующихся за фронтом такой волны. Сопоставление модельных спектров излучения с наблюдениями галактических остатков сверхновых звезд позволяет получать информацию о физических условиях в этих объектах.

МЕЖЗВЕЗДНАЯ СРЕДА. ОСТАТКИ СВЕРХНОВЫХ ЗВЕЗД. РАДИАТИВНЫЕ УДАРНЫЕ ВОЛНЫ. СПЕКТРЫ ИЗЛУЧЕНИЯ.

Вахрушев С. Б., Дамянович Д., Чернышев Д. Ю., Босак А. А., Кораблев-Дайсон М. А. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПЕРОВСКИТЕ $Li_{0,02}(K_{0,5}Na_{0,5})_{0,98}NbO_3$ ПО ДАННЫМ ДИФРАКЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.

Представлены результаты исследования перовскитоподобного пьезоэлектрика с высокими пьезоэлектрическими показателями с помощью метода порошковой дифракции. Установлена последовательность фазовых переходов, уточнен род фазового перехода. Получена информация о температурной эволюции параметров ячейки, объема и спонтанных деформаций.

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ. ПЬЕЗОЭЛЕКТРИК. СИНХРОТРОННОЕ РАССЕЯНИЕ. ДИФРАКЦИЯ. ПЕРОВСКИТ.

Воробьев Л. Е., Софронов А. Н., Фирсов Д. А., Демидов Д. М., Леус Р. В., Свердлов М. А., Тер-Мартиросян А. Л. ЛАЗЕРНЫЕ ДИОДЫ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ.

Разработаны полупроводниковые лазеры на базе наноструктур с квантовыми ямами GaInP/GaAs на длину волны 665 нм с мощностью излучения до 2 Вт в непрерывном режиме при комнатной температуре. Оригинальная конструкция излучателя позволила получить высокую температурную и пространственно-временную стабильность излучения в ближнем и дальнем полях, большой срок службы, слабый уровень шумов. Приборы предназначены для применения в медицинских системах лечения и диагностики онкологических заболеваний методами фотодинамической терапии.

ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЙ ЛАЗЕР. НАНОСТРУКТУРЫ. МЕДИЦИНСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ. ФОТОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕРАПИЯ.

Гиргидов А. Д. О ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ ГРАДИЕНТНЫХ ЗАВИСИМОСТЯХ.

Приведены различные способы учета конечной скорости передачи информации о характеристиках при использовании градиентных зависимостей для тепло- и массопереноса. Модель диффузии с конечной скоростью при описании диффузии в газах позволяет раскрыть механизм восприятия диффундирующими частицами локального изменения их концентрации. При описании теплопереноса конечная скорость передачи информации обеспечивается введением в закон Фурье времени релаксации. Использование в качестве реологической модели жидкости тела Максвелла приводит к уравнениям гидродинамики гиперболического типа, в которых скорость распространения возмущений близка к скорости звука.

ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОС. ГРАДИЕНТНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ. ДИФФУЗИЯ С КОНЕЧНОЙ СКОРОСТЬЮ. ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ. ВЯЗКОУПРУГАЯ СРЕДА. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА.

Григорьев П. Ю., Журкин Е. Е. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ КАРБИДА КРЕМНИЯ ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ И КЛАСТЕРАМИ.

Представлены характеристики распыления поверхности (111) кубического карбида кремния под воздействием низкоэнергетической бомбардировки ионами и кластерами Si_N и C_N ($N = 1 — 60$). Произведен анализ корреляции между неаддитивным возрастанием коэффициентов распыления и особенностями каскада соударений в мишени в зависимости от размера и энергии налетающего кластера.

ИМПЛАНТАЦИЯ. КЛАСТЕРЫ. РАСПЫЛЕНИЕ. КАРБИД КРЕМНИЯ. МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Козловский В. В., Васильев А. Э., Емцев В. В., Оганесян Г. А., Колгатин С. Н. ОБРАЗОВАНИЕ ПАР ФРЕНКЕЛЯ В КРЕМНИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРОТОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ.

Выполнен анализ дефектообразования в кремнии при облучениях, используемых для моделирования радиационных поясов Земли. Показано, появление микрообластей монокристаллического кремния с высокой концентрацией вакансий, в которых интенсивно протекают реакции по формированию дивакансий и их комплексов с примесными атомами, а также принципиальное различие в воздействии протонного облучения.

РАДИАЦИОННЫЙ ДЕФЕКТ. КРЕМНИЙ. ПРОТОННОЕ ОБЛУЧЕНИЕ. ДИВАКАНСИЯ. ПАРА ФРЕНКЕЛЯ.

Комарова О. С., Мартынова О. А., Шорохов П. В., Гасумянц В. Э. МОДИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ В СИСТЕМЕ $Bi_2Sr_2CaCu_2O_y$.

В работе представлены результаты количественного анализа температурных и концентрационных зависимостей коэффициента термоэдс в образцах висмутовых ВТСП состава $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ (x = = 0–0,5) и $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ (x = 0–0,4) на основе трех различных моделей электронного транспорта. Определены параметры энергетического спектра и системы носителей заряда в исследованных образцах и проанализирован характер их изменения с ростом содержания примесей. Сделано предположение о том, что калий в системе $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ вносит дополнительные состояния в проводящую зону.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СВЕРХПРОВОДНИКИ. ЭЛЕКТРОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР. ЛЕГИРОВАНИЕ.

Краснова Н. К., Абрамёнок О. А. СЕМЕЙСТВО ПОЛЕВЫХ СТРУКТУР С ПЛОСКОСТЬЮ СИММЕТРИИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОГРАФИИ.

В статье изучаются электронно-оптические свойства класса полевых структур для электронной спектрографии, построенных на основе однородных по Л. Эйлеру полей с плоскостью симметрии. Исследуемый класс потенциалов строится на основе потенциалов Донкина, являющихся обобщенными коническими потенциалами. Рассматриваются различные режимы работы спектрографа при движении частиц в плоскости симметрии. На основе разработанного алгоритма полевая структура, определенная на плоскости, восстанавливается в пространстве. Анализируются перспективы электронных спектрографов на основе изучаемых полевых структур.

ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОГРАФИЯ. ОДНОРОДНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ. ПОТЕНЦИАЛЫ ДОНКИНА. СПЕКТРОГРАФИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП РАЗДЕЛЕНИЯ. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ДВУМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА В ПРОСТРАНСТВЕ.

Мелентьев Г. А., Шалыгин В. А., Винниченко М. Я., Софронов А. Н., Воробьев Л. Е., Фирсов Д. А. ДАЛЬНЕЕ ИНФРАКРАСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ГОРЯЧИХ ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ОДИНОЧНОМ ГЕТЕРОПЕРЕХОДЕ AlGaN/GaN.

Экспериментально исследована спонтанная эмиссия излучения дальнего инфракрасного излучения из одиночного гетероперехода AlGaN/GaN при разогреве двумерных электронов в латеральном электрическом поле. На основании анализа вольт-амперных характеристик определена зависимость температуры горячих электронов от прикладываемого электрического поля. Показано, что наблюдаемая эмиссия излучения хорошо описывается с помощью модели теплового излучения горячих двумерных электронов. Обсуждается влияние эффекта накопления неравновесных оптических фононов на интегральную интенсивность излучения.

ЭМИССИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ. ДАЛЬНЕЕ ИНФРАКРАСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. НИТРИД ГАЛЛИЯ. ГОРЯЧИЕ ЭЛЕКТРОНЫ. ДВУМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ.

Мокрушин Ю. М. ДИФРАКЦИЯ СВЕТА НА УЛЬТРАЗВУКЕ ВБЛИЗИ ОПТИЧЕСКОЙ ОСИ ГИРОТРОПНОГО КРИСТАЛЛА.

Получено общее решение для дифрагированного на ультразвуке светового поля, справедливое для анизотропной диэлектрической среды, обладающей гиротропными свойствами. Рассмотрена задача о дифракции плоской световой волны на ультразвуке для геометрии рассеяния, соответствующей широкополосной анизотропной дифракции света на медленной сдвиговой упругой волне, распространяющейся в направлении [110] кристалла TeO_2 вблизи его оптической оси.

АКУСТООПТИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИЯ. ГИРОТРОПНАЯ СРЕДА. УЛЬТРАЗВУКОВАЯ ВОЛНА. КРИСТАЛЛ TeO_2.

Орленко Ф. Е., Зегря Г. Г. РЕНОРМ-ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ СПИН-1-ЦЕПОЧКИ.

Исследуются магнитные свойства анизотропных кристаллов с локализованными спинами s = 1. Система частиц с «большим» спином описывается непосредственно, исходя из первых принципов. Рассчитывается энергия основного состояния антиферромагнитной цепочки псевдогейзенберговского типа спинов s = 1; методом ренорм-групп константа взаимодействия перенормируется при укрупнении системы. Возбуждения данной цепочки в линейном приближении отделены энергетической щелью от основного состояния.

РЕНОРМ-ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ СПИН-1-ЦЕПОЧКИ. АНТИФЕРРОМАГНИТНОЕ ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЩЕЛЬ В СПЕКТРЕ ВОЗБУЖДЕНИЙ.

Рыбаков А. П., Вшивков О. Ю. УДЕЛЬНЫЙ МЕХАНИЧЕСКИЙ ИМПУЛЬС УДАРНОЙ ВОЛНЫ КАК ФИЗИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР НАГРУЖЕНИЯ.

Близость параметров ударных волн при различных способах нагружения позволяет ввести в употребление удельный механический импульс как параметр нагружения. Рассмотрено применение этого параметра в технических приложениях.

УДАРНАЯ ВОЛНА. ЗАТУХАНИЕ ВОЛНЫ. УДЕЛЬНЫЙ МЕХАНИЧЕСКИЙ ИМПУЛЬС. СПОСОБЫ НАГРУЖЕНИЯ.

Снегирёв А. Ю., Сажин С. С., Талалов В. А., Савин М. В. АПРОБАЦИЯ МОДЕЛИ ТЕПЛООБМЕНА И ИСПАРЕНИЯ КАПЕЛЬ ДИСПЕРГИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ.

В работе выполняется апробация модели нагрева и испарения одиночной капли, учитывающей неравномерность поля температуры и внутреннюю циркуляцию жидкости в капле. Приводится сравнение результатов расчетов с имеющимися данными измерений для двух жидкостей с существенно разной скоростью испарения (ацетон и вода) при разных значениях температуры и влажности окружающей среды, а также скорости набегающего потока. Получено удовлетворительное согласие расчетных и измеренных данных (среднеобъемная температура, диаметр и скорость осаждения капли) в рассмотренных режимах испарения. Для воды согласие расчетных и измеренных данных получено как для крупнодисперсных (1– 3 мм), так и мелкодисперсных (0,04 — 0,06 мм) капель.

ИСПАРЕНИЕ КАПЕЛЬ. ДИСПЕРГИРОВАННАЯ ЖИДКОСТЬ. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. АПРОБАЦИЯ МОДЕЛИ.

Соколов Е. И. ОЦЕНКА ТЯГОВОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОПЕЛ МИКРОРАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ.

Рассмотрено влияние трения на тягу конического сопла с диаметром критического сечения 10^{-5}–10^{-6} м. Учет вклада трения в формирование тяги в рамках модели ламинарного пограничного слоя позволил установить существование оптимальной длины сверхзвуковой части сопла. Показано, что эта длина существенно зависит от диаметра критического сечения. Исследовано влияние свойств истекающего газа и угла полураствора сопла на его тягу. Разработанный метод оценки тяговой эффективности сопла может быть применен на стадии эскизного проектирования.

МИКРОРАКЕТНЫЙ ДВИГАТЕЛЬ. КОНИЧЕСКОЕ СОПЛО. ОДНОМЕРНОЕ ТЕЧЕНИЕ. ОТНОСИТЕЛЬНАЯ ТЯГА. ЛАМИНАРНЫЙ ПОГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ. ТРЕНИЕ.

Судаков И. А. ДИНАМИКА ПРОТАИВАНИЯ МЕРЗЛОТНЫХ ОЗЕР И ИЗМЕНЕНИЯ КЛИМАТА.

На основе теории фазовых переходов Гинзбурга — Ландау с применением асимптотических методов разработана модель динамики радиуса озера, расположенного в зоне вечной мерзлоты. Показана возможность применения этой модели к задаче прогнозирования эмиссии метана из вечной мерзлоты в атмосферу.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД. ЗАДАЧА СТЕФАНА. СРЕДНЯЯ КРИВИЗНА ПОВЕРХНОСТИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ. ВЕЧНАЯ МЕРЗЛОТА. ЭМИССИЯ МЕТАНА.

Тихомиров В. В. ТРЕЩИНА ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА, ЧАСТИЧНО ПРОНИКАЮЩАЯ В УПРУГОЕ КРУГОВОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ С ПОКРЫТИЕМ.

В статье рассматривается взаимодействие полубесконечной трещины моды III с упругим круговым включением, как имеющим промежуточный слой, так и при его отсутствии. В результате использования обобщенного интегрального преобразования Меллина для включения без покрытия получено точное решение в замкнутой форме, а при наличии покрытия задача сведена к решению двух интегральных уравнений Фредгольма второго рода относительно перемещений на интерфейсах. Изучена зависимость коэффициента интенсивности напряжений от упругих модулей композиции.

ТРЕЩИНА ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТРЕЩИНЫ С ВКЛЮЧЕНИЕМ. ВКЛЮЧЕНИЕ С ПОКРЫТИЕМ.

Фролов М. Е. РЕАЛИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПОДХОДА К АПОСТЕРИОРНОМУ КОНТРОЛЮ ТОЧНОСТИ РЕШЕНИЙ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ.

На примере трехмерных задач линейной теории упругости исследуется эффективность применения апостериорных оценок функционального типа к контролю точности решений, полученных в пакете ANSYS. Подход реализован на языке FORTRAN в виде внешнего программного модуля. Проведенные исследования указывают на перспективность подхода и позволяют оценить границы его надежного применения.

АПОСТЕРИОРНЫЕ ОЦЕНКИ ПОГРЕШНОСТИ. МЕХАНИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА. ИНЖЕНЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Шейнман И. Я., Снегирёв А. Ю. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ КАПЕЛЬ В ГАЗОКАПЕЛЬНОЙ СТРУЕ.

Рассмотрена задача математического моделирования столкновений капель жидкости в газокапельной струе. Приведено описание и результаты тестирования методов O'Rourke и NTC для подсчета частоты столкновений; для прогнозирования исходов столкновений используется модель Brazier-Smith. На основе данных моделей, программно реализованных в коде Fire3D, численно проанализировано влияние столкновений капель на концентрацию пара в турбулентной газокапельной струе летучей жидкости.

СТОЛКНОВЕНИЕ КАПЕЛЬ. ТУРБУЛЕНТНАЯ ГАЗОКАПЕЛЬНАЯ СТРУЯ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. МЕТОД NTS. МЕТОД О'РУРКА.

ABSTRACTS

KEYWORDS

Babichev A. V., Gasumyants V. E, Butko V. Y. ELECTRON TRANSPORT IN CVD-GROWN GRAPHENE OF CENTIMETER SIZE.

We present the results of the experimental study of the electron transport in graphene samples grown by the CVD-technology. The data on the thermopower behavior in such samples are presented for the first time. A brief analysis of the obtained results in comparison with the ones for graphene samples prepared by the scotch-tape method and demonstrating the best properties with respect to practical applications is performed.

GRAPHENE. CVD-TECHNOLOGY. ELECTRON TRANSPORT. THERMOPOWER.

Bagaev K. A., Kozlovsky S. S. AN APPLICATION OF COMPUTER SIMULATION TO DETECTOR CALIBRATION IN THE AQUEOUS MEDIUM.

Authors offer the calculation method to calibrate detectors in radioactive aqueous medium using a computer program — «MCC 3D». First of all radius of sphere with radioactive substance has been calculated. This volume is similar to infinite matter with this substance. Then the calculation time reduction method was presented. As a result the detector response function was obtained and compared with experimental data.

COMPUTER SIMULATION. RADIOACTIVE MATTER. RESPONSE FUNCTION. «MCC 3D».

Bagraev N. T., Brilinskaya E. S., Gets D. S., Klyachkin L. E., Malyarenko A. M., Romanov V. V. LONGITUDINAL QUANTUM TRANSPORT OF HOLES IN SILICON NANOSTRUCTURES.

Field-dependent magnetoresistance and static magnetic susceptibility of the ultra-narrow *p*-type silicon quantum well (Si-QW) confined by the delta-barriers heavily doped with boron demonstrate the high temperature Shubnikov — de Haas and de Haas — van Alphen oscillations in weak magnetic fields. These results are evidence the strong field conditions, $\mu B >> 1$, caused by the small effective mass for two-dimensional heavy holes that is confirmed by the experimental measurements of the temperature dependences of the de Haas — van Alphen oscillations.

NANOSTRUCTURE. SHUBNIKOV — DE HAAS OSCILLATION. DE HAAS — VAN ALPHEN OSCILLATION. MAGNETIC SUSCEPTIBILITY. QUANTUM WELL.

Berdnikov A.Ya, Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Riabov V. G., Riabov Yu. G., Samsonov V. M. K_S-MESON SUPPRESSION IN CENTRAL Au + Au COLLISIONS AT CENTER-OF-MASS ENERGY OF 200 GeV PER NUCLEON PAIR.

Measurements for K_s-meson production at high transverse momentum in Au+Au collisions at center-of-mass energy of 200 GeV per nucleon pair are presented. A fourfold-fivefold suppression of the K_s-meson yield in central Au+Au collisions is found.

QUARK-GLUON PLASMA. PRODUCTION. MESONS. SUPPRESSION. ANALYSIS. K_s-MESON. TRANSVERSE MOMENTUM. GOLD NUCLEI.

Berdnikov A. Ya., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Riabov V. G., Riabov Yu. G., Samsonov V. M. K_S-MESON PRODUCTION IN Cu + Cu COLLISIONS AT CENTER-OF-MASS ENERGY OF 200 GeV PER NUCLEON PAIR.

Measurements for K_s-meson invariant yields and nuclear modification factors at high transverse momentum in Cu+Cu collisions at center-of-mass energy of 200 GeV per nucleon pair are presented. A twofold-suppression of the K_s-meson yield in central Cu+Cu collisions is found to authenticate of the hot and dense matter creation in the central ultrarelativistic Cu+Cu collisions.

QUARK-GLUON PLASMA. PRODUCTION. MESONS. SUPPRESSION. ANALYSIS. K_s-MESON. TRANSVERSE MOMENTUM. COPPER NUCLEI.

Bykov A. M., Vladimirov A. E., Krassilchtchikov A. M., Pavlov G. G. SPECTRAL DIAGNOSTICS OF THE INTERSTELLAR RADIATIVE SHOCKS.

A model of a radiative shock propagating through interstellar medium has been developed to study continuum and line emission produced in downstreams of such shocks. Being confronted with available observations of galactic supernova remnants, the computed spectra can help to reveal information about physical conditions in these objects.

INTERSTELLAR MEDIUM. SUPERNOVA REMNANTS. RADIATIVE SHOCKS. EMISSION SPECTRA.

Frolov M. E. AN IMPLEMENTATION OF THE FUNCTIONAL APPROACH TO A POSTERIORI ERROR CONTROL OF SOLUTIONS IN 3D ELASTICITY.

As an example of problems in 3D linear elasticity solved by ANSYS, the efficiency of the functional approach to a posteriori error control is investigated. The approach is implemented as an external FORTRAN-based computational module. The numerical investigations show that the approach is promising and provide the way to draw around the area for its reliable use.

A POSTERIORI ERROR ESTIMATES. SOLID MECHANICS. COMPUTATIONAL ENGINEERING.

Girgidov A. D. ON PHENOMENOLOGICAL GRADIENT DEPENDENCES.

Different means of introduction of the finite disturbance propagation velocity while the gradient dependences including in heat- and mass transfer theory are presented. The model of diffusion with finite velocity makes it possible to reveal the mechanism of molecular susceptibility to the local concentration distribution. The finite velocity of heart transfer is provided including the relaxation time in Fourier law. In fluid mechanics Maxwell body as a reologic model of viscoelastic medium leads to hyperbolic hydrodynamic equations, containing disturbance propagation velocity equal to sound velocity.

HEAT- AND MASS TRANSFER. GRADIENT DEPENDENCES. DIFFUSION WITH FINITE VELOCITY. RELAXATION TIME. VISCOELASTIC MEDIUM. DIFFERENTIAL EQUATIONS OF HYPERBOLIC TYPE.

Grigoriev P. Yu., Zhurkin E. E. SIMULATION OF SPUTTERING OF THE SILICON CARBIDE SURFACE UNDER BOMBARDMENT BY IONS AND CLUSTERS.

Characteristics of sputtering of the cubic silicon carbide (111) surface under low-energy bombardment by Si_N and C_N ions and clusters ($N = 1 — 60$) have been presented. An analysis of the correlations between non-additive increase of the sputtering yields and the features of the collision cascade in the target versus the incident cluster size and energy was carried out.

IMPLANTATION. CLUSTERS. SPUTTERING. SILICON CARBIDE. MODELLING. SIMULATION.

Komarova O. S., Martynova O. A., Shorokhov P. V., Gasumyants V. E. MODIFICATION OF THE ENERGY SPECTRUM PARAMETERS UNDER DOPING IN THE $Bi_2Sr_2CaCu_2O_y$ SYSTEM.

We present the results of the quantitative analysis of the temperature and concentration dependences of the thermopower in Bi-based HTSC-samples of $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_y$ ($x = 0 \div 0.5$) and $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ ($x = 0 \div 0.4$) compositions on the basis of three different models of the electron transport. The parameters of the energy spectrum and charge-carrier system in investigated samples were determined and a character of their changes with increasing impurity contents was analyzed. Potassium in the $Bi_2Sr_{2-x}K_xCaCu_2O_y$ system is proposed to introduce additional states into the conduction band.

HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS. ELECTRON TRANSPORT PHENOMENA. ENERGY SPECTRUM. DOPING.

Kozlovski V. V., Vasil'ev A. E., Emtsev V. V., Oganesjan G. A., Kolgatin S. N. THE FRENKEL PAIRS FORMATION IN THE SILICON UNDER HIGH ENERGY ELECTRON AND PROTON IRRADIATION.

The analysis of defect formation in silicon is made under the irradiations used for modeling of radiating belts of the Earth. It is shown the occurrence of microareas of silicon single-crystals with high concentration of vacancies in which reactions with formation of divacancy and their complexes with impurity atoms intensively proceed; there is a basic distinction in influence of a proton irradiation.

RADIATION DEFECT. SILICON. PROTON IRRADIATION. DIVACANCY. FRENKEL PAIR.

Krasnova N. K., Abrameonok O. A. A SET OF FIELD STRUCTURES WITH A SYMMETRY PLANE FOR ELECTRON SPECTROGRAPHY.

Electron-optical properties of a family of field structures which are inherent for electron spectrography and developed on the base of Eulerian uniform fields with a symmetry plane have been studied in this paper. This potential set under question was constructed using the Donkin's potentials which were conic ones generalized. The various operating modes of spectrograph in the process of particles motion in the symmetry plane were investigated. Afterwards the potential structure defined in the plane was restored into space using the algorithm worked out by the authors. The prospects for electron spectrographs based on these potential structures were analyzed.

ELECTRON SPECTROGRAPHY. UNIFORM POTENTIALS. DONKIN'S POTENTIALS. SPECTROGRAPH PRINCIPLE OF SEPARATION. RESTORING 2-DIMENSIONAL POTENTIAL INTO SPACE.

Melentyev G. A., Shalygin V. A., Vinnichenko M. Ya., Sofronov A. N., Vorobjev L. E., Firsov D. A. FAR-INFRARED RADIATION EMISSION BY HOT TWO-DIMENSIONAL ELECTRONS IN SINGLE GaN/AlGaN HETEROJUNCTION.

Tne spontaneous emission of far-infrared radiation from a single GaN/AlGaN heterojunction under heating of two-dimensional electrons in the lateral electric field is investigated experimentally. Dependence of the hot electron temperature on applied electric field is determined with help of current-voltage characteristic analysis. It is shown that the observed radiation emission is well described in the framework of thermal emission of the hot two-dimensional electrons. Effect of nonequilibrium optical phonon accumulation on the integral intensity of radiation is discussed.

RADIATION EMISSION. FAR-INFRARED RADIATION. GALLIUM NITRIDE. HOT ELECTRONS. TWO-DIMENSIONAL ELECTRONS.

Mokrushin Yu. M. THE DIFFRACTION OF LIGHT BY ULTRASONIC WAVES NEAR THE OPTICAL AXIS OF GYROTROPIC CRYSTAL.

The general solution for acoustooptic diffraction in anisotropic and gyrotropic medium is obtained. The task of ultrasonic plane light wave diffraction in the wide-band anisotropic diffraction geometry near the optical axis in the TeO_2 crystal is considered.

ACOUSTOOPTIC DIFFRACTION. GYROTROPIC MEDIUM. ULTRASONIC WAVE. TeO_2 CRYSTAL.

Orlenko F. E., Zegrya G. G. THE RENORMALIZATION-GROUP ANALYSIS OF THE GROUND STATE OF THE SPIN-1 ANTIFERROMAGNETIC CHAIN.

We are interested in the anisotropic spin-1 antiferromagnetic chain. System of particles with an arbitrary «large» spin is described directly from the first principles, based on the symmetry law. The ground state of the one-dimensional $s = 1$ pseudo-Heisenberg antiferromagnet with single-ion anisotropy is calculated using the renormalization group analysis. Excitations of the chain in the form of linear spin waves are considered. The excitation spectrum has a gap.

RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS. ANISOTROPIC $s = 1$ ANTIFERROMAGNETIC CHAIN. ONE-DIMENSIONAL $s = 1$ PSEUDO-HEISENBERG ANTIFERROMAGNET. SPIN WAVES, ENERGY GAP.

Rybakov A. P., Vshivkov O. Y. SPECIFIC MECHANICAL MOMENTUM OF SHOCK WAVE AS A PHYSICAL PARAMETER OF LOADING.

The closeness of the parameters of shock waves at various ways of loading allows someone to use the specific mechanical momentum as a loading parameter. The application of this parameter in engineering applications is considered.

SHOCK WAVE. ATTENUATION OF WAVE. SPECIFIC MECHANICAL MOMENTUM.

Sheinman I. Ya., Snegirev A. Yu. SIMULATION OF DROPLETS COLLISIONS IN GAS-DROP JET.

The focus of this work is modelling of droplets collision in turbulent evaporating spray. To predict the collision frequency, two modeling approaches — the O'Rourke's method and the NTC (No Time Counter) method are applied. The Brazier-Smith model is used to predict a possible collision outcome which is either droplet coalescence or grazing collision. The effect of droplet collisions on vapor concentration in turbulent evaporating spray has been demonstrated using the in-house code Fire3D. It has been found that droplet coalescence causes the increase of droplet size which leads to the reduction of the evaporation rate. As a result, neglecting droplet collisions in simulations of a starting spray may cause considerably underestimated vapour concentration along the spray axis.

DROPLETS COLLISION. TURBULENT EVAPORATING SPRAY. SIMULATON. NTS METHOD. O'ROURKE'S METHOD.

Snegirev A. Yu., Sazhin S. S., Talalov V. A., Savin M. V. VALIDATION STUDY OF THE MODEL TO PREDICT HEATING AND VAPORIZATION OF A LIQUID DROPLET.

Validation study is presented of the model that predicts droplet heating and evaporation with the internal temperature gradient and liquid recirculation taken into account. Two evaporating liquids having significantly different evaporation rates (acetone and water) and the range of parameters characterizing ambient atmosphere (temperature, humidity, flow velocity) are considered. Reasonable agreement of measured and predicted droplet temperatures, diameters, sedimentation velocities has been obtained. For water, such an agreement has been demonstrated both for large (1 to 3 mm) and small (0.04 to 0.06 mm) droplets.

DROPLET EVAPORATION. LIQUID DISPERSED. SIMULATION. MODEL VALIDATION.

Sokolov E. I. EVALUATION OF THRUST EFFECTIVENESS FOR NOZZLES OF ROCKET MICRO-THRUSTERS.

An influence of shear stress upon a thrust of conical nozzle with throat diameter of 10^{-5}–10^{-6} m has been under the study. Including of its input into determination of thrust was done with the use of the model of laminar boundary layer. It allowed to establish an existence of optimal nozzle length. This length was shown to depend essentially on throat diameter. An influence of properties of issuing gas and nozzle half-angle upon the thrust was studied. Developed method of estimation of nozzle thrust effectiveness can be used on preliminary step of design.

MICROTHRUSTER. CONICAL NOZZLE. ONE-DIMENSIONAL FLOW. RELATIVE THRUST. LAMINAR BOUNDARY LAYER. SHEAR STRESS.

Sudakov I. A. THE DYNAMICS OF PERMAFROST LAKES THAWING AND CLIMATE CHANGING.

A model of dynamics of radius of a permafrost lake has been developed from the phase transition theory of Ginzburg — Landau using asymptotical approach. Applicability of the model to the problem of prediction of methane emission out of permafrost to the atmosphere was demonstrated.

PHASE TRANSITION. STEFAN PROBLEM. MEAN CURVE OF SURFACE. MODELLING. PERMAFROST. METHANE EMISSON.

Tikhomirov V. V. AN ANTIPLANE CRACK PARTIALLY PENETRATING AN ELASTIC CIRCULAR INCLUSION WITH COATING.

An interaction of the semi-infinite crack of mode III with circular uncoated/coated inclusion is examined. As a result the use of the generalized integral transform of Mellin in the problem for the uncoated inclusion an exact analytical solution in the locked form is obtained. With the presence of coating the problem is brought to the solution of two integral Fredholm equations of second kind relative to displacements on the interfaces. The dependence of the stress intensity factor from the elastic modules of composition is studied.

ANTIPLANE CRACK. CRACK INTERACTION WITH INCLUSION. INCLUSION WITH COATING.

Vakhrushev S. B., Damjanovic D., Chernyshev D. Yu., Bosak A. A., Korablev-Dyson M. A. PHASE TRANSITIONS IN $Li_{0.02}(K_{0.5}Na_{0.5})_{0.98}NbO_3$ PEROVSKITE DETERMINED BY POWDER DIFFRACTION OF SYNCHROTRON RADIATION.

A study of perovskite-like dielectric with high piezoelectric constants is presented. The powder diffraction method was used. As a result a sequence of phase transitions was followed, determining phase transition order. The information on temperature evolution of cell parameters, volume and spontaneous deformation was obtained.

PHASE TRANSITIONS. PIEZOELECTRIC. SYNCHROTRON RADIATION. DIFFRACTION. PEROVSKITE.

Vorobjev L. E., Sofronov A. N., Firsov D. A., Demidov D. M., Leus R. V., Sverdlov M. A., Ter-Martirosyan A. L. LASER DIODES APPLICATION TO PHOTODYNAMIC THERAPY.

Semiconductor lasers with 665 nm wavelength and optical power of 2 W in continuous mode at room temperature have been developed. Application of GaInP/GaAs quantum well structure and original emitter design allowed to obtain a high temperature and spatiotemporal stability of emission intensity, high lifetime and low noise level. Developed optical devices are highly suitable for application in medical systems to photodynamic therapy.

SEMICONDUCTOR LASER. NANOSTRUCTURES. MEDICAL TECHNOLOGY. PHOTODYNAMIC THERAPY.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

№ 2 (122) 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 20.06.2011. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 21,50. Тираж 1000. Заказ 222.

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.**