

№9(49) 2008

Выпуск 14

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ БелГУ

Физика. Математика

Belgorod State University

Scientific bulletin

Physics Mathematics

Основан в 1995 г.

Учредитель:

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Белгородский государственный университет»

Издатель:

Белгородский государственный университет.
Издательство БелГУ

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия

Свидетельство о регистрации средства массовой информации ПИ № ФС77-21121 от 19 мая 2005 г.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Главный редактор

Дятченко Л.Я.

ректор Белгородского государственного университета, доктор социологических наук, профессор

Зам. главного редактора

Давыденко Т.М.

проректор по научной работе Белгородского государственного университета, доктор педагогических наук, профессор

Ответственный секретарь

Московкин В.М.

заместитель по инновационной деятельности проректора по научной работе Белгородского государственного университета, доктор географических наук, профессор кафедры мировой экономики

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ ЖУРНАЛА

Председатель редколлегии

Дятченко Л.Я.

ректор Белгородского государственного университета, доктор социологических наук, профессор

СОДЕРЖАНИЕ

К вопросу о стабилизирующей роли хищничества.

М.А. Амагов, Г.М. Амадова, И.С. Кузнецова, Н.А. Чеканов 5

Основные положения последовательного описания нелокальных взаимодействий в КЭД. **Ю.А. Касаткин, И.К. Кириченко 14**

Исследование влияния внешнего переменного поля на динамику одноосных нематических жидких кристаллов. **М.Ю. Ковалевский, Л.В. Логвинова, В.Т. Мацкевич, А.Н. Швец 24**

Анализ структуры гамильтониана для нелинейных ветровых волн на глубокой воде. **А.Н. Сердюченко 40**

Оценка числа ограниченных заполненных кластеров с фиксированной вершиной на кубической решётке. **Е.С. Антонова, Ю.П. Вирченко 52**

Профили внедрения, создаваемые ионами в условиях каналирования. **С.И. Матюхин 58**

Модификация метода Цернике-Принса определения функции радиального распределения атомов в конденсированной среде. **П.Н. Жукова, Н.Н. Насонов 65**

Исследование кинетического уравнения каскадной теории фрагментации при нарушении самоподобия дробления. **Р.Е. Бродский 69**

Рассеяние электромагнитных волн на нитевидных мишенях. **В.В. Сыщенко, Н.В. Соболева 73**

Жесткое некогерентное излучение быстрых частиц в кристаллах. **В.В. Сыщенко, А.И. Тарновский 82**

Оценка структуры кристаллических образцов с помощью излучения быстрых электронов. **Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Р.А. Шатохин 90**

Моделирование контура постоянной скорости основания гидротехнического сооружения при наличии криволинейного водоупора. **Э.Н. Береславский, Л.А. Александрова 100**

О некоторых особенностях решения линеализованного по скорости уравнения Навье-Стокса в сфероидальной системе координат. **Н.В. Малай, А. В. Лиманская 106**

Фотофорез крупной аэрозольной сфероидальной частицы с учетом нелинейных характеристик среды. **А.А. Плесканев 118**

Решение уравнения Кона-Шема для молекулы методом опорной функции. **А.Г. Шкловский, М.А. Шкловская 123**

Главный редактор

Чеканов Н.А.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Заместитель главного редактора

Малай Н.В.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Ответственный секретарь

Внуков И.Е.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Члены редколлегии

Вирченко Ю.П.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Насонов Н.Н.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Красильников В.В.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Сыщенко В.В.

доктор физико-математических наук
(Белгородский государственный
университет)

Оригинал-макет

Н.А. Гапоненко

E-mail: chekanov@bsu.edu.ru

Подписано в печать 28.04.2008

Формат 60×84/8

Гарнитура Times New Roman

Усл. п. л. 33,71

Тираж 500 экз.

Заказ 322

Подписные индексы в каталоге агентства

«Роспечать» – 81631,

в объединенном каталоге

«Пресса России» – 39723

Оригинал-макет тиражирован

в издательстве Белгородского

государственного университета

Адрес: 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Термодинамика формирования теплового канала в полупроводниковых плёнках. **Н.В. Андреева, Ю.П. Вирченко** 137

Особенности кинетической адсорбции катионов на поверхности селективного сорбента с учётом возможности их десорбции.

Е.Р. Шукин, З.Л. Шулиманова, Н.В. Малай,

Л.И. Трахтенберг 146

Стохастическая теория переноса теплового электромагнитного излучения в полупрозрачном диэлектрике.

М.А. Сапрыкин 152

Development H⁻ sources for the medicine accelerators.

Р.А. Litvinov, V.A. Baturin 160

Определение содержания АУ в пробах с использованием (γ, γ') ^m реакции и интегральных сечений. **Э.Л. Купленников,**

С. Н. Афанасьев, В.В. Красильников 166

Оценка электронной концентрации в плазме дуги

двухструйного плазматрона. **Е.А. Тагильцева,**

А.П. Тагильцев, Б.К. Зуев 172

Статус эксперимента по поиску и исследованию дифрагированного излучения каналированных электронов на микротроне

НИИЯФ МГУ. **Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, В.К. Гришин,**

А.Н. Ермаков, Ю.В. Жандармов, Р.А. Шатохин 179

Детектирование наноразмерных механических дефектов

на поверхности кремния в нематической ячейке. **Е. П. Бухели,**

С. И. Кучеев 193

Квантовые проявления для классической интегрируемой двумерной системы с двухъямным потенциалом.

Н.А. Чеканов, Е.В. Шевченко 198

Синтез и анализ оптимальных решающих правил селекции целей в облаке случайных рассеивателей при полном поляризационном зондировании пространства. **Б.В. Храбростин,**

М.М. Сапов, Д.Б. Храбростин 205

Оценка использования вейвлетов второго поколения

в когерентном моделировании вихря. **А.М. Логвинов,**

Ю.Е. Поленова, Г.А. Травин 223

Рассеяние многозарядных ионов в ориентированных кристаллах. **В.С. Мальшевский, Д.А. Трухов** 236

Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков. **В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль,**

Т.П. Бондарева 248

Пространственно осцилирующий фотовольтаический ток в оптически активных кристаллах. **Б.Х. Каримов** 261

К вопросу о гидродинамическом сопротивлении сферической частицы с однородным внутренним тепловыделением.

А.А. Стукалов 267

К вопросу о влиянии движения среды на фотофорез твердой аэрозольной частицы сфероидальной формы. **Н.В. Малай,**

Н.Н. Миронова 272

Сведения об авторах 283

CONTENTS

- To the issue of predator's role in stability. *M.A. Amatov, G.M. Amatova, I.S. Kuznetsova, N.A. Chekanov* 5
- Basic positions of the concerted approach of nonlocal interactions in QED. *Yu.A. Kasatkin, I.K. Kirichenko* 14
- Investigation of uniaxial nematic liquid crystal dynamics under influence of external alternating field. *M.Y. Kovalevsky, L.V. Logvinova, V.T. Matskevich, A.N. Schvets* 24
- Analysis of the structure of Hamiltonian for nonlinear wind waves on deep water. *A.N. Serdjuchenko* 40
- The estimation of the number of bounded full clusters with the fixed vertex on the cubic lattice. *E.S. Antonova, Yu.P. Virchenko* 52
- Implantation profiles produced by channeling ions
S.I. Matyukhin 58
- Modification of Zernicke-Princ approach to determine the radial distribution function of atoms in a dense medium. *P.N. Zhukova, N.N. Nasonov* 65
- Investigation of the kinetic equation of cascade fragmentation theory at the breaking down of self-consistent subdivision.
R.Ye. Brodskii 69
- Scattering of electromagnetic waves on fiber-like targets.
V.V. Syshchenko, N.V. Soboleva 73
- Hard incoherent radiation from fast particles in crystals.
V.V. Syshchenko, A.I. Tarnovsky 82
- Estimation of crystal sample structure by means of fast electrons radiation. *D.A. Baklanov, I.E. Vnukov, Yu.V. Zhandarmov, R.A. Shatokhin* 90
- Modeling of a constant velocity contour of the dam with existence of the curved watersupport. *E.N. Bereslavskii, L.A. Aleksandrova* 100
- About some features of equation Stokes decision in spheroidal system of coordinates. *N.V. Malay, A.V. Limanskaja* 106
- Photophoresis of large aerosol spheroidal particle taking into account nonlinear medium characteristics. *A.A. Pleskanev* 118
- Solving Kohn-Sham equation for molecule with method of support function. *A.G. Shklovskij, M.A. Shklovskaya* 123
- The formation of the heat chaannels in semiconductor films.
N.V. Andreyeva, Yu.P. Virchenko 137

Features of cations' kinetic adsorption on the surface of the selective sorbent in view of their desorption opportunity. **E.R. Shchukin, Z.L. Shulimanova, N.V. Malaj, L.I. Trahtenberg** 146

Stochastic theory of heat electromagnetic irradiation transfer in semitransparent dielectrics. **M.A. Saprykin** 152

Development H⁻ sources for the medicine accelerators. **P.A. Litvinov, V.A. Baturin** 160

Finding content of Au in samples by (γ, γ') ^m reactions and integral sections. **E.D. Kuplennikov, S.N. Afanas'ev, V.V. Krasil'nikov** 166

Estimation of electronic concentration in plasma of an arch two-jet plasmatron. **E.A. Tagiltseva, A.P. Tagiltsev, B.K. Zuev** 172

Status of the experiment on search and investigation of electron diffracted channeling radiation on the RINP MSU microtrone. **D.A. Baklanov, I. E. Vnukov, V.K. Grishin, A.N. Ermakov, Yu.V. Zhandarmov, R. A. Shatokhin** 179

Detection of nano-scaling mechanical defects on silicon surface in nematic cell. **E.P. Bucheli, S.I. Kucheev** 193

Quantum manifestation for the classical integrable two-dimensional system with double-well potential. **N.A. Chekanov, E.V. Shevchenko** 198

Synthesis and the analysis of optimum solving rules of selection of the purposes in the cloud casual diffusers at full polarizing sounding space. **B.V. Khrabrostin, M.M. Sapov, D.B. Khrabrostin** 205

Evaluation of the use of second generation wavelets in the coherent vortex simulation approach. **A.M. Logvinov, Y.E. Polenova, G.A. Travin** 223

Scattering of the multiply charged ions in the oriented crystals. **V.S. Malyshevsky, D.A. Trukhov** 236

Imitating modelling of structure densepacking systems of hard disks. **V.G. Bondarev, L.V. Migal, T.P. Bondareva** 248

Spatially oscillating photovoltaic current in optical active crystals. **B.H. Karimov** 261

To the question on hydrodynamical resistance of the spherical particle with the homogeneous internal thermal emission. **A.A. Stukalov** 267

An influence of environment's movement on photophoresis of the firm aerosol particle of the spheroidal form. **N.V. Malay, N.N. Mironova** 272

Information about Authors 283

К ВОПРОСУ О СТАБИЛИЗИРУЮЩЕЙ РОЛИ ХИЩНИЧЕСТВА

М.А. Амагов, Г.М. Амадова, И.С. Кузнецова, Н.А. Чеканов

Белгородский государственный университет
308015, Белгород, ул. Победы, 85
amatovm@bsu.edu.ru, amatova@bsu.edu.ru,
chekanov@bsu.edu.ru, i_kuznecova@mailto.ru

В работе рассматривается система дифференциальных уравнений типа хищник-жертва, в случае, когда один хищник питается двумя жертвами. С использованием теории дифференциальных уравнений с разрывными правыми частями доказывается, что даже в предположении отсутствия межвидовой и внутривидовой конкуренции существуют значения параметров системы, при которых любая траектория, начинающаяся в первом октанте, ограничена. Численно-аналитическими методами строятся траектории заканчивающиеся циклом, лежащим на многообразии скользящих движений.

Ключевые слова и фразы: математическая модель, три взаимодействующие популяции, хищник и два вида жертв, дифференциальные уравнения с разрывной правой частью, символично-численное моделирование.

Если популяции, обитающие в некотором ареале, имеют количество пищи, достаточное для полного их удовлетворения, то естественно ожидать, что их численность будет расти неограниченно. Но, как известно, в природе этого не происходит. Причиной тому служат три основных фактора – внутривидовая конкуренция, межвидовая конкуренция и хищничество. Анализ этих факторов посвящено большое число работ, в частности, монографии [1-7], в которых доказано, что конкуренция (внутривидовая или межвидовая) ведёт к ограничению численностей всех видов и нередко служит причиной возникновения периодических колебаний их численностей.

Вместе с тем, из курсов экологии [8] известно, что одно только воздействие хищника на популяции (даже при отсутствии конкуренции) способно стабилизировать их численность, не доводя ни одну из них до полного исчезновения. Причина этого, очевидно, кроется в регулирующей роли хищника, питающегося всеми видами.

В настоящей статье предлагается математическую модель, в которой, в отличие от других работ, посвящённых данной проблеме, для описания динамики численностей трёх популяций (из которых одна популяция – хищник, питающийся двумя жертвами), используются дифференциальные уравнения с разрывными правыми частями. Применение аппарата теории таких уравнений [9, 10] позволило доказать, что в системе возможно установление устойчивого периодического режима.

Используя «гипотезу встреч» ([2], стр. 134) и методику В. Вольтерра [1] составления дифференциальных уравнений динамики биологических популяций, для данного случая получаем систему уравнений (1).

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = x \cdot (a - b \cdot z), \\ \frac{dy}{dt} = y \cdot (c - d \cdot z), \\ \frac{dz}{dt} = z \cdot (-e + h \cdot x + g \cdot y) \end{cases} \quad (1)$$

В этой системе a, b, c, d, e, h, g – положительные константы, x и y – числен-

ности популяций жертв, а z – численность хищника.

Система (1) имеет три особые точки $M_0(0,0,0)$, $M_1\left(0, \frac{e}{g}, \frac{c}{d}\right)$, $M_2\left(\frac{e}{h}, 0, \frac{a}{b}\right)$.

Точка M_0 типа седло-узел [11], так как корни характеристического уравнения системы (1) в ней действительные и различных знаков: $\lambda_1 = a$, $\lambda_2 = c$, $\lambda_3 = -e$. В точках M_1 и M_2 характеристическое уравнение имеет по одному действительному корню, а два корня чисто мнимые. В точке M_1 они равны: $\lambda_1 = \frac{ad-bc}{d}$, $\lambda_{2,3} = \pm i \cdot \sqrt{ce}$, а в точке M_2 : $\lambda_1 = \frac{bc-ad}{b}$ и $\lambda_{2,3} = \pm i \cdot \sqrt{ae}$.

Очевидно, что знаки действительных корней в точках M_1 и M_2 зависят от знака определителя $\Delta = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$. Если в одной из этих точек знак действительного корня положителен, то есть точка неустойчива, то в другой – он отрицателен, и значит, в этой точке имеет место особый случай неасимптотической устойчивости [12, с. 176].

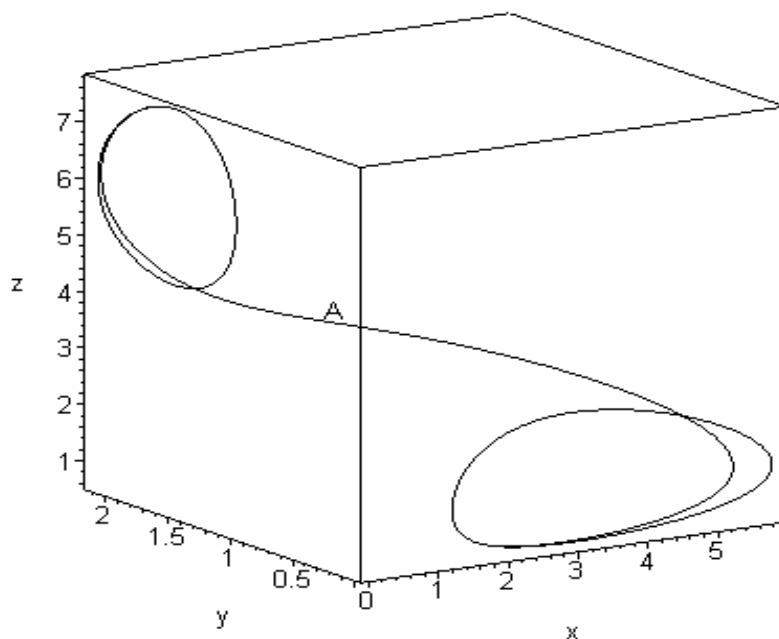


Рис. 1. Предельный цикл в системе (1)

Предположим для определённости, что $\Delta = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc < 0$. Тогда точка M_1 устойчива, а точка M_2 неустойчива.

На рис. 1, для значений параметров $a = 3$, $b = 2$, $c = 6$, $d = 1$, $h = 1$, $g = 2$, $\Delta = -9$, изображена траектория системы (1), проходящая при $t = 0$ через точку $A(1, 5; 1, 4)$. Легко видеть, что при $t \rightarrow +\infty$ траектория навивается на предельный цикл, лежащий в плоскости yoz . В общем случае все траектории системы (1), начинающиеся в точках области \square^3_+ , ведут себя подобным же образом и, следовательно, $\lim_{t \rightarrow +\infty} x(t) = 0$.

Последнее означает, что из двух популяций жертвы одна оказывается истребленной хищником. Как уже было отмечено выше в природе это не всегда так. Таким

образом, система (1) является математической моделью частного случая системы типа хищник-жертва, когда воздействие хищника приводит к гибели одной из популяций.

Вид системы дифференциальных уравнений, описывающих динамику взаимодействующих популяций, может быть определён только приближённо и на основе экспериментальных данных. В обстоятельной работе [5], посвящённой рассматриваемому вопросу, отмечается единственная статья [16], содержащая результаты эксперимента. Что же касается остальных работ, то о них сказано буквально следующее: «к сожалению, выбранные авторами знаки коэффициентов не допускают экологической интерпретации». Тем не менее, определённые выводы качественного характера относительно вида таких систем и поведения их траекторий могут быть сделаны и чисто теоретически. С этой целью используем прием, впервые применённый А.А. Александровым, при исследовании колебаний тока в ламповом генераторе в случае Z-характеристики [10, стр. 190]. Как известно, суть этого метода заключается в замене экспериментально определяемой функции на разрывную функцию и, соответственно, непрерывного дифференциального уравнения уравнением с кусочно-непрерывными правыми частями. Пусть область \mathbb{R}_+^3 разбивается некоторой гладкой поверхностью S , проходящей через ось oz , на две части G^+ и G^- , и рассматриваемая система дифференциальных уравнений терпит на поверхности S разрыв, а в каждой из областей G^+ и G^- имеет вид системы (1), но с различными коэффициентами. Будем считать, что в области G^- , заключённой между координатной плоскостью xoz и поверхностью S , динамика численностей популяций задаётся системой дифференциальных уравнений (2), а в области G^+ между координатной плоскостью yoz и поверхностью S системой (3):

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = x \cdot (a - b_1 \cdot z), \\ \frac{dy}{dt} = y \cdot (c - d_1 \cdot z), \\ \frac{dz}{dt} = z \cdot (-e + h_1 \cdot x + g_1 \cdot y) \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = x \cdot (a - b_2 \cdot z), \\ \frac{dy}{dt} = y \cdot (c - d_2 \cdot z), \\ \frac{dz}{dt} = z \cdot (-e + h_2 \cdot x + g_2 \cdot y) \end{cases} \quad (3)$$

Коэффициенты a, c, e являются коэффициентами прироста популяций ([1], стр.11), поэтому естественно считать их одними и теми же для обеих систем (2) и (3). Кроме того, не ограничивая общности рассуждений, всюду в дальнейшем будем считать $a > c$. На коэффициенты b_i, d_i ($i = 1, 2$) наложим следующие условия:

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} a & b_1 \\ c & d_1 \end{vmatrix} = ad_1 - b_1c < 0, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a & b_2 \\ c & d_2 \end{vmatrix} = ad_2 - b_2c > 0. \quad (4)$$

Отсюда легко выводится неравенство:

$$\frac{b_2}{d_2} < \frac{a}{c} < \frac{b_1}{d_1}. \quad (5)$$

Если учесть, что в области G^- , вблизи плоскости xoz , имеет место неравенство $y < x$, а в области G^+ , вблизи плоскости yoz , – неравенство $x < y$, то становится ясен биологический смысл неравенства (5) – *интенсивней истребляется хищником та из двух популяций, численность которой больше*. Очевидно, что это утверждение вполне согласуется с гипотезой встреч: чем больше численность популяции, тем больше вероятность встречи с хищником. Это означает, что описанная выше постановка задачи вполне оправдана, и анализ её может привести к выводам, имеющим определённый биологический смысл.

Естественно, поведение траекторий системы (2), (3) зависит от выбора поверх-

ности S . В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением случая, когда поверхностью разрыва является плоскость: $y = x$.

В этом случае

$$G^- = \{(x, y, z) \mid 0 < x < +\infty, \quad 0 < y < x, \quad 0 < z < +\infty\},$$

$$G^+ = \{(x, y, z) \mid 0 < x < +\infty, \quad x < y < +\infty, \quad 0 < z < +\infty\}.$$

Итак, в области G^- динамика численностей популяций описывается системой дифференциальных уравнений (2), в области G^+ – системой (3), кроме того, выполнены неравенства (4). Всюду в дальнейшем популяцию жертвы, численность которой обозначена буквой x будем называть первой, а ту, численность которой обозначена буквой y – второй. Решения системы дифференциальных уравнений (2), (3) с разрывными правыми частями будем понимать в смысле А.Ф. Филиппова, и использовать обозначения принятые в статьях [6, 7].

Очевидно, что в области G^- численность первой популяции превосходит численность второй, а в области G^+ наоборот – численность второй превосходит численность первой. Переход же изображающей точки траектории системы (2), (3) из одной области в другую, с точки зрения биологии, означает, что как только численность одной из популяций превосходит численность другой, сразу же (что вполне естественно) первая популяция начинает превалировать в рационе хищника.

Покажем, что при некоторых дополнительных условиях, на плоскости разрыва S : $y = x$ существует область скользящих движений. С этой целью, следуя упомянутым работам А.Ф. Филиппова, рассмотрим векторы касательные к траекториям систем (2), (3):

$$\begin{aligned} \vec{f}^- &= x \cdot (a - b_1 \cdot z) \cdot \vec{i} + x \cdot (c - d_1 \cdot z) \cdot \vec{j} + z \cdot [-e + (h_1 + g_1) \cdot x] \cdot \vec{k}, \\ \vec{f}^+ &= x \cdot (a - b_2 \cdot z) \cdot \vec{i} + x \cdot (c - d_2 \cdot z) \cdot \vec{j} + z \cdot [-e + (h_2 + g_2) \cdot x] \cdot \vec{k}, \\ \vec{N} &= -\vec{i} + \vec{j}, \quad \vec{n} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\vec{i} + \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{j}, \quad f_n^- = \frac{x}{\sqrt{2}}[c - a + (b_1 - d_1) \cdot z], \\ f_n^+ &= \frac{x}{\sqrt{2}}[c - a + (b_2 - d_2)z], \quad f_n^- - f_n^+ = \frac{x \cdot z}{\sqrt{2}}[b_1 - d_1 - (b_2 - d_2)]. \end{aligned}$$

Выясним наличие и вид областей скользящих движений на плоскости разрыва $y = x$ в пределах области \square_+^3 . Как доказано в [6, 7], условия существования скользящих движений записываются в виде: $f_n^- \geq 0$, $f_n^+ \leq 0$ и $f_n^- - f_n^+ > 0$. Учитывая приведенные выше формулы, имеем:

$$\begin{cases} f_n^- \geq 0, \\ f_n^+ \leq 0, \\ f_n^- - f_n^+ > 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} c - a + (b_1 - d_1) \cdot z \geq 0, \\ c - a + (b_2 - d_2)z \leq 0, \\ b_1 - d_1 > b_2 - d_2. \end{cases} \quad (6)$$

Последнее из неравенств (6), по сути, является следствием двух первых и показывает, что, по крайней мере, одно из них должно быть строгим. Чтобы исследовать систему неравенств (6), рассмотрим все логически допустимые соотношения между числами $b_1 - d_1$, $b_2 - d_2$ и 0.

а) Пусть $b_1 - d_1 > b_2 - d_2 > 0$. Тогда из первых двух неравенств (6) находим:

$$\frac{a - c}{b_1 - d_1} \leq z \leq \frac{a - c}{b_2 - d_2}.$$

Областью скользящих движений, в рассматриваемом случае является полоса

$D^0 = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, \frac{a-c}{b_1-d_1} \leq z \leq \frac{a-c}{b_2-d_2} \right\}$, лежащая в плоскости $y = x$. В точках

полосы $D^- = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, 0 < z \leq \frac{a-c}{b_1-d_1} \right\}$, находящейся под D^0 , происходит

переход с траекторий системы (3) (с траекторий скользящих движений) на траектории системы (2), т.е. из области G^+ в область G^- , поскольку в точках этой области имеют место неравенства $f_n^- \leq 0, f_n^+ < 0$.

В точках же области $D^+ = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, \frac{a-c}{b_2-d_2} \leq z \right\}$, лежащей над D^0 , происходит переход с траекторий системы (2) (с траекторий скользящих движений) на траектории системы (3), т.е. из области G^- в область G^+ , поскольку в точках этой области имеют место неравенства $f_n^- > 0, f_n^+ \geq 0$.

б) Если выполнено неравенство $b_1 - d_1 > b_2 - d_2 = 0$, то второе из неравенств (6) выполняется всюду, а первое даёт $\frac{a-c}{b_1-d_1} \leq z$. Следовательно, область скользящих

движений есть множество $D^0 = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, \frac{a-c}{b_1-d_1} \leq z \right\}$. В точках области

D^- , лежащей под D^0 , так же, как и в предыдущем пункте, изображающая точка переходит с траекторий системы (3) (с траекторий скользящих движений) на траектории системы (2), т.е. из области G^+ в область G^- .

в) В случае выполнения неравенства $b_1 - d_1 > 0 > b_2 - d_2$ первые два из неравенств (6) дают: $z \geq \frac{a-c}{b_1-d_1}$ и $z \geq \frac{a-c}{b_2-d_2}$, но поскольку $\frac{a-c}{b_2-d_2} < 0$, а мы ограничиваемся областью \square_+^3 , то остаётся только первое из неравенств, и мы имеем ту же самую область скользящих движений, что и в предыдущем пункте.

г) Неравенство $0 \geq b_1 - d_1 > b_2 - d_2$ не имеет смысла рассматривать, так как оно противоречит условию $a > c$. Действительно, $\Delta_1 = \begin{vmatrix} a & b_1 \\ c & d_1 \end{vmatrix} = ad_1 - b_1c < 0$, откуда имеем:

$d_1 < \frac{c}{a}b_1$. С другой стороны $0 \geq b_1 - d_1 \Rightarrow b_1 \leq d_1$. Из неравенств $b_1 \leq d_1$ и $d_1 < \frac{c}{a}b_1$ по транзитивности вытекает неравенство $b_1 < \frac{c}{a}b_1$.

После сокращения последнего неравенства на b_1 получаем $\frac{c}{a} > 1$ или $c > a$, что противоречит принятому по условию неравенству $a > c$.

д) При выполнении неравенства $b_2 - d_2 \geq b_1 - d_1 > 0$ последнее из неравенств (6) не имеет места и, следовательно, в системе (2), (3) скользящих движений нет. Анализ первых двух неравенств системы (6) показывает, что через точки области

$D^- = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, 0 < z < \frac{a-c}{b_2-d_2} \right\}$ происходит переход с траекторий системы

(3) на траектории системы (2), т.е. из области G^+ в область G^- .



Через точки области $D^+ = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, \frac{a-c}{b_1-d_1} < z \right\} \frac{1}{2}$ происходит переход с траекторий системы (2) на траектории системы (3), т.е. из области G^- в область G^+ , а полоса $D^0 = \left\{ (x, y, z) \mid x > 0, y = x, \frac{a-c}{b_1-d_1} \leq z \leq \frac{a-c}{b_2-d_2} \right\}$ является полосой неустойчивости.

е) Соотношение $b_2 - d_2 \geq b_1 - d_1 = 0$ противоречит условию $\Delta_1 < 0$, так как из равенства $b_1 = d_1 = b$ следует, что $\Delta_1 = \begin{vmatrix} a & b \\ c & b \end{vmatrix} = b \cdot (a - c) > 0$.

ж) Неравенства $b_2 - d_2 \geq 0 \geq b_1 - d_1$ и $0 \geq b_2 - d_2 \geq b_1 - d_1$ также противоречат условию $\Delta_1 < 0$. Так как, перемножив почленно неравенства $a > c > 0$ и $d_1 \geq b_1 > 0$, получим $a \cdot d_1 > c \cdot b_1$, откуда $\Delta_1 = a \cdot d_1 - c \cdot b_1 > 0$.

Итак, из восьми рассмотренных и логически возможных соотношений между числами $b_1 - d_1$, $b_2 - d_2$ и 0 только четыре не противоречат условиям, накладываемым на систему (2), (3). Из этих же четырёх, в трёх случаях разрывная система (2), (3) имеет в плоскости разрыва $y = x$ непустую область D^0 скользящих движений, и только в одном случае области скользящих движений не существует.

Далее, найдём уравнения скользящих движений, по траекториям которых изображающая точка движется в пределах области D^0 . При этом, будем считать выполненным следующее дополнительное условие $h_1 + g_1 = h_2 + g_2$, означающее, что даже при изменении состава пищи, добываемой хищником, количество её остаётся неизменным.

Проведя несложные, но довольно громоздкие выкладки, получим:

$$\alpha = \frac{c - a + (b_1 - d_1)z}{[b_1 - d_1 - (b_2 - d_2)]z}, \quad 1 - \alpha = \frac{a - c + (d_2 - b_2)z}{[b_1 - d_1 - (b_2 - d_2)]z}.$$

$$\vec{f}^0 = x \cdot \left[\frac{a(d_2 - d_1) + c(b_1 - b_2)}{d_2 - d_1 + b_1 - b_2} - \frac{\begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ d_1 & d_2 \end{vmatrix}}{d_2 - d_1 + b_1 - b_2} \cdot z \right] \cdot \vec{i} +$$

$$+ x \cdot \left[\frac{a(d_2 - d_1) + c(b_1 - b_2)}{d_2 - d_1 + b_1 - b_2} - \frac{\begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ d_1 & d_2 \end{vmatrix}}{d_2 - d_1 + b_1 - b_2} \cdot z \right] \cdot \vec{j} + z \cdot [-e + (h_1 + g_1) \cdot x] \cdot \vec{k}$$

Уравнения проекций траекторий скользящих движений на плоскость xoz запишутся в следующем виде:

$$\frac{dx}{dt} = x \cdot [A - B \cdot z], \quad \frac{dz}{dt} = z \cdot [-C + D \cdot x], \quad (7)$$

где для краткости приняты обозначения:

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ d_1 & d_2 \end{vmatrix}, \quad A = \frac{a(d_2 - d_1) + c(b_1 - b_2)}{d_2 - d_1 + b_1 - b_2}, \quad B = \frac{\Delta_3}{d_2 - d_1 + b_1 - b_2}, \quad C = e, \quad D = h_1 + g_1$$

Особая точка $P_0(x_0, y_0)$ системы уравнений (7) имеет координаты:

$$x_0 = \frac{C}{D} = \frac{e}{h_1 + g_1}, \quad z_0 = \frac{a(d_2 - d_1) + c(b_1 - b_2)}{\Delta_3}.$$

Поскольку положительность коэффициентов C и D очевидна, то $x_0 > 0$. Определим знаки остальных коэффициентов системы уравнений (7) и покажем, что $z_0 > 0$. По условию $\Delta_1 = ad_1 - b_1c < 0$, $-\Delta_2 = b_2c - ad_2 < 0$. Складывая эти неравенства, получаем:

$$\Delta_1 - \Delta_2 = ad_1 - b_1c - (ad_2 - b_2c) = a(d_1 - d_2) + c(b_2 - b_1) < 0.$$

Тем самым неравенство $a(d_2 - d_1) + c(b_1 - b_2) > 0$ доказано.

Аналогично, раскрывая очевидное неравенство $b_1 \cdot \Delta_2 - b_2 \cdot \Delta_1 > 0$, имеем:

$$\begin{aligned} b_1 \cdot \Delta_2 - b_2 \cdot \Delta_1 &= b_1 \cdot (a \cdot d_2 - c \cdot b_2) - b_2 \cdot (a \cdot d_1 - c \cdot b_1) = \\ &= b_1 \cdot a \cdot d_2 - \cancel{c \cdot b_1 \cdot b_2} - b_2 \cdot a \cdot d_1 - \cancel{c \cdot b_1 \cdot b_2} = a(b_1 \cdot d_2 - b_2 \cdot d_1) = a \cdot \Delta_3 > 0. \end{aligned}$$

Откуда и следует, что $\Delta_3 > 0$. Из доказанного и последнего из неравенств (6) сразу же вытекают неравенства $A > 0$, $B > 0$, и $z_0 > 0$.

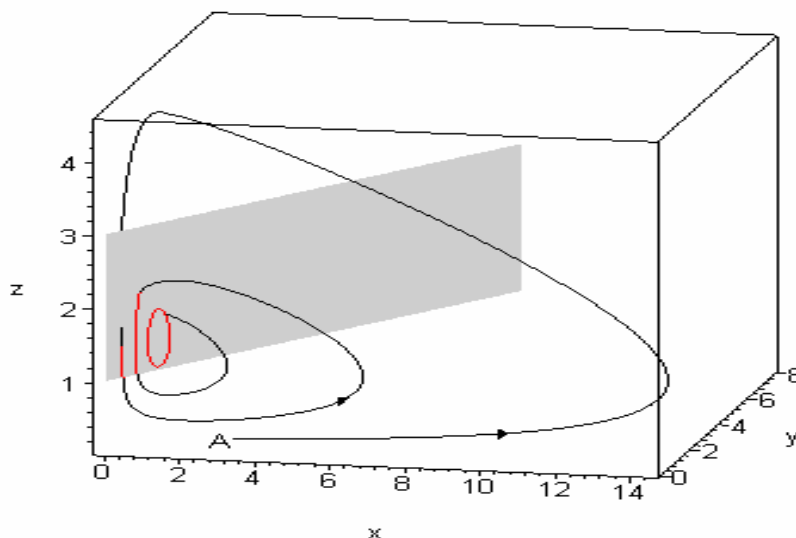


Рис. 2. Траектория системы уравнений (2), (3), которая заканчивается циклом

Далее, путём аналогичных преобразований доказывается, что точка P_0 всегда лежит внутри области скользящих движений. Из положительности коэффициентов A, B, C, D следует, что система уравнений (7) есть система Лотки-Вольтерра, и траектории её представляют собой семейство замкнутых кривых. Но в таком случае в области D^0 скользящих движений обязательно найдётся непустая её часть G^0 , ограниченная некоторой замкнутой траекторией системы уравнений скользящих движений. Если изображающая точка какой-либо траектории разрывной системы (2), (3), в момент времени $t = t_0$ попадает в область G^0 , то в дальнейшем при всех $t \geq t_0$ она будет двигаться по некоторому циклу, лежащему в G^0 .

Авторами данной статьи разработан пакет программ для интегрирования систем дифференциальных уравнений с разрывными правыми частями и построения траекторий таких систем. Для разрывной системы (2), (3) со значениями параметров: $a = 7$, $c = 1$, $b_1 = 6,5$, $d_1 = 0,5$, $b_2 = 3$, $d_2 = 1$, $h_1 = g_2 = 1$, $g_1 = h_2 = 2$, с помощью одной из программ указанного пакета, построена траектория, начинающаяся в точке $A(3; 1; 0,1)$ и изображенная на рис. 2. Как видно на этом рисунке траектория заканчивается циклом, лежащим в области скользящих движений.

Следует отметить, что и при наличии циклов существуют траектории, для которых одна или несколько переменных становятся очень малыми, то есть некоторые из популяций погибают. Для значений параметров $a = 2$, $c = 1$, $b_1 = 3$, $d_1 = 1$, $b_2 = 7$, $d_2 = 4$, $h_1 = g_2 = 1$, $g_1 = h_2 = 2$ вид траектории системы (2),(3), начинающейся в точке $A(3; 2; 0,45)$, изображён на рис. 3. Гибель всех популяций системы в этом случае очевидна.

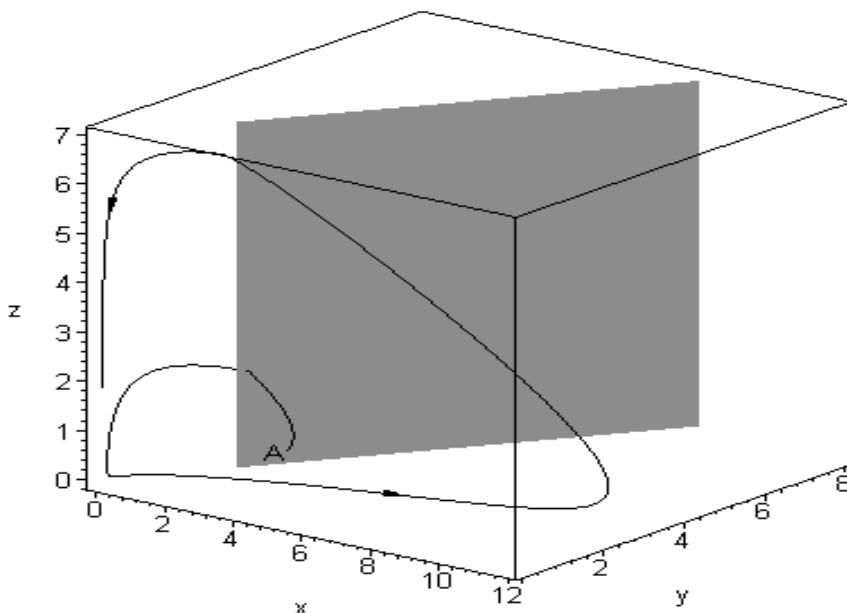


Рис. 3. Траектория системы уравнений (2), (3), которая отвечает исчезновению одной из взаимодействующих популяций

Проведённый анализ позволяет сделать следующие выводы.

1) В системе взаимодействующих популяций, в которой хищник питается двумя различными популяциями жертв, возможно установление периодического режима.

2) Если амплитуда колебаний достигает значительных размеров одна или несколько из взаимодействующих популяций могут погибнуть.

4) Рассмотренная система автономна, то есть в ней принято, что первичный источник энергии (солнечное излучение, вода, минеральные соли) имеют непериодический характер. Следовательно, она представляет собой пример автоколебательной системы, так как за счёт «непериодического источника энергии» создаёт периодический процесс ([10], стр.222).

Литература

1. Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование. – М.: Наука, 1976.
2. Свиричев Ю.М., Логофет Д.О. Устойчивость биологических сообществ. – М.: Наука, 1978.
3. Пых Ю.А. Равновесие и устойчивость в моделях популяционной динамики. – М.: Наука, 1983.
4. Мари Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях. – М.: Мир, 1983.
5. Базыкин А.Д. Нелинейная динамика взаимодействующих популяций. – Москва-Ижевск: РХД, 2003.
6. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическое моделирование в биофизике. Введение в теоретическую биофизику. – Москва-Ижевск: РХД, 2004.
7. Ризниченко Г.Ю. Математические модели в биофизике и экологии. – Москва-Ижевск: РХД, 2003.
8. Одум Ю. Основы экологии. – М.: Мир, 1975.
9. Филиппов А.Ф. Дифференциальные уравнения с разрывной правой частью. – М.: Наука, 1985.
10. Уткин В.И. Скользящие режимы и их применения в системах с переменной структурой. – М.: Наука, 1974.

11. Бутенин Н.В., Неймарк Ю.И., Фуфаев Н.А. Введение в теорию нелинейных колебаний. – М.: Наука, 1976.
12. Малкин И.Г. Теория устойчивости движения. – М.: Наука, 1966.
13. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – М.: Наука, 1981.
14. Степанов В.В. Курс дифференциальных уравнений. – М.: ГИТТЛ, 1953.
15. Немыцкий В.В., Степанов В.В. Качественная теория дифференциальных уравнений. – М.: ГИТТЛ, 1949
16. Paine R.T. Food web complexity and species diversity. // Amer. Natur., 1966, vol. 100, p.65-75.

TO THE ISSUE OF PREDATOR'S ROLE IN STABILITY

M.A. Amatov, G.M. Amatova, I.S. Kuznetsova, N.A. Chekanov

Belgorod State University, Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia,
amatovm@bsu.edu.ru, amatova@bsu.edu.ru,
chekanov@bsu.edu.ru, i_kuznecova@mailto.ru

A mathematical model is considered, which describes through a system of differential equations with discontinuous right-hand sides the dynamics of the numbers of species in three interacting populations, one of which is predator feeding on two species of prey. It has been proven that auto-oscillation mode is possible in such a system.

Key words and phrases: mathematical model, three interacting populations, predator feeding on two species of prey, differential equations with discontinuous right-hand sides, symbolic-numeric modeling.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО ОПИСАНИЯ НЕЛОКАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КЭД

Ю.А. Касаткин¹⁾, И.К. Кириченко²⁾

¹⁾ Институт электрофизики и радиационных технологий,
61002, г. Харьков, ул. Чернышевского, 28, а/я 8812, Украина,
YuKasatkin2007@yandex.ru

²⁾ Украинская инженерно-педагогическая академия,
61003, г. Харьков, ул. Университетская, 16, Украина

Предложен альтернативный подход включения электромагнитного поля в КЭД, минуя этап получения Лагранжиана взаимодействия. Преимущество такого подхода состоит в том, что открывается возможность адекватно ввести в рассмотрение локальные и нелокальные заряженные поля материи на основе общих принципов. Основу рассмотрения составляют нелокальные 2-х и 3-х частичные функции Грина, в которых полевые операторы частиц согласованы со структурой конфигурационного пространства. Получена обобщенная калибровочно-инвариантная амплитуда, в которой согласованы действия законов сохранения 4- импульса и заряда.

Ключевые слова: электромагнитные поля, лагранжиан, локальные и нелокальные поля, функции Грина.

Введение

Традиционные методы КЭД неотделимы от применения S-матричного подхода, традиционных методов стандартной теории возмущений, а также соглашения об адиабатической гипотезе, отражающей дальнедействующий характер электромагнитных (ЭМ) сил. Существенным моментом реализации S-матричного описания является возможность использования лагранжевого подхода, а применение функциональных методов, в основе которых используется конструкция производящего функционала, позволяет находить функции Грина (ФГ), которые после редуцирования определяют матричные элементы различных квантово-электродинамических процессов. Правила Фейнмана позволяют сократить путь получения матричных элементов различных процессов и унифицировать расчеты. Основу КЭД составляет набор аксиоматических положений Лемана, Симанзика, Циммермана и формулировки теории на основе хронологически упорядоченных ФГ [1].

Важный этап реализации описанной схемы связан с построением лагранжиана свободного фундаментального поля материи и включение в него ЭМ поля на основе “рецепта” КЭД – замены обычных производных на ковариантные производные, что дает возможность ввести в рассмотрение лагранжиан взаимодействия, в котором состояние частицы в процессе взаимодействия не изменяется.

В основе развитых представлений существенно используется принцип локальности при взаимодействии заряженного фундаментального поля материи с ЭМ полем. Кроме того, в процессе не происходят изменения массы и заряда частицы до и после взаимодействия с ЭМ полем. Закон сохранения заряда в лагранжиане имеет завуалированное содержание после расширения требования глобальной калибровочной симметрии до уровня локальной. Забегая вперед, отметим, что связь закона сохранения заряда с обеспечением требования локальной калибровочной симметрии становится очевидной лишь при рассмотрении процессов, в которых исходное заряженное нелокальное поле после взаимодействия претерпевает расщепление на два и более фрагментов. Внешняя искусственность процедуры введения ЭМ поля в лагранжиан свободного электронного поля при локализации калибровочной $U(1)$ симметрии, обретает глобо-

кое внутреннее содержание при включении в теорию нелокальных полей, которые в процессе взаимодействия с ЭМ полем фрагментируются на составные элементы.

Описанный выше подход КЭД при попытке его обобщения на нелокальные поля материи уже на начальном этапе сталкивается с непреодолимой трудностью – отсутствием возможности использования лагранжевых методов. Невозможно сконструировать лагранжиан свободного нелокального поля через его составляющие фрагменты с неизвестным в настоящее время взаимодействием между ними, а, следовательно, приводит к отсутствию возможности включения в него ЭМ поля в соответствие с рецептом использования ковариантных производных. Дело в том, что начальное связанное состояние через его фрагменты представляет собой скорее не лагранжиан, а амплитуду вне массовой поверхности.

В связи с описанной ситуацией возникает потребность альтернативного введения ЭМ поля при описании взаимодействий, как с локальными, так и нелокальными заряженными полями материи. Более того, при таком расширении возможностей КЭД с учетом применения ее методов на нелокальные поля материи, необходимо сохранить все результаты, полученные в рамках локального рассмотрения. Желаемым результатом такого обобщения является обеспечение возможности, допускающей непрерывный предел от нелокального рассмотрения к локальному пределу.

Альтернативное построение КЭД

Прежде чем развить новые положения построения теории нелокальных взаимодействий, необходимо отметить ряд общих положений, которые незримо присутствовали при описании объективной картины ЭМ взаимодействий и которые уходили на второй план при построении локальной теории, но начинают играть определяющую роль при обобщении на нелокальные взаимодействия. Это связано с одновременным присутствием в процессах как минимум двух взаимодействий – ЭМ и неизвестного сильного. При переходе к нелокальным полям необходимо учесть три очевидных момента.

1. Понятие о заряде частиц неотделимо от понятия о массе, т.е. все заряженные частицы массивны (не существует частиц с нулевой массой, но имеющих электрический заряд отличный от нуля). Электрический заряд аддитивно сохраняется.

2. В дополнение к известному принципу *универсальности* ЭМ взаимодействий в КЭД, необходимо добавить принцип *индифферентности*, т.е. независимость ЭМ сил от присутствия иных видов взаимодействий, т.е. выполнение закона сохранения электрического заряда безотносительно к присутствию иных видов, известных в настоящее время, взаимодействий. Это экспериментально установленный факт, подтвержденный многочисленными измерениями. Кроме того, ЭМ формфакторы составного заряженного поля при его зондировании виртуальными фотонами не равны сумме формфакторов его составляющих фрагментов. Этот факт исключает введение в теорию каких-либо характерных масштабов для учета размеров области нелокальности, что означает неизменность вида калибровочных преобразований, как для локальных, так и нелокальных взаимодействий.

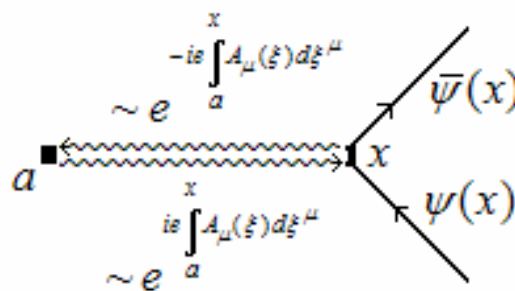
3. Одновременное присутствие в процессе двух взаимодействий – ЭМ и структуру образующего сильного, существенно различающихся интенсивностью и областью действия, в результате чего происходит существенные изменения связанные с перераспределением массы и заряда начального нелокального поля между его наблюдаемыми фрагментами, что приводит к требованию согласованного описания всего процесса в целом. На языке выполнения требований непрерывных и дискретных симметрий это приводит к необходимости согласования трансляций пространственно-временного описания перемещения масс с перемещением соответствующих им зарядов, что в ко-

нечном итоге в амплитуде приводит к требованию согласования действий законов сохранения энергии-импульса и заряда.

Чтобы удовлетворить требованиям пунктов 1-3 прежде всего необходимо привести в соответствие волновые операторы заряженных частиц со структурой конфигурационного пространства, которое является расслоенным и допускает разложение в каждой 4-точке в прямое произведение пространственно-временного многообразия и присоединенное (зарядовое) пространство внутренних симметрий. С геометрических представлений калибровочное ЭМ поле представляет собой связность главного расслоения конфигурационного пространства и определяет правило позволяющее согласовать траектории в базисном пространстве с их проекциями в присоединенном пространстве. Это свойство калибровочного поля обеспечивает возможность осуществлять сравнения заряженных полей, находящихся в различных точках пространственно-временного континуума. Иначе говоря, дает возможность ввести в рассмотрение обобщенную (фазовую) зарядовую координату. Понятие параллельного переноса [2] заряженного поля материи в присутствии ЭМ $A_\mu(\xi)$ из пространственно-временной точки x в 4-точку x' вдоль траектории $\eta(x, x')$ определяется условием равенства нулю ковариантной производной от полевого оператора в касательном направлении для каждой ее точки: $\dot{x}_\mu(s) \cdot D^\mu \psi(x) \Big|_{x=x(s)} = 0$ ($D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu$ -ковариантная производная, $x = x(s)$ - 4-мерная траектория $\eta(x, x')$ как функция естественного параметра ее длины s). Это уравнение определяет изменение заряженного поля в точке x' по отношению к точке x , т.е.

$$\psi(x') = P e^{ie \int_x^{x'} A_\mu(\xi) d\xi^\mu} \psi(x), \quad (1)$$

где P – оператор упорядочения вдоль траектории $\eta(x, x')$.



$$\mathcal{L}_{local}(x; A) = \bar{\psi}(x) e^{-ie \int_a^x A_\rho(\xi) d\xi^\rho} (i\gamma^v \partial_v - m) e^{ie \int_a^x A_\mu(\xi) d\xi^\mu} \psi(x)$$

Рис. 1. Локальный характер взаимодействия ЭМ поля с фундаментальным электронным полем

Этот результат позволяет восстановить локальную калибровочную симметрию лагранжиана свободного электронного поля в конфигурационном пространстве, где для электронного поля в точке x в присутствии ЭМ поля соотнесенного к началу от-

счета фазы в точке a (рис.1) и замены $\psi(x)$ на $\Psi(x; A) = e^{ie \int_a^x A_\mu(\xi) d\xi^\mu} \psi(x)$, то локальный лагранжиан в терминах $\Psi(x; A)$ принимает вид

$$\begin{aligned} L_{local}(x; A=0) &= \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) \Rightarrow \\ L_{local}(x; A) &= \bar{\Psi}(x; A)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi(x; A) = \bar{\psi}(x) e^{-ie \int_a^x A_\rho(\xi) d\xi^\rho} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) e^{ie \int_a^x A_\mu(\xi) d\xi^\mu} \psi(x) = \\ &= \bar{\psi}(x) i\gamma^\mu (\partial_\mu + ieA_\rho(x)) \psi(x) - m \cdot \bar{\psi}(x) \psi(x), \end{aligned} \quad (2)$$

который приобретает стандартный локально калибровочно-инвариантный вид. Аналогичный результат получается для скалярного поля. Это означает, что локальная калибровочная симметрия восстанавливается за счет приведения в соответствие волновой функции со структурой конфигурационного пространства по правилу (1).

Вывод. Изначально локальная форма представления лагранжиана (2) свободно электронного поля, обладающая глобальной калибровочной симметрией, в результате включения в него ЭМ поля в соответствие с “рецептом” КЭД позволяет расширить симметрию до локального вида. Однако такие преобразования существенно основаны на предположении, что вносимое в систему ЭМ полем возмущение настолько мало, что состояние частицы до и после взаимодействия не изменяется. Это предположение отражает содержание адиабатической гипотезы. Локальная структура лагранжиана не позволяет его применение к нелокальным полям материи.

На основе полученных результатов переформулируем КЭД на языке нелокальных структур – калибровочно-инвариантных ФГ. Определим 2-х частичную нелокальную функцию ФГ [3-5], в которой локальная калибровочная симметрия присутствует изначально и согласована со структурой расслоенного пространства (рис.2) (в дальнейшем не в ущерб общности рассматриваем лишь скалярные поля):

$$\begin{aligned} D_{nonlocal}(x, y; A) &= i \langle P(\Phi(x, A)\Phi^+(y, A)) \rangle = i \langle P(\phi(x) e^{ie \int_a^x A_\mu(\xi) d\xi^\mu} e^{-ie \int_a^y A_\rho(\xi) d\xi^\rho} \phi^+(y)) \rangle = \\ &= i \langle P(\phi(x) e^{ie \int_a^x A_\rho(\xi) d\xi^\rho} \phi^+(y)) \rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

которая описывает распространение одной и той же заряженной частицы из пространственно-временной точки x в 4-точку y , позволяет получить вершины взаимодействия калибровочного поля со скалярной частицей. Структура (3) инвариантна относительно $U(1)$ -группы локальных калибровочных преобразований: $\phi \rightarrow e^{-ie\alpha(x)}\phi$, $\phi^+ \rightarrow e^{ie\alpha(x)}\phi^+$, $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \alpha(x)$.

Разложение выражения (3) в функциональный ряд Тейлора и вычисление линейного по вектору-потенциалу ЭМ поля члена с учетом требования пространственно-временной однородности для “прямолинейного” пути интегрирования $\xi_\mu = (1-\lambda)x + \lambda y$, $\lambda \in [0, 1]$ в импульсном представлении определяет ЭМ вершину, согласованную с пропагаторами частицы до и после взаимодействия законом сохранения 4-импульса [3]

$$\frac{\delta D(x, y; A)}{\delta A_\mu(r)} \Big|_{A=0} A_\mu(r) \Rightarrow (2\pi)^4 \delta(p+q-p') e \varepsilon_\mu \int_0^1 d\lambda \frac{\partial D(p+\lambda q)}{\partial (p+\lambda q)_\mu} =$$

$$= (2\pi)^4 \delta(p+q-p') D(p+q) \left\{ -e \varepsilon_\mu (p+p')^\mu \right\} D(p) \quad (4)$$

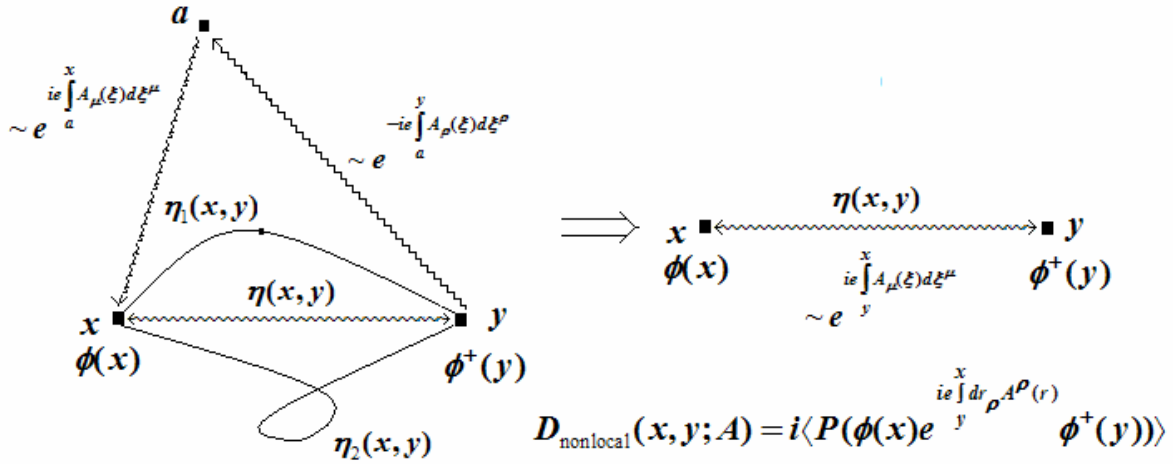


Рис. 2. Нелокальная ЭМ калибровочная струна

Замена вектора поляризации фотона ε_μ в (4) на его импульс q_μ приводит к тождеству Грина $D(p+q) - D(p) = -q_\mu D(p+q) \left\{ (p+p')^\mu \right\} D(p)$ или для обратных операторов получаем привычный вид тождества $D^{-1}(p+q) - D^{-1}(p) = q_\mu (p+p')^\mu$, которое в пределе $q \rightarrow 0$ определяет тождество Уорда $\frac{\partial}{\partial p_\mu} D^{-1}(p) = (p+p')^\mu$.

Аналогичные результаты получаются для фермионных полей. Нелокальный объект (3) в отличие от лагранжиана при локальном рассмотрении определяет не только ЭМ вершину как в КЭД, но согласует ее со свободными 2-х частичными ФГ до и после взаимодействия, которые являются решениями соответствующих динамических уравнений, полученных на основе свободных лагранжианов.

Вывод. Альтернативная формулировка КЭД на основе нелокальных калибровочно-инвариантных 2-х частичных ФГ (3), в которых корректно учтена структура конфигурационного пространства, воспроизводит результаты локальной квантовой теории для заряженных частиц с учетом их статистики.

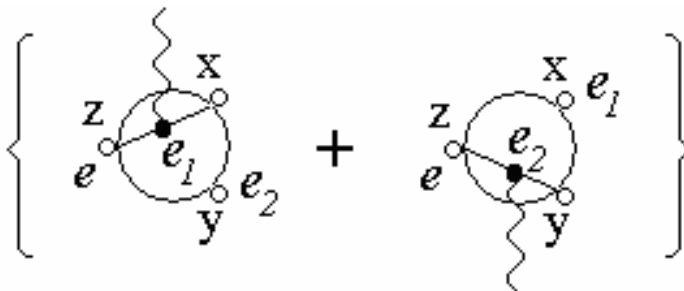
Нелокальная калибровочно-инвариантная 3-х точечная ФГ

Нелокальная сильно связанная 3-х точечная ФГ описывает, например, виртуальный переход нелокального поля $\phi(z)$ в состояние его фрагментов $\phi_1^+(x)$ и $\phi_2^+(y)$ в которой гейзенберговские полевые операторы согласованы со структурой конфигурационного пространства

$$G(x, y, z; \{A\}) = i \langle P(\phi(z) e^{ie_1 \int_x^z dr_\rho A^\rho(r)} \phi_1^+(x) e^{ie_2 \int_y^z dr_\sigma A^\sigma(r)} \phi_2^+(y)) \rangle. \quad (5)$$

Структура (5) инвариантна относительно преобразований $\phi(z) \rightarrow \phi(z) e^{-ie\alpha(z)}$, $\phi_1^+(x) \rightarrow \phi_1^+(x) e^{ie_1 \alpha(x)}$, $\phi_2^+(y) \rightarrow \phi_2^+(y) e^{ie_2 \alpha(y)}$, $A_\mu(r) \rightarrow A_\mu(r) + \partial_\mu \alpha(r)$ при условии $e = e_1 + e_2$

(в этом состоит связь закона сохранения заряда и обеспечения требования калибровочной инвариантности!). В импульсном представлении выражение (5) после выделения 2-х частичных ФГ – внешних концов определяет сильно связную вершинную часть (рис. 3).



$$G(x, y, z; \{A\}) = i \langle P(\phi(z) e^{i e_1 \int_x^z d\tau_\rho A^\rho(r)} \phi_1^+(x) e^{i e_2 \int_y^z d\tau_\sigma A^\sigma(r)} \phi_2^+(y)) \rangle$$

Рис. 3. Нелокальная сильно связная вершинная часть

В результате разложения (5) в функциональный ряд Тейлора и удержания линейных по зарядам членов разложения и перехода в импульсное представление определяет регулярную часть амплитуды [3] взаимодействия ЭМ поля с нелокальным скалярным полем $\phi(z)$ и его составляющими $\phi_1^+(z)$ и $\phi_2^+(z)$. Следует обратить внимание, что следствием принципа *индифферентности* сильное взаимодействие между фрагментами ни коим образом не препятствует выполнению требования калибровочной инвариантности структуры (5).

Проводя аналогичные действия с выражением (5) как при выводе выражения (4), получим

$$\left. \frac{\delta G(x, y, z; \{A\})}{\delta A_\mu(r)} \right|_{A=0} A_\mu(r) \Rightarrow, \tag{6}$$

$$M_{reg} = (2\pi)^4 \delta(p + q - p_1 - p_2) \varepsilon_\mu \int_0^1 d\lambda \left\{ e_1 \frac{\partial G(p_1 - \lambda q; p_2)}{\partial (p_1 - \lambda q)_\mu} + e_2 \frac{\partial G(p_1; p_2 - \lambda q)}{\partial (p_2 - \lambda q)_\mu} \right\}$$

где $G(p_1, p_2)$ - вершинная часть.

Определенные выше правила (4), (6) определяют обобщенную калибровочно-замкнутую амплитуду (рис. 4), в которой внешние концы – калибровочные 2-х точечные ФГ. Первые три диаграммы образуют традиционную полюсную часть, а оставшаяся диаграмма соответствует регулярной составляющей.

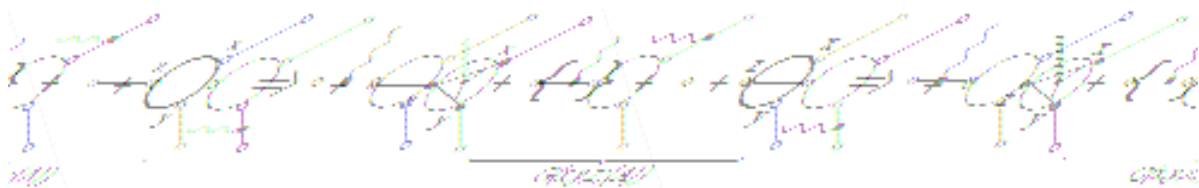


Рис. 4. Структура обобщенной калибровочно-замкнутой амплитуды



ЭМ поле при взаимодействии с нелокальной треххвосткой фиксирует заряд на каждой внешней линии и проверяет его сохранение внутри области нелокальности. Как известно из КЭД, все члены одного порядка квазиклассического разложения S -матрицы или производящего функционала для функции Грина образуют инвариантную совокупность диаграмм с теми же свойствами симметрии, которыми обладает S -матрица, т.е. все свойства симметрии S -матрицы выполняются независимо для данной совокупности диаграмм. В нашем рассмотрении возникает обратная картина – взаимодействие калибровочного поля с сильно связанным составным полем материи, где в дополнение к ЭМ присутствует сильное взаимодействие, происходит с неизвестным лагранжианом, а, следовательно, и S -матрицей. Однако, на этапе построения амплитуды – ряда диаграмм (рис. 4) с сильносвязной 3-х точечной ФГ, удастся обеспечить выполнение требования ковариантности и градиентной инвариантности, а, следовательно, амплитуда на уровне обобщенного, калибровочно-замкнутого полюсного ряда будет иметь те же свойства симметрии, что и амплитуда в КЭД, но уже в присутствии сильного взаимодействия.

Свойства обобщенной калибровочно-инвариантной амплитуды

Выведенные правила получения на основе, примененные к фоторасщеплению связанного скалярного поля на два скалярных фрагмента приводят к выражению для матричного элемента

$$M = e \cdot \varepsilon_\mu \cdot J^\mu, \quad e = \sqrt{4\pi\alpha}, \quad J^\mu = J_{pol}^\mu + J_{reg}^\mu, \quad (7)$$

$$J_{pol}^\mu = z_s \frac{(d+d')^\mu}{s-m_d^2} G_s + z_t \frac{(p+p')^\mu}{t-m^2} G_t + z_u \frac{(n+n')^\mu}{u-m^2} G_u, \quad J_{reg}^\mu = \frac{k^\mu}{kq} (z_t G_t + z_u G_u - z_s G_s),$$

где $\alpha = 1/137$, $z_{s,t,u}$ - заряды составного скалярного поля и его скалярных фрагментов в единицах e соответственно, k_μ – относительный пространственно-подобный

4-импульс pn -пары $k \equiv k_s = \frac{p-n}{2} \stackrel{c.u.u.}{=} (0; \mathbf{p})$. Выражению для полюсной части J_{pol}^μ

полного тока J^μ соответствуют первые три диаграммы на рис. 4, которые получены включением ЭМ поля во внешние линии треххвостки по правилу (4). Регулярная часть J_{reg}^μ полного тока получена за счет включения фотона в сильно связную вершинную

часть (последняя диаграмма на рис.4). Регулярная часть получена на основе (6), но для скалярного поля интеграл вычисляется. Окончательное выражение для матричного элемента (7) получено с применением редукционной техники, сводящейся к 2-х частичных ФГ, отвечающих внешним концам диаграмм на волновые функции скалярных частиц, которые в принятой нами нормировке равны 1. Вершинные функции $G_i \equiv G(-k_i^2)$, $i = [s, t, u]$ в каждой диаграмме зависят от квадрата соответствующего

канального относительного 4-импульса: $k_t = \frac{p'-n}{2} = k_s - \frac{q}{2}$, $k_u = \frac{p-n'}{2} = k_s + \frac{q}{2}$,

$q = (\omega; \mathbf{\omega})$, $q^2 = 0$ - 4-импульс фотона. Нетрудно убедиться в том, что полюсная часть нелокального тока не сохраняется: $q_\mu J_{pol}^\mu = z_s G_s - z_t G_t - z_u G_u \neq 0$, несмотря на то, что заряд сохраняется $z_s - z_t - z_u = 0$. Регулярная составляющая в полном токе исправляет эту ситуацию.

Для удобства будем считать связанное поле материи считать скалярным дей-

троном, состоящим из двух заряженных скалярных нуклонов или мезоном состоящим из двух кварков (также скалярных). Отметим ряд общих свойств амплитуды (7), которые сохраняются для процессов с участием частиц различных статистик. Во-первых, в случае, когда вершинная функция $G_i \equiv G(-k_i^2)$, $i = [s, t, u]$ отлична от константы, амплитуда определяется суммой полюсной и регулярной частей амплитуды, что указывает на неразрывную связь нуклон-ядерного уровня (полюсная часть) строения материи с формирующим его кварк-глюонным масштабом (регулярная составляющая) и согласованных между собой требованием сохранения полного нелокального тока. В противном случае регулярная часть амплитуды отсутствует и мы возвращаемся к традиционному для локальной КЭД рассмотрению.

Во-вторых, сохранение неизменного вида калибровочных преобразований, как для локальных, так и нелокальных взаимодействий, но ценой отказа от использования лагранжиана, приводит к тому, что вершинам сильного взаимодействия отведена роль свободных функциональных параметров. Для нелокальных полей сохранение свойства *универсальности* (минимальной формы взаимодействия как произведения тока на вектор-потенциал) ЭМ взаимодействий обеспечивается свойством *индифферентности* ЭМ сил по отношению к присутствию иных видов структуры образующих сил, известных в настоящее время. Это является следствием выражений (3, 5), в которых не конкретизируется вид структурообразующих сил. Иначе, согласованный учет калибровочной симметрии с законом сохранения 4-импульса обеспечил инвариантность вида обобщенной амплитуды относительно иерархической эволюции структуру образующих сил и составляющих нелокального поля материи и, не требующих дополнительно введения параметров типа фундаментальной длины. Этот момент определяет принципиальное отличие от существующих [6] нелокальных подходов к ЭМ взаимодействиям с участием нелокальных полей материи, в которых выполнение калибровочных свойств и закон сохранения заряда ставится в зависимость от параметра размера области нелокальности – фундаментальной длины, т.е. вида структурообразующего взаимодействия, но правда за счет сохранения рамок лагранжева описания. В предлагаемом подходе удастся отделить ЭМ аспект проблемы от структурной составляющей и выделить ее в независимое направление, связанное с поиском решений структуру образующих уравнений и затем их тестирования в ЭМ процессах.

Регулярная часть калибровочно-замкнутой амплитуды определяет величину динамического вклада электрических многочастичных механизмов в дополнение к одночастичным полюсным механизмам, строго согласованных между собой требованием калибровочной инвариантности.

Заключение

На основе развитого подхода авторами проведены исследования ЭМ ядерно-физических свойств легких атомных ядер ${}^2\text{H}$, ${}^3\text{H}$, ${}^3\text{He}$, ${}^4\text{He}$ в процессах фото- и электрорасщепления и получено подтверждение следующих общих свойств, обсуждаемых в работе.

На основе представлений о калибровочном поле как связности главного расслоения конфигурационного пространства и использования калибровочно-инвариантных структур – аналогов КХД – в терминах ЭМ “струны” (3) и “звезды” (5) впервые развита теория последовательного описания ЭМ взаимодействий, как с локальными, так и нелокальными заряженными полями материи – атомными ядрами, не ограниченная требованиями лагранжевого описания и свободная от введения дополнительных параметров. Важным следствием точного учета калибровочной симметрии в обобщенной калибровочно-замкнутой амплитуде является инвариантность ее вида относительно иерархической эволюции характера структурообразующих сил и составляющих нелокального поля материи.



Установлено, что последовательный учет структуры конфигурационного пространства как прямого произведения пространственно-временного многообразия и присоединенного пространства внутренних симметрий, в котором понятие о калибровочном поле как связности главного расслоения определяет правило согласования трансляций в базовом пространстве с их проекциями в присоединенном пространстве, позволяет согласовать в обобщенной амплитуде действия законов сохранения 4-импульса и заряда, что обеспечивает адекватное пространственно-временное описание перераспределения массы и заряда между нелокальным полем и его фрагментами не только на асимптотических in- и out- состояниях, но и в области структуру формирующих сил большой интенсивности и ограниченного радиуса действия.

Требование калибровочной инвариантности объединяет в обобщенной амплитуде полюсную и регулярную части. Универсальность ЭМ взаимодействий и ее обеспечивающее свойство индифферентности по отношению ко всем другим видам взаимодействий, известным в настоящее время, определяют роль сильной вершины как свободного функционального параметра. Общий характер этого положения определяет уникальные условия для нахождения динамической составляющей вершины сильного взаимодействия как решения соответствующих уравнений на различных иерархических масштабах строения материи с учетом доминирования тех или иных структурообразующих сил. Указанные свойства выявляют способность калибровочных полей фиксировать лишь закон распределения заряженных составляющих в области нелокальности или его изменение, как результат доминирования уже иных видов взаимодействия и коллективных возбуждений при переходе в другой структурный уровень, не выявляя при этом деталей таких изменений.

Основываясь на нуклонных представлениях строения атомных ядер в ЭМ процессах установлено, что регулярная часть обобщенной полюсной амплитуды учитывает динамическое отличие в поведении ядерной нуклонной волновой функции на малых расстояниях от асимптотики Юкавы, что эквивалентно отличию ядерной вершинной функции от константы. В случае, когда динамическая составляющая ядерной вершинной функции является константой, регулярная составляющая полной амплитуды обращается в нуль, что обеспечивает непрерывность перехода от нелокального рассмотрения к локальному КЕД пределу. Регулярная часть калибровочно-замкнутой амплитуды определяет величину динамического вклада электрических многочастичных механизмов в дополнение к одночастичным полюсным, которые строго согласованы между собой требованием калибровочной инвариантности.

Показано, что в результате сохранения заряда в вершине сильного взаимодействия, вклад регулярной части в амплитуду пропорциональный производным от ядерной вершинной функции; с формальной точки зрения регулярная часть вносит в амплитуду дополнительную зависимость от ядерной вершины, которая учитывает ее "скорость" изменения и характер поведения кривой; с физической точки зрения всякая ядерная вершина персонифицированным образом отображает индивидуальные свойства ядерного NN потенциала как остаточного взаимодействия в результате адронизации и свертывания цветовых (кварк-глюонных) степеней свободы и, которые через ядерную вершину эффективно учитываются в калибровочно-замкнутой полюсной амплитуде. Экспериментальные измерения вклада регулярных частей амплитуды позволят получить дополнительную информацию о природе ядерных сил.

Авторы считают приятным долгом выразить благодарность В.И. Ткачу за полезные обсуждения и замечания.

Литература

1. Боголюбов Н.Н., Логунов А.А., Оксак А.И., Тодоров И.Т. Общие принципы квантовой теории поля. М.: Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987, 616 с.

2. Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М.: Наука, 1988, 272 с.
3. Касаткин Ю.А. Локальная $U(1)$ -калибровочная инвариантность и фоторасщепление сильносвязанных систем. Письма в ЭЧАЯ, 2004, т.1, №5(122), с. 30–49.
4. Касаткин Ю.А., Кириченко И.К. Теоретико-полевой подход к расщеплению связанных систем на основе локальной калибровочной природы электромагнитного поля. ЯФ, 2004, т. 67, №4, с. 748-763.
5. Касаткин Ю.А. Возможность единого описания локальных и нелокальных электромагнитных взаимодействий. Вісник Харківського універс. сер. фізична “Ядра, частини, поля”, 2008, вып.2/38/, №808, с. 61-67.
6. Ефимов Г.В. Проблемы квантовой теории нелокальных взаимодействий. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1985, 216 с.

BASIC POSITIONS OF THE CONCERTED APPROACH OF NONLOCAL INTERACTIONS IN QED

Yu.A. Kasatkin¹⁾, I.K. Kirichenko²⁾

¹⁾Institute of Electrophysics & Radiation Technologies,
61002, Kharkov, Chernyshevsky St, 28, p.o.box 8812, Ukraine,
YuKasatkin2007@yandex.ru

²⁾Ukraine Engineering & Pedagogical Academy, 61003, Kharkov, University St., 16, Ukraine

Alternative approach of inclusion of the electromagnetic field in QED is offered, passing the stage of receipt of Lagrangian. Advantage of such approach is that possibility is opened it is adequate to enter in consideration the charged local and nonlocal fields of matter based on general principles. Make the basis of consideration nonlocal 2- and 3- the partial Green's functions, in which the field operators of particles are concerted with the structure of configuration space. The generalized gauge-invariant amplitude which actions of laws of conservations of a 4- momentum and charge are conserved in is got.

Key words: electromagnetic fields, Lagrangian, local and nonlocal fields, Green's functions.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНЕГО ПЕРЕМЕННОГО ПОЛЯ НА ДИНАМИКУ ОДНООСНЫХ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

М.Ю. Ковалевский¹⁾, Л.В. Логвинова¹⁾, В.Т. Мацкевич²⁾, А.Н. Швец³⁾

¹⁾ Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14,

²⁾ ННЦ Харьковский физико-технический институт, 61108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

³⁾ Харьковский национальный университет им. Каразина, 61077, Харьков, Свободы 4
mikov@kharkov.ua

Получены динамические уравнения одноосных нематических жидких кристаллов с молекулами стержне- и дископодобной формы во внешнем переменном поле. Вычислены низкочастотные асимптотики двухвременных функций Грина одноосных нематиков. Выяснено, что их структура существенно зависит от характера пространственной анизотропии рассматриваемой конденсированной среды и формы молекул. Исследованы поляризационные особенности акустических волн одноосных нематиков. Показано, что первый и второй звуки являются суперпозицией продольной и поперечной компонент. Установлено отношение амплитуд этих компонент как функции угла между волновым вектором и осью анизотропии.

Ключевые слова: гамильтонов подход, скобки Пуассона, одноосный нематик, низкочастотные асимптотики функций Грина, поляризации.

Введение

В настоящее время большой интерес вызывает изучение жидкокристаллических сред. Такие конденсированные состояния обладают свойством жидкости – текучестью и анизотропией – свойством, характерным для твердого тела [1-4]. Общими их особенностями являются наличие внутренней структуры мезоскопических или наноскопических размеров, которые проявляются на макроуровне в виде определенных физических явлений и процессов. Основным признаком жидких кристаллов является наличие макроскопического ориентационного упорядочения, обусловленного анизотропией молекул. Физической величиной, которая отражает эту особенность для одноосных нематических жидких кристаллов, является единичный вектор пространственной анизотропии (директор) [5-9]. Эта величина становится дополнительным макроскопическим параметром, существенным при формулировке второго начала термодинамики и получении уравнений динамики. Ранее рассматривались также более общие схемы динамического поведения жидких кристаллов, которые учитывают вид параметра порядка [10-12] и форму структурных элементов среды [13-15].

Математической основой нашего исследования выбран гамильтонов подход, являющийся эффективным методом получения и исследования нелинейных динамических уравнений, описывающих явления переноса в различных конденсированных средах. Ключевым в таком подходе является установление явного вида скобок Пуассона для всего набора параметров сокращенного описания. Следует иметь в виду, что, в отличие от параметров сокращенного описания, связанных со свойствами симметрии гамильтониана, для которых скобки Пуассона хорошо известны (см. [2,8]), скобки Пуассона для дополнительных динамических параметров, отражающих особенности формы и размера молекул, имеют нетривиальную структуру и их нахождение представляет собой основную проблему. Для ее решения использована идея представления всех дополнительных параметров сокращенного описания в терминах тензора дисторсии [8], которая была ранее реализована в этих работах для одноосных нематиков без учета деформации молекул.

1. Гамильтонова механика сплошных сред

В соответствии с общим подходом механики сплошных сред структура лагранжиана произвольной физической системы представима в виде [8]:

$$L = L_k(\varphi, \dot{\varphi}) - H(\varphi) = \int d^3x F_\alpha(\mathbf{x}, \varphi(\mathbf{x}')) \dot{\varphi}_\alpha(\mathbf{x}) - H(\varphi),$$

где $L_k(\varphi, \dot{\varphi})$ – кинематическая часть лагранжиана, $H(\varphi) = \int d^3x \varepsilon(\mathbf{x}, \varphi)$ – гамильтониан системы. Плотность энергии среды $\varepsilon(\mathbf{x}, \varphi(\mathbf{x}'))$ и величины $F_\alpha(\mathbf{x}, \varphi(\mathbf{x}'))$ – некоторые определенные функционалы динамических переменных $\varphi_\alpha(\mathbf{x})$. Величины $\varphi_\alpha(\mathbf{x})$ макроскопически полно задают термодинамику и описывают динамические процессы неравновесных состояний. Из принципа стационарного действия следуют уравнения движения для величин $\varphi_\alpha(\mathbf{x})$:

$$\dot{\varphi}_\alpha(\mathbf{x}) = \int d^3x' J_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \varphi) \frac{\delta H(\varphi)}{\delta \varphi_\beta(\mathbf{x}')} \equiv \{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), H\}. \quad (1.1)$$

Матрица $J_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \varphi)$ определяется равенством

$$J_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \varphi) \equiv \frac{\delta F_\beta(\mathbf{x}'; \varphi)}{\delta \varphi_\alpha(\mathbf{x})} - \frac{\delta F_\alpha(\mathbf{x}; \varphi)}{\delta \varphi_\beta(\mathbf{x}')} \quad (1.2)$$

и связана со скобкой Пуассона величин $\varphi_\alpha(\mathbf{x})$ соотношением

$$\{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), \varphi_\beta(\mathbf{x}')\} = J_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \varphi).$$

Учитывая определение (1.2), эти скобки антисимметричны относительно перестановки $\alpha \leftrightarrow \beta$, $\mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{x}'$ и удовлетворяют тождествам Лейбница и Якоби

$$\begin{aligned} \{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), \varphi_\beta(\mathbf{x}')\} &= -\{\varphi_\beta(\mathbf{x}'), \varphi_\alpha(\mathbf{x})\}, \\ \{\varphi_\alpha(\mathbf{x})\varphi_\beta(\mathbf{x}'), \varphi_\gamma(\mathbf{x}'')\} &= \varphi_\alpha(\mathbf{x})\{\varphi_\beta(\mathbf{x}'), \varphi_\gamma(\mathbf{x}'')\} + \varphi_\beta(\mathbf{x}')\{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), \varphi_\gamma(\mathbf{x}'')\}, \\ \{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), \{\varphi_\beta(\mathbf{x}'), \varphi_\gamma(\mathbf{x}'')\}\} &+ \{\varphi_\beta(\mathbf{x}'), \{\varphi_\gamma(\mathbf{x}''), \varphi_\alpha(\mathbf{x})\}\} + \{\varphi_\gamma(\mathbf{x}''), \{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), \varphi_\beta(\mathbf{x}')\}\} = 0. \end{aligned}$$

Определим скобки Пуассона произвольных функционалов $A(\varphi), B(\varphi)$ равенством

$$\{A, B\} \equiv \int d^3x \int d^3x' \frac{\delta A}{\delta \varphi_\alpha(\mathbf{x})} J_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \frac{\delta B}{\delta \varphi_\beta(\mathbf{x}')}.$$

В набор параметров сокращенного описания для классических сплошных сред входят плотности импульса $\pi_k(\mathbf{x})$, энтропии $\sigma(\mathbf{x})$ и вектор смещения $u_i(\mathbf{x})$: $\varphi_\alpha \equiv \{\pi_k(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}), u_i(\mathbf{x})\}$. Вектор смещения $u_i(\mathbf{x})$ связывает лагранжеву координату ξ_k с эйлеровой координатой x_k : $x_k \equiv \xi_k + u_k(\mathbf{x})$. Тензор дисторсии определим равенством

$$b_{ki}(\mathbf{x}) = \nabla_i \xi_k(\mathbf{x}) \equiv \delta_{ik} - \nabla_i u_k(\mathbf{x}). \quad (1.3)$$

где δ_{ik} – символ Кронекера. Тензор дисторсии $b_{ki}(\mathbf{x})$ играет фундаментальную роль при описании деформаций сплошных сред. Он задает ориентационные и трансляционные состояния равновесия, устанавливает основные геометрические характеристики среды и определяет группу движений неравновесного состояния для твердого тела, жидкостей и жидких кристаллов. Введем в рассмотрение плотность массы вещества сплошной среды $\rho(\mathbf{x}) = mn(\mathbf{x})$, где m – масса частицы и $n(\mathbf{x})$ – плотность числа частиц. Плотность массы вещества $\rho(\mathbf{x})$ связана с тензором дисторсии $b_{ki}(\mathbf{x})$ равенством:

$$\rho(\mathbf{x}) = \underline{\rho} \det|b_{ij}(\mathbf{x})|, \quad (1.4)$$

где ρ – плотность массы вещества в недеформированном состоянии. Известно, что нетривиальные скобки Пуассона для плотностей импульса, энтропии и вектора смещения имеют вид [2,8]:

$$\{\pi_i(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}')\} = -\sigma(\mathbf{x}) \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \{u_i(\mathbf{x}), \pi_k(\mathbf{x}')\} = b_{ik}(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (1.5)$$

$$\{\pi_i(\mathbf{x}), \pi_j(\mathbf{x}')\} = \pi_j(\mathbf{x}) \nabla'_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \pi_i(\mathbf{x}') \nabla_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

Величина $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ представляет собой δ -функцию Дирака. Следствием этих формул и определений (1.3), (1.4) являются скобки Пуассона для плотности импульса с тензором дисторсии и плотностью числа частиц

$$\{\pi_i(\mathbf{x}), b_{kj}(\mathbf{x}')\} = -b_{ki}(\mathbf{x}) \nabla_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \{\pi_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} = \rho(\mathbf{x}) \nabla'_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.6)$$

Выписанные скобки Пуассона (1.5), (1.6) служат основой построения нелинейных уравнений динамики классических сплошных сред. Различные особенности динамического описания жидких кристаллов в рамках гамильтонова подхода проявляются в разной зависимости плотности энергии от тензора дисторсии.

Рассмотрим бесструктурную конденсированную среду, которая описывается пятью аддитивными интегралами движения $\gamma_a \equiv H, P_k, N$, $\{H, \gamma_a\} = 0$. Здесь $P_k = \int d^3x \pi_k(\mathbf{x})$ – импульс системы, $N = \int d^3x n(\mathbf{x})$ – число частиц системы. Свойство инвариантности гамильтониана сплошной среды относительно поворотов в пространстве имеет вид

$$\{L_i, \varepsilon(\mathbf{x})\} = \varepsilon_{ikl} x_k \nabla_l \varepsilon(\mathbf{x}), \quad L_i = \int d^3x \varepsilon_{ikl} x_k \pi_l(\mathbf{x}), \quad (1.7)$$

где L_i – орбитальный момент. Для плотности энергии также справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \{P_i, \varepsilon(\mathbf{x})\} &= \nabla_i \varepsilon(\mathbf{x}), & P_i &= \int d^3x \pi_i(\mathbf{x}), \\ \{M, \varepsilon(\mathbf{x})\} &= 0, & M &= \int d^3x \rho(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.8)$$

отражающие фазовую и трансляционную инвариантность гамильтониана рассматриваемой конденсированной среды. Свойства симметрии плотности энергии позволяют получить дифференциальные уравнения движения для плотностей аддитивных интегралов движения

$$\dot{\zeta}_a(\mathbf{x}) = -\nabla_k \zeta_{ak}(\mathbf{x}), \quad (1.9)$$

здесь $\zeta_a(\mathbf{x}) \equiv \varepsilon(\mathbf{x}), \pi_k(\mathbf{x}), n(\mathbf{x})$ – плотности аддитивных интегралов движения. В правые стороны уравнений (1.9) входят величины $\zeta_{ak}(\mathbf{x}) \equiv q_k(\mathbf{x}), t_{ik}(\mathbf{x}), j_k(\mathbf{x})$, являющиеся плотностями потоков аддитивных интегралов движения: $\zeta_{0k}(\mathbf{x}) \equiv q_k(\mathbf{x})$ – плотность потока энергии, $\zeta_{ik}(\mathbf{x}) \equiv t_{ik}(\mathbf{x})$ – плотность потока импульса, $\zeta_{4k}(\mathbf{x}) \equiv j_k(\mathbf{x})$ – плотность потока числа частиц. В терминах скобок Пуассона от плотностей аддитивных интегралов движения в работе известны выражения для этих плотностей потоков [8]

$$\begin{aligned} j_k(\mathbf{x}) &= \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{n(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{x}'), \varepsilon(\mathbf{x} - (1 - \lambda)\mathbf{x}')\}, \\ t_{ik}(\mathbf{x}) &= -\varepsilon(\mathbf{x}) \delta_{ik} + \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{\pi_i(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{x}'), \varepsilon(\mathbf{x} - (1 - \lambda)\mathbf{x}')\}, \\ q_k(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} \int d^3x' x'_k \int_0^1 d\lambda \{\varepsilon(\mathbf{x} + \lambda \mathbf{x}'), \varepsilon(\mathbf{x} - (1 - \lambda)\mathbf{x}')\}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Далее мы всюду полагаем, что гамильтониан системы $H = H_0 + V(\sigma(\mathbf{x}'), \rho(\mathbf{x}'), b_{ij}(\mathbf{x}'))$ обладает свойством галилеевской инвариантности и имеет вид

$$H_0 = \int d^3x \frac{\pi^2(\mathbf{x})}{2\rho(\mathbf{x})}, \quad V = \int d^3x' \Phi(\rho(\mathbf{x}'), \sigma(\mathbf{x}'), b_{ij}(\mathbf{x}')).$$

Для галилеево-инвариантных сред плотность потока массы совпадает с плотностью потока импульса $m j_k(\mathbf{x}) = \pi_k(\mathbf{x})$.

В случае бесструктурной конденсированной среды гамильтониан является функционалом набора гидродинамических параметров, к которым относятся плотность энтропии, плотность импульса и плотность массы $H = H(\sigma(\mathbf{x}'), \pi_i(\mathbf{x}'), \rho(\mathbf{x}'))$. Отсюда следует, что для дифференциала плотности энергии справедливо соотношение

$$d\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} d\sigma + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i} d\pi_i + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} d\rho \equiv T d\sigma + v_k d\pi_k + \mu d\rho.$$

Здесь T – температура, v_k – макроскопическая скорость, μ – химический потенциал, которые связаны с термодинамическими силами Y_a равенствами

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} = \frac{1}{Y_0} \equiv T, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} = -\frac{Y_k}{Y_0} \equiv v_k, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} = -\frac{Y_4}{Y_0} \equiv \mu.$$

Введем в рассмотрение плотность термодинамического потенциала $\omega(Y_a) \equiv Y_a \zeta_a - \sigma$. Термодинамические силы Y_a связаны с плотностями аддитивных интегралов движения соотношениями

$$\partial \omega / \partial Y_a = \zeta_a. \quad (1.11)$$

Используя представление плотностей потоков (1.10) и формулы (1.5), (1.6), найдем выражения плотностей потоков аддитивных интегралов движения в терминах термодинамического потенциала

$$\zeta_{ak} = -\frac{\partial}{\partial Y_a} \left(\frac{\omega Y_k}{Y_0} \right). \quad (1.12)$$

Соотношения (1.11) и (1.12) показывают, что плотности аддитивных интегралов движения и соответствующие им потоки представлены в терминах плотности термодинамического потенциала и тем самым замыкают уравнения (1.9), приводя к уравнениям идеальной гидродинамики Эйлера. Линеаризация уравнений (1.9)(1.12) ведет к акустическому спектру

$$\omega^2 = \mathbf{k}^2 c^2, \quad c = \sqrt{\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_s}, \quad (1.13)$$

здесь \mathbf{k} – волновой вектор, c – скорость звука, P – давление и $s \equiv \sigma / \rho$ – плотность энтропии единицы массы. Этот спектр линеен и изотропен.

2. Динамика одноосных нематиков с молекулами стержнеподобной формы во внешнем переменном поле

Значительная часть жидких кристаллов состоит из молекул стержнеподобной формы. В нематической фазе жидких кристаллов наряду с динамическими переменными, описывающими состояние изотропной жидкости – плотностями массы, импульса и энтропии, вводят в рассмотрение дополнительный параметр – единичный вектор пространственной анизотропии (директор) $\mathbf{n}(\mathbf{x})$, связанный с нарушением вращательной симметрии. В работе [8] показано, что этот вектор анизотропии может быть представлен в терминах тензора дисторсии $b_{ij}(\mathbf{x})$. При этом существуют две возможности. Одна из них соответствует нематику с молекулами стержнеобразной формы, другая – нематику с дискообразными молекулами. Рассмотрим частицы среды, состоящие из молекул стержнеобразной формы (нематики каламитного типа). В недеформированном состоянии можно задать некоторое семейство линий, касательные к которым в каждой точке совпадают с направлением стержней. Пусть $\xi_i = \xi_i(\alpha)$ – параметрические уравнения одной из линий этого семейства. Направление стержней в каждой точке характеризуется вектором с координатами $l_i \equiv d\xi_i / d\alpha$. Этот вектор описывает ориентационный и конформационный порядок недеформированного жидкого кристалла и имеет смысл лагранжевой переменной. Модуль этого вектора $l \equiv \sqrt{l_i^2}$ задает длину стержнеподобной молекулы в недеформированном состоянии. Единичный вектор $\underline{n}_i \equiv l_i / l$ определяет направление оси анизотропии молекулы в недеформированном состоянии. При деформации среды линии семейства также деформируются, происходит изменение направления оси анизотропии и длины стержня. Пусть $x_i = x_i(\alpha)$ – новые параметрические уравнения уже рассмотренной линии семейства после деформации, которые характеризуются вектором $l_i(\mathbf{x}) = dx_i / d\alpha$. Легко видеть, что векторы l_i и $l_i(\mathbf{x})$ связаны соотношением

$$l_i(\mathbf{x}) = b_{ij}^{-1}(\mathbf{x}) l_j. \quad (2.1)$$

Введем единичный вектор и модуль деформированного вектора $l_i(\mathbf{x})$ для произвольного деформированного состояния

$$n_i(\mathbf{x}) = l_i(\mathbf{x}) / l(\mathbf{x}), \quad l(\mathbf{x}) \equiv (l_i^2(\mathbf{x}))^{1/2}. \quad (2.2)$$

Используя скобку Пуассона (1.8), легко найти скобки Пуассона для величин $\pi_i(\mathbf{x})$ и $n_j(\mathbf{x}')$:

$$\begin{aligned} \{\pi_\lambda(\mathbf{x}), n_j(\mathbf{x}')\} &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_\lambda n_j(\mathbf{x}) - \delta_{\lambda j}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x}')) n_k(\mathbf{x}') \nabla'_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \delta_{ij}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x})) &\equiv \delta_{ij} - n_i(\mathbf{x}) n_j(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

В изучаемой среде возможно введение упругой (конформационной) степени свободы путем включения в набор параметров сокращенного описания дополнительной переменной – модуля вектора $l(\mathbf{x}) = |\mathbf{l}(\mathbf{x})|$ (2.2). В процессе эволюции неравновесного состояния вследствие упругих деформаций длина структурного элемента изменяется. В соответствии с этим определением и учитывая связь деформированного и недеформированного векторов (2.1), получим скобку Пуассона для величин $\pi_i(\mathbf{x})$ и $l(\mathbf{x}')$:

$$\{\pi_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_i l(\mathbf{x}) + l(\mathbf{x}') \delta_{i\lambda}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x}')) \nabla'_\lambda \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (2.4)$$

Скобки Пуассона (1.5), (1.6) совместно с (2.3), (2.4) образуют замкнутую алгебру динамических переменных нематика со стержнеподобными молекулами при наличии

конформационной степени свободы и позволяют получить нелинейные уравнения динамики в адиабатическом приближении. В соответствии с введенным набором гидродинамических параметров, плотность энергии является функцией параметров $\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon(\rho(\mathbf{x}), \pi_i(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), \nabla n_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x}))$. В рассматриваемой конденсированной среде плотность термодинамического потенциала $\omega = \omega(Y, \mathbf{n}, \nabla \mathbf{n}, l)$ зависит теперь также от оси анизотропии и конформационного параметра. Поэтому

$$d\omega = \zeta_a dY_a + \frac{\partial \omega}{\partial n_i} dn_i + \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_i} d\nabla_j n_i + \frac{\partial \omega}{\partial l} dl. \quad (2.5)$$

Обратимся теперь к нахождению плотностей потоков аддитивных интегралов движения. Можно показать, что плотности потоков аддитивных интегралов движения приобретут вид в терминах термодинамического потенциала:

$$\zeta_{ak} = -\frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{\omega Y_k}{Y_0} + \left[\frac{\partial \omega}{\partial \nabla_k n_j} \nabla_i n_j - n_k \delta_{i\lambda}^\perp(\mathbf{n}) \left(\frac{\partial \omega}{\partial n_\lambda} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_\lambda} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial l} l \delta_{ik}^\perp(\mathbf{n}) \right] \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{Y_i}{Y_0}. \quad (2.6)$$

В этой формуле первое слагаемое в правой части представляет собой вклад в плотность потока аддитивных интегралов движения, который аналогичен плотности потока в изотропной фазе конденсированной среды. Второе слагаемое в правой части представляет собой вклад в плотность потока аддитивных интегралов движения, обусловленный деформацией оси анизотропии и длины молекулы. Формулы (2.5), (2.6) позволяют сформулировать замкнутые уравнения гидродинамического типа для рассматриваемой конденсированной среды. Для различного рода приложений часто удобно использовать модельное выражение плотности энергии взаимодействия в виде

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_0(\rho(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}), l(\mathbf{x})) + \varepsilon_f(\rho(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), \nabla n_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x})),$$

$$\text{где } \varepsilon_f(\rho(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), \nabla n_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x})) = \frac{1}{2} K_{ijkl}(\rho, \sigma) \nabla_j n_i \nabla_l n_k + \frac{1}{2} M(\rho, \sigma) (l(\mathbf{x}) - l)^2 \quad (2.7)$$

– энергия Франка и K_{ijkl} – тензор модулей упругости, который, в силу свойств симметрии плотности энергии $\varepsilon_f(\mathbf{n}) = \varepsilon_f(-\mathbf{n})$, упрощается и приобретает вид [9]

$$K_{ijkl}(\rho, \sigma) \equiv K_1(\rho, \sigma) \delta_{ij}^\perp(\mathbf{n}) \delta_{kl}^\perp(\mathbf{n}) + K_2(\rho, \sigma) [\delta_{jl}^\perp(\mathbf{n}) \delta_{ik}^\perp(\mathbf{n}) - \delta_{jk}^\perp(\mathbf{n}) \delta_{il}^\perp(\mathbf{n})] + K_3(\rho, \sigma) n_j n_l \delta_{ik}^\perp(\mathbf{n}),$$

здесь $K_1(\rho, \sigma), K_2(\rho, \sigma), K_3(\rho, \sigma)$ – модули упругости Франка, которые являются функциями плотности массы и энтропии. Величина $M(\rho, \sigma)$ является модулем упругости, связанным с деформацией длины стержнеподобной молекулы и l – длина молекулы в состоянии равновесия. Для устойчивости однородного состояния равновесия требуется, чтобы $\varepsilon_f > 0$. Отсюда получим соотношения $K_1 > 0, K_2 > 0, K_3 > 0, M > 0$.

Обращаясь к формулам (1.1), (2.3), найдем уравнение движения для единичного вектора $\mathbf{n}(\mathbf{x})$

$$\dot{n}_j(\mathbf{x}) = -v_s(\mathbf{x}) \nabla_s n_j(\mathbf{x}) + \delta_{ij}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x})) n_\lambda(\mathbf{x}) \nabla_\lambda v_i(\mathbf{x}). \quad (2.8)$$

Аналогичным образом получим уравнение движения для конформационной степени свободы $l(\mathbf{x})$

$$\dot{l}(\mathbf{x}) = -v_s(\mathbf{x}) \nabla_s l(\mathbf{x}) - l(\mathbf{x}) \delta_{ij}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x})) \nabla_j v_i(\mathbf{x}). \quad (2.9)$$



Формулы (1.9), (2.6), (2.8), (2.9) представляют собой полный набор уравнений идеальной гидродинамики одноосного нематика, состоящего из стержнеподобных молекул с учетом деформаций молекулы среды.

Исследуем спектры коллективных возбуждений на основе полученных уравнений одноосного нематика с молекулами стержнеподобной формы. Полагаем, что состояние равновесия такой среды однородно и среда как целое покоится: $\pi_k = v_k = 0$. Кроме того, учтем, что выражение для энергии является четной функцией вектора \mathbf{n} : $\varepsilon(\mathbf{n}) = \varepsilon(-\mathbf{n})$ и, в соответствии с видом энергии Франка (2.7), энергия в простейшем случае является квадратичной функцией по градиентам этого вектора. Учтем также, что в недеформированном состоянии при $l = l_0$ реализуется минимум плотности энергии ε : $(\partial\varepsilon/\partial l)_{l=l_0} = 0$, $(\partial^2\varepsilon/\partial l^2)_{l=l_0} > 0$. Кроме того, слагаемое $\partial^2\varepsilon/\partial l\partial\mathbf{n}$ полагалось малым по сравнению с $\partial^2\varepsilon/\partial l^2$. В результате приходим к системе линейных и однородных уравнений

$$D_{ij}(\mathbf{k}, \omega)\delta v_j(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (2.10)$$

$$D_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = \omega^2\delta_{ij} - k_i k_j \frac{\partial P}{\partial \rho} - T_i(\mathbf{k})T_j(\mathbf{k}),$$

где величина $T_i(\mathbf{k})$ определяется равенством: $T_i(\mathbf{k}) \equiv c\sqrt{\lambda}\delta_{ii}^+(\mathbf{n})k_i$, безразмерная величина $\lambda \equiv \frac{l^2}{\rho c^2} \frac{\partial^2\varepsilon}{\partial l^2} > 0$ представляет собой отношение упругой энергии деформации

стержня к кинетической энергии, c – скорость акустических волн в изотропной фазе (1.13). Уравнения (2.10) имеют нетривиальное решение при обращении в нуль детерминанта

$$\det\left[\omega^2\delta_{ij} - k_i k_j c^2 - T_i(\mathbf{k})T_j(\mathbf{k})\right] = \omega^6 + \omega^4 I_4 + \omega^2 I_2 = 0. \quad (2.11)$$

Здесь

$$I_4 = -\mathbf{k}^2 c^2 - c^2 \lambda (\mathbf{k}^2 - (\mathbf{kn})^2) < 0, \quad I_2 = c^4 \lambda (\mathbf{k}^2 - (\mathbf{kn})^2) (\mathbf{kn})^2 > 0.$$

Таким образом, видим, что в одноосном нематике каламитного типа в бездиссипативном приближении существует решение $\omega = 0$ и возможно распространение двух акустических ветвей колебаний $\omega_{\pm}^2(\mathbf{k}) = c_{\pm}^2(\mathbf{k}/k)\mathbf{k}^2$, соответствующих первому и второму звуку. Решение со знаком (+) отвечает ветви, аналогичной первому звуку, который имеется и в изотропной жидкости. Решение со знаком (-) представляет собой новую ветвь возбуждений, обусловленную учетом конформационного фактора жидкого кристалла – длины стержнеподобной молекулы. В сферической системе координат $\mathbf{kn} = k \cos \theta$, где θ – полярный угол, задающий направление волнового вектора \mathbf{k} . В терминах этого угла скорости c_{\pm} имеют вид [16]

$$c_{\pm}(\theta) = \frac{c}{\sqrt{2}} \left\{ 1 + \lambda \sin^2 \theta \pm \left[(1 + \lambda \sin^2 \theta)^2 - \lambda \sin^2 2\theta \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (2.12)$$

Компьютерная графика раскрывает характер анизотропии спектров (2.12) (см. Рис. 2.1 (а, б), на которых фронт распространения волн приведен в виде среза вдоль оси пространственной анизотропии).

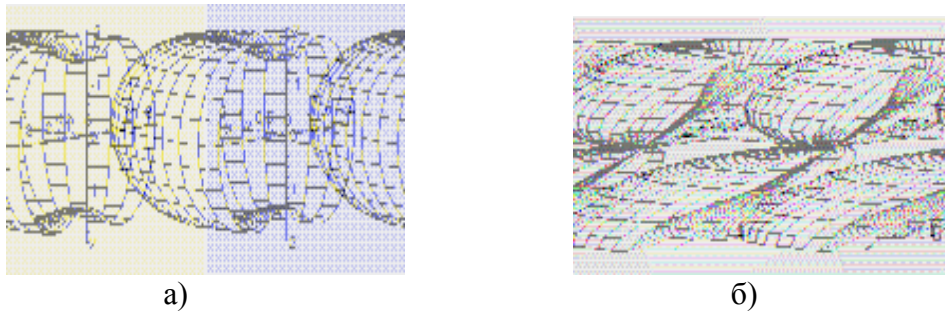


Рис. 2.1. а), б) Зависимость скоростей c_{\pm} от полярного угла при $\lambda = 1$

Увеличение параметра λ приводит к определенному уменьшению скорости c_{+} вблизи значений полярного угла $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. Для звука c_{-} изменение термодинамического параметра λ не приводит к качественному изменению вида фронта распространения этого звука. Расчетные угловые значения точек экстремума ($\theta = \pi/4$) для скорости звука c_{-} совпадают с данными выполненных экспериментов для этого звука [17,18]. Выпишем выражения скоростей звуков c_{\pm} в области малых значений параметра $\lambda \ll 1$:

$$c_{+} \approx c \left(1 + \frac{\lambda}{2} \sin^4 \theta \right), \quad c_{-} \approx \frac{c}{2} \sqrt{\lambda} |\sin 2\theta|. \quad (2.13)$$

Малая добавка в скорости первого звука приводит к слабой его анизотропии. Скорость второго звука существенно анизотропная и при стремлении параметра $\lambda \rightarrow 0$ исчезает: $c_{-} \rightarrow 0$. В этой области значений параметра легко проанализировать на экстремум выражения для скоростей первого и второго звуков (2.13). Для первого звука получим $\min c_{+} = c$ при $\theta_0 = 0, \pi$ и $\max c_{+} = c(1 + \lambda/2)$ при $\theta_0 = \pi/2$. Аналогично для второго звука имеем $\min c_{-} = 0$ при $\theta_0 = 0; \pi/2; \pi$ и $\max c_{-} = c\sqrt{\lambda}/2$ при $\theta_0 = \pi/4; 3\pi/4$.

Исследуем поляризационную структуру полученных акустических спектров. Рассмотрим решение для вектора $\delta v_j^{(0)}(\mathbf{k})$, соответствующее моде $\omega = 0$. Для этого разложим этот вектор по тройке ортогональных векторов

$$\delta v_j^{(0)}(\mathbf{k}) = k_j \delta v_{\parallel}^{(0)}(\mathbf{k}) + [\mathbf{k} \times \mathbf{n}]_j \delta v_{1\perp}^{(0)}(\mathbf{k}) + \frac{[[\mathbf{k} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{k}]_j}{k} \delta v_{2\perp}^{(0)}(\mathbf{k}). \quad (2.14)$$

Учитывая явный вид вектора $T_i(\mathbf{k})$ и формулу (2.10), видим, что в этом случае $\delta v_{\parallel}^{(0)} = \delta v_{2\perp}^{(0)} = 0$, и, следовательно, вектор $\delta v_j^{(0)}(\mathbf{k}) = [\mathbf{k} \times \mathbf{n}]_j \delta v_{1\perp}^{(0)}(\mathbf{k})$ представляет собой поперечно поляризованный звук с нечетной поляризацией по волновому вектору $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$.

Рассмотрим теперь решения уравнения (2.10), соответствующие модам $\omega = kc_{\pm}$. Выражение $\delta v_j^{(\pm)}(\mathbf{k})$ ищем в виде, аналогичном (2.14). Из (2.10) найдем, что $\delta v_{1\perp}^{(\pm)}(\mathbf{k}) = 0$. Откуда

$$\delta v_j^{(\pm)}(\mathbf{k}) = k_j \delta v_{\parallel}^{(\pm)}(\mathbf{k}) + \frac{[[\mathbf{k} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{k}]_j}{k} \delta v_{2\perp}^{(\pm)}(\mathbf{k}).$$

Эти решения, соответствующие первому и второму звукам, являются суперпозицией продольной и поперечной компонент, причем связь этих амплитуд колебаний имеет вид



$$\frac{\delta v_{2\perp}^{(\pm)}(\mathbf{k})}{\delta v_{\parallel}^{(\pm)}(\mathbf{k})} = \frac{-\mathbf{k}^5(c_{\pm}^2 - c^2) + \lambda c^2 k k_{\perp}^4}{\lambda c^2 k_{\parallel} k_{\perp}^4} = f_{\pm}(\theta), \quad (2.15)$$

где $k_{\parallel} \equiv \mathbf{k}\mathbf{n}$, $k_{\perp} \equiv \sqrt{\mathbf{k}^2 - k_{\parallel}^2}$. Используя определение скоростей c_{\pm} (2.12) и учитывая, что в сферической системе координат $k_{\parallel} \equiv \mathbf{k}\mathbf{n} = k \cos \theta$, $k_{\perp} \equiv \sqrt{\mathbf{k}^2 - k_{\parallel}^2} = k \sin \theta$, где θ – полярный угол, перепишем отношение амплитуд (2.15) в терминах полярного угла

$$f_{\pm}(\theta) = \frac{1}{\lambda \sin 2\theta \sin^3 \theta} \left(1 - \lambda \sin^2 \theta \cos 2\theta \mp \sqrt{(1 + \lambda \sin^2 \theta)^2 - \lambda \sin^2 2\theta} \right). \quad (2.16)$$

При $\lambda \ll 1$, с учетом формул (2.13), отношение амплитуд для первого звука $f_{+}(\theta)$ упрощается и приобретает следующий вид

$$f_{+}(\theta) = -\frac{\lambda \sin^4 \theta}{4 \cos \theta}. \quad (2.17)$$

Из формулы (2.17) видно, что при $\theta \rightarrow 0$ функция $f_{+}(\theta) \rightarrow 0$. Следовательно, в этой области значений полярного угла звук является продольным. При $\theta \rightarrow \pi/2$ отношение амплитуд $f_{+}(\theta) \rightarrow \infty$, откуда найдем, что при таком значении полярного угла звук является поперечным. Приведем также значения f_{+} при некоторых углах θ

$$f_{+}\left(\theta = \frac{\pi}{6}\right) = -\frac{\lambda}{32\sqrt{3}}, \quad f_{+}\left(\theta = \frac{\pi}{4}\right) = -\frac{\lambda\sqrt{2}}{4}, \quad f_{+}\left(\theta = \frac{\pi}{3}\right) = -\frac{9\lambda}{8}. \quad (2.18)$$

При $\lambda \ll 1$ звук в основном является продольным. Для второго звука отношение амплитуд $f_{-}(\theta)$ имеет вид

$$f_{-}(\theta) = \frac{1 - \lambda \sin^2 \theta \cos 2\theta}{\lambda \cos \theta \sin^4 \theta}. \quad (2.19)$$

Видно, что при $\theta \rightarrow 0$ и при $\theta \rightarrow \pi/2$ отношение амплитуд $f_{-}(\theta) \rightarrow \infty$, что означает, что при таких значениях угла второй звук является поперечным. Выпишем значения f_{-} при некоторых других углах θ

$$f_{-}\left(\theta = \frac{\pi}{6}\right) = \frac{4(8 - \lambda)}{\lambda\sqrt{3}}, \quad f_{-}\left(\theta = \frac{\pi}{4}\right) = \frac{8}{\lambda\sqrt{2}}, \quad f_{-}\left(\theta = \frac{\pi}{3}\right) = \frac{4(8 + 3\lambda)}{9\lambda}. \quad (2.20)$$

Отсюда можем заключить, что при $\lambda \ll 1$ звук в основном является поперечным.

Рассмотрим влияние внешнего переменного поля на динамику изучаемой среды. Гамильтониан системы в этом случае $\mathbf{H} = H + V$ состоит из гамильтониана среды \mathbf{H} и взаимодействия с внешним полем

$$H = \int d^3x \varepsilon(\underline{\zeta}_a(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), \nabla n_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x})), \quad V = \int d^3x \xi(\mathbf{x}, t) b(\underline{\zeta}_a(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), \nabla n_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x})), \quad (2.21)$$

здесь $\xi(\mathbf{x}, t)$ – внешнее поле, достаточно медленно изменяющееся в пространстве и времени, $b(\underline{\zeta}_a, n_i, \nabla n_i, l)$ – произвольная локальная физическая величина, которая в области больших времен становится функцией параметров сокращенного описания. Используя гамильтонов подход, нами получены уравнения динамики одноосного нематика с молекулами стержнеподобной формы во внешнем переменном поле [16]:

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= -\nabla_i \pi_i + \eta_{\rho}, & \dot{\pi}_i &= -\nabla_k t_{ik} + \eta_{\pi_i}, & \dot{\sigma} &= -\nabla_k (\sigma v_k) + \eta_{\sigma}, \\ \dot{l} &= -v_s \nabla_s l - l \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{n}) \nabla_j v_i + \eta_l, & \dot{n}_j &= -v_s \nabla_s n_j + \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{n}) n_k \nabla_k v_i + \eta_{n_j}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

где η – источники, обусловленные внешним полем. Используя явный вид скобок Пуассона (1.5), (1.6), (2.3), (2.4) и структуру гамильтониана (2.21), найдем явный вид этих источников

$$\begin{aligned} \eta_\rho &= -\rho \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_i \xi, & \eta_{n_j} &= n_k \delta_{ij}^\perp(\mathbf{n}) \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_k \xi, \\ \eta_l &= -l \delta_{ji}^\perp(\mathbf{n}) \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_j \xi, & \eta_\sigma &= -\sigma \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_i \xi, \\ \eta_{\pi_j} &= -\underline{\zeta}_a \frac{\partial b}{\partial \underline{\zeta}_a} \nabla_j \xi - l \delta_{jk}^\perp(\mathbf{n}) \frac{\partial b}{\partial l} \nabla_k \xi + \left(\frac{\partial b}{\partial n_i} - \nabla_\lambda \frac{\partial b}{\partial \nabla_\lambda n_i} \right) \delta_{ji}^\perp(\mathbf{n}) n_k \nabla_k \xi. \end{aligned}$$

Хорошо известно, что отклонение от состояния равновесия произвольной локальной динамической величины a_ξ , линейное по полю ξ , имеет вид [19]

$$\delta a_\xi(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 x' \int dt' \xi(\mathbf{x}', t') G_{ab}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t').$$

Здесь $G_{ab}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')$ – двухвременная функция Грина. Переходя к Фурье – компоненте по формуле

$$a(\mathbf{x}, t) = (2\pi)^{-4} \int d^3 k \int d\omega e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})} a(\mathbf{k}, \omega),$$

получим равенство

$$\delta a_\xi(\mathbf{k}, \omega) = G_{ab}(\mathbf{k}, \omega) \delta \xi(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.23)$$

С другой стороны, величину $\delta a_\xi(\mathbf{x}, t)$ в области достаточно больших времен ($t \gg \tau_r$, τ_r – время релаксации) можно представить в виде

$$\delta a_\xi(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial a}{\partial \underline{\zeta}_a} \delta \underline{\zeta}_a(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial a}{\partial n_k} \delta n_k(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial a}{\partial l} \delta l(\mathbf{x}, t), \quad (2.24)$$

где $\delta \underline{\zeta}_a \equiv \delta \sigma, \delta \pi_k, \delta \rho$ и $\delta l, \delta n_k$ – отклонения величин $\sigma, \pi_k, \rho, l, n_k$ от их равновесных значений. Отклонения $\delta \underline{\zeta}_a, \delta l, \delta n_k$ находятся из линеаризованных уравнений (2.22).

Далее, сравнивая формулы (2.23) с (2.24), найдем Фурье – компоненты функций Грина $G_{ab}(\mathbf{k}, \omega)$ в области малых волновых векторов и частот. Выполняя указанные действия, нами получен вид низкочастотных асимптотик функций Грина

$$G_{ab}(\mathbf{k}, \omega) = -L_i^a(\mathbf{k}, \omega) \frac{D_{ij}^{-1}(\mathbf{k}, \omega)}{\rho} L_j^b(-\mathbf{k}, -\omega) - \rho \frac{\partial a}{\partial \pi_i} \frac{\partial b}{\partial \pi_i}, \quad (2.25)$$

где введены следующие обозначения

$$L_i^a(\mathbf{k}, \omega) = \underline{\zeta}_a \frac{\partial a}{\partial \underline{\zeta}_a} k_i + l \frac{\partial a}{\partial l} \delta_{ji}^\perp(\mathbf{n}) k_j + \omega \rho \frac{\partial a}{\partial \pi_i} + \left(\frac{\partial a}{\partial n_j} - ik_\lambda \frac{\partial a}{\partial \nabla_\lambda n_j} \right) \delta_{ij}^\perp(\mathbf{n}) n_k k_k. \quad (2.26)$$

Выпишем в явном виде некоторые асимптотики функций Грина

$$\begin{aligned} G_{\rho\rho} &= \rho \frac{\omega^2(k_\parallel^2 + k_\perp^2) - \lambda c^2 k_\parallel^2 k_\perp^2}{\omega^4 - c^2 \omega^2((k_\parallel^2 + k_\perp^2) + \lambda k_\perp^2) + \lambda c^4 k_\parallel^2 k_\perp^2}, \\ G_{ll} &= \frac{l^2}{\rho} \frac{k_\perp^2(\omega^2 - c^2 k_\parallel^2)}{\omega^4 - c^2 \omega^2((k_\parallel^2 + k_\perp^2) + \lambda k_\perp^2) + \lambda c^4 k_\parallel^2 k_\perp^2}, \\ G_{n_i n_j} &= \frac{k_\parallel^2}{\omega^2(\omega^4 - c^2 \omega^2((k_\parallel^2 + k_\perp^2) + \lambda k_\perp^2) + \lambda c^4 k_\parallel^2 k_\perp^2)} \times \\ &\times \left\{ \delta_{ij}^\perp \omega^2(\omega^2 - c^2(k_\parallel^2 + k_\perp^2) - \lambda c^2 k_\perp^2) + \omega^2 c^2 (1 + \lambda)(k_i - n_i k_\parallel)(k_j - n_j k_\parallel) + \lambda c^4 k_\parallel^2 (\mathbf{k} \times \mathbf{n})_i (\mathbf{k} \times \mathbf{n})_j \right\} \end{aligned} \quad (2.27)$$

При переходе к изотропной жидкости для функции Грина “плотность – плотность” получим известные выражения, приведенные в [19]. Для функций Грина получены асимптотические выражения в случаях малых волновых векторов и частот $k_{\parallel}, k_{\perp}, \omega$. Отметим, что в виду сильной пространственной анизотропии рассматриваемой конденсированной среды вид этих асимптотик функций Грина будет зависеть от порядка предельных переходов. Проиллюстрируем это утверждение на примере некоторых функций Грина

$$\begin{aligned}
 \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} &= -\frac{\rho}{c^2}, & \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} &= 0, \\
 \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} &= -\frac{\rho}{c^2(1+\lambda)}, \\
 \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{ll} &= -\frac{l^2}{\rho c^2 \lambda}, & \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{ll} &= -\frac{l^2}{\rho c^2(1+\lambda)}, \\
 \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{ll} &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

Приведенные низкочастотные асимптотики (2.28) не содержат расходимости типа $1/k^2, 1/k$ [20]. Причина этого связана с тем, что, в отличие от рассмотренных случаев сверхтекучих и магнитных систем (см., например, [21]), в набор параметров сокращенного описания не входит плотность генератора нарушенной симметрии. В данном случае этой величиной является орбитальный момент, являющийся сопряженным по отношению к оси пространственной анизотропии. В указанных работах набор гидродинамических параметров содержал как плотность генератора нарушенной симметрии (плотности массы или спина), так и соответствующую сопряженную величину, что и приводило в конечном итоге к вышеуказанным расходимостям.

3. Динамика одноосных нематиков с молекулами дископодобной формы во внешнем переменном поле

Хорошо известны жидкие кристаллы, состоящие из молекул дископодобной формы и также обладающие одноосной симметрией. Направление ориентации таких жидких кристаллов определяется единичным вектором нормали к плоскости таких молекул. Изучение динамического поведения конденсированной среды с дископодобной формой молекул мы проведем аналогично ранее рассмотренному случаю среды со стержнеподобными молекулами. Для этого введем семейство поверхностей, касательные поверхности к которым в каждой точке совпадают с плоскостями дисков. Два неколлинеарных вектора $l_i(\mathbf{x}), f_i(\mathbf{x})$, определяющих деформированное положение плоскости, могут быть представлены в виде

$$l_i(\mathbf{x}) = b_{ij}^{-1}(\mathbf{x}) l_j, \quad f_i(\mathbf{x}) = b_{ij}^{-1}(\mathbf{x}) f_j \tag{3.1}$$

где l_i, f_i – постоянные неколлинеарные векторы, определяющие положение плоскости недеформированного состояния. Тогда вектор нормали к плоскости, натянутой на векторы $l_i(\mathbf{x}), f_i(\mathbf{x})$, равен

$$d_i(\mathbf{x}) = d_k \partial \xi_k / \partial x_i \equiv d_k b_{ki}(\mathbf{x}), \tag{3.2}$$

здесь $\mathbf{d} = \mathbf{l} \times \mathbf{f}$ – вектор, определяющий направление пространственной анизотропии $n_i = d_i / d$ и диаметр дископодобной молекулы $d = \sqrt{d_i^2}$ в недеформированном состоянии. Единичный вектор нормали к плоскости дископодобной молекулы и модуль

вектора $d_i(\mathbf{x})$, имеющий физический смысл диаметра дископодобной молекулы в деформированном состоянии, определим формулой

$$n_i(\mathbf{x}) = d_i(\mathbf{x})/d(\mathbf{x}), \quad d(\mathbf{x}) = (d_i^2(\mathbf{x}))^{1/2}. \quad (3.3)$$

Используя определение вектора анизотропии $n_i(\mathbf{x})$ (3.3) и формулы (1.6), (3.1), (3.2) для величин $\pi_i(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), d(\mathbf{x}) \equiv |\mathbf{d}(\mathbf{x})|$, получим скобки Пуассона

$$\begin{aligned} \{\pi_i(\mathbf{x}), n_j(\mathbf{x}')\} &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_i n_j(\mathbf{x}) + \delta_{jk}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x}')) n_i(\mathbf{x}') \nabla'_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \{\pi_i(\mathbf{x}), d(\mathbf{x}')\} &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_i d(\mathbf{x}) + d(\mathbf{x}') n_i(\mathbf{x}') n_j(\mathbf{x}') \nabla'_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Видим, что скобки Пуассона (2.3), (2.4), найденные для одноосного нематика с молекулами стержнеподобной формы, отличаются от скобок Пуассона (3.4), полученных для одноосного нематика с молекулами дископодобной формы. Плотность энергии взаимодействия в рассматриваемом случае является функцией плотностей аддитивных интегралов движения, ориентационного и конформационного параметров $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi(\rho(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}), n_i(\mathbf{x}), \nabla n_i(\mathbf{x}), d(\mathbf{x}))$. Приведем выражение для плотности потоков аддитивных интегралов движения:

$$\zeta_{ak} = -\frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{\omega Y_k}{Y_0} + \left[\frac{\partial \omega}{\partial \nabla_k n_j} \nabla_i n_j + n_i \delta_{k\lambda}^\perp(\mathbf{n}) \left(\frac{\partial \omega}{\partial n_\lambda} - \nabla_j \frac{\partial \omega}{\partial \nabla_j n_\lambda} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial d} dn_i n_k \right] \frac{\partial}{\partial Y_a} \frac{Y_i}{Y_0}. \quad (3.5)$$

Уравнения, отражающие законы сохранения числа частиц, импульса и энергии в дифференциальной форме имеют вид (1.9), (3.5). Получим уравнение движения для единичного вектора $n_j(\mathbf{x})$. Обращаясь к уравнению (1.1), имеем

$$\dot{n}_j(\mathbf{x}) = -v_s(\mathbf{x}) \nabla_s n_j(\mathbf{x}) - n_i(\mathbf{x}) \delta_{j\lambda}^\perp(\mathbf{n}(\mathbf{x})) \nabla_\lambda v_i(\mathbf{x}).$$

Аналогичным образом получим уравнение движения для конформационной степени свободы $d(\mathbf{x})$

$$\dot{d}(\mathbf{x}) = -v_s(\mathbf{x}) \nabla_s d(\mathbf{x}) - d(\mathbf{x}) n_k(\mathbf{x}) n_l(\mathbf{x}) \nabla_k v_l(\mathbf{x}).$$

Исследуем спектры коллективных возбуждений на основе полученных уравнений одноосного нематика с молекулами дископодобной формы. Легко видеть, что дисперсионное уравнение имеет вид (2.11), в котором

$$\begin{aligned} I_4 &= -\mathbf{k}^2 c^2 - c^2 \lambda (\mathbf{kn})^2 \leq 0, & I_2 &= c^4 \lambda (\mathbf{k}^2 - (\mathbf{kn})^2) (\mathbf{kn})^2 \geq 0, \\ T_i(\mathbf{k}) &\equiv c \sqrt{\lambda} (\mathbf{kn}) n_i, & \lambda &= \frac{d^2}{\rho c^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial d^2} > 0. \end{aligned}$$

Отсюда приходим к акустическим спектрам $\omega_\pm(\mathbf{k}) = c_\pm(\mathbf{k}/k)k$. В этом случае также получаются две анизотропные скорости акустических волн [16]

$$c_\pm(\theta) = \frac{c}{\sqrt{2}} \left\{ 1 + \lambda \cos^2 \theta \pm \left[(1 + \lambda \cos^2 \theta)^2 - \lambda \sin^2 2\theta \right]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (3.6)$$

Видим, что аналитическое выражение (3.6) для скоростей двух акустических волн в случае дископодобных молекул отличается от соответствующего выражения (2.12), справедливого для стержнеподобных молекул. Характер анизотропии спектров (3.6) представлен на Рис. 3.1, где, как и в предыдущем случае одноосных стержнеподобных нематиков, фронт распространения волн приведен в виде среза вдоль оси пространственной анизотропии. Дополнительная мода обусловлена деформацией площадки дис-

коподобного жидкого кристалла. Сравнивая формулы (2.12), (3.6) с результатами работы [2], отметим, что в последних дополнительные моды в одноосных нематических жидких кристаллах, связанные с нарушенной симметрией относительно поворотов в конфигурационном пространстве, имели чисто диссипативный характер. Учет конформационной степени свободы, как мы увидели, приводит к возможности распространения второго звука у обоих типов одноосных нематиков уже в адиабатическом приближении. При этом анизотропия второго звука имеет гораздо более резкий характер по сравнению с первым звуком. Ситуация в некоторой степени аналогична той, которая имеет место в смектических жидких кристаллах, где возникновение второго звука связано с появлением в наборе гидродинамических параметров дополнительной смектической переменной.



Рис. 3.1. а), б) Зависимость скоростей c_{\pm} от полярного угла при $\lambda = 1$

Как видно из приведенных рисунков, вблизи углов $\theta = \pi/2$ скорость c_+ уменьшается с ростом безразмерного термодинамического параметра λ . Для скорости c_- качественно рисунки подобны аналогичным рисункам для стержнеподобных нематических жидких кристаллов, приведенным в разделе 2.

Рассмотрим поведение скоростей звука при малых значениях термодинамического параметра $\lambda \ll 1$. В соответствии с формулой (3.6), имеем

$$c_+ \approx c \left(1 + \frac{\lambda}{2} \cos^4 \theta \right), \quad c_- \approx \frac{c}{2} \sqrt{\lambda} |\sin 2\theta|. \quad (3.7)$$

Видим, что малая добавка приводит к слабой анизотропии скорости первого звука c_+ . Скорость второго звука c_- анизотропная. Как следует из формул (2.13) и (3.7), при малых значениях параметра $\lambda \ll 1$ вид скорости второго звука c_- в изучаемых одноосных нематиках не зависит от формы молекул. Согласно (3.7) при $\lambda \ll 1$, для первого звука получим $\min c_+ = c$ при $\theta_0 = \pi/2$; $\max c_+ = c(1 + \lambda/2)$ при $\theta_0 = 0; \pi$. Для второго звука имеем $\min c_- = 0$ при $\theta_0 = 0; \pi/2; \pi$; $\max c_- = c\sqrt{\lambda}/2$ при $\theta_0 = \pi/4; 3\pi/4$, совпадающие с аналогичными формулами для одноосных стержнеподобных нематиков.

Изучим поляризационную структуру спектров коллективных возбуждений для нематиков с дископодобными молекулами. Для Фурье – компонент отклонений скорости от состояния равновесия получены равенства

$$\delta v_j^{(0)}(\mathbf{k}) = [\mathbf{k} \times \mathbf{n}]_j \delta v_{1\perp}^{(0)}(\mathbf{k}), \quad \delta v_j^{(\pm)}(\mathbf{k}) = k_j \delta v_{\parallel}^{(\pm)} + k [[\mathbf{k} \times \mathbf{n}] \times \mathbf{k}]_j \delta v_2^{\perp(\pm)},$$

причем связь амплитуд колебаний выглядит следующим образом

$$\frac{\delta v_2^{\perp}}{\delta v_{\parallel}^{(\pm)}} = \frac{-\mathbf{k}^5 (c_{\pm}^2 - c^2) + \lambda c^2 k k_{\parallel}^4}{\lambda c^2 k_{\parallel}^3 k_{\perp}^2} = g_{\pm}(\theta). \quad (3.8)$$

Сравнивая формулы (2.15) и (3.8), видим, что выражения для соотношения амплитуд продольной и поперечной компонент различны для нематиков с молекулами стержне- и дископодобной формы. Как и в ранее рассмотренном случае одноосного нематика с

молекулами стержнеподобной формы, перепишем отношение амплитуд (3.8) в терминах модуля волнового вектора и полярного угла

$$g_{\pm}(\theta) = \frac{1}{\lambda \sin 2\theta \sin \theta \cos^2 \theta} \left(1 + \lambda \cos^2 \theta \cos 2\theta \mp \sqrt{(1 + \lambda \cos^2 \theta)^2 - \lambda \sin^2 2\theta} \right). \quad (3.9)$$

При $\lambda \ll 1$, с учетом формул (3.7), отношение амплитуд для первого звука $g_+(\theta)$ имеет следующий вид

$$g_+(\theta) = -\frac{\lambda \cos^5 \theta}{4 \sin^2 \theta}. \quad (3.10)$$

Из формулы (3.10) видно, что при $\theta \rightarrow 0$ функция $g_+(\theta) \rightarrow \infty$, следовательно, в этом случае звук является поперечным. При $\theta \rightarrow \pi/2$ отношение амплитуд $g_+(\theta) \rightarrow 0$, откуда следует, что звук является продольным. Приведем также значения $g_+(\theta)$ при некоторых других углах θ

$$g_+\left(\theta = \frac{\pi}{6}\right) = -\frac{\lambda 9\sqrt{3}}{32}, \quad g_+\left(\theta = \frac{\pi}{4}\right) = -\frac{\lambda\sqrt{2}}{16}, \quad g_+\left(\theta = \frac{\pi}{3}\right) = -\frac{\lambda}{96}. \quad (3.11)$$

Из этих формул можно заключить, что при $\lambda \ll 1$ звук в основном является продольным. Сравнивая формулы (2.13) с (3.7), видим, что при малых λ выражение для второго звука c_- не зависит от формы молекул.

Динамическое поведение нематика с дископодобной формой молекул во внешнем переменном поле изучено аналогично ранее рассмотренному случаю. Уравнения динамики такой среды в этом поле имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= -\nabla_i \pi_i + \eta_{\rho}, & \dot{\pi}_i &= -\nabla_k t_{ik} + \eta_{\pi_i}, & \dot{\sigma} &= -\nabla_k (\sigma v_k) + \eta_{\sigma}, \\ \dot{d} &= -v_s \nabla_s d - dn_k n_l \nabla_k v_l + \eta_d, & \dot{n}_j &= -v_s \nabla_s n_j - n_i \delta_{jl}^{\perp}(\mathbf{n}) \nabla_l v_i + \eta_{n_j}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

где d – диаметр диска, а источники выглядят следующим образом

$$\begin{aligned} \eta_{\rho} &= -\rho \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_i \xi, & \eta_{n_j} &= -n_k \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{n}) \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_k \xi, \\ \eta_d &= -dn_i n_j \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_j \xi, & \eta_{\sigma} &= -\sigma \frac{\partial b}{\partial \pi_i} \nabla_i \xi, \\ \eta_{\pi_j} &= -\zeta_a \frac{\partial b}{\partial \zeta_a} \nabla_j \xi - dn_i n_j \frac{\partial b}{\partial d} \nabla_i \xi - \left(\frac{\partial b}{\partial n_i} - \nabla_{\lambda} \frac{\partial b}{\partial \nabla_{\lambda} n_i} \right) \delta_{ji}^{\perp}(\mathbf{n}) n_k \nabla_k \xi. \end{aligned} \quad (3.13)$$

С помощью системы уравнений (3.12), (3.13) получен общий вид низкочастотных асимптотик функций Грина

$$G_{ab}(\mathbf{k}, \omega) = -L_i^a(\mathbf{k}, \omega) \frac{D_{ij}^{-1}(\mathbf{k}, \omega)}{\rho} L_j^b(-\mathbf{k}, -\omega) - \rho \frac{\partial a}{\partial \pi_i} \frac{\partial b}{\partial \pi_i}, \quad (3.14)$$

где введены следующие обозначения

$$\begin{aligned} L_i^a(\mathbf{k}, \omega) &= \left(\zeta_a \frac{\partial a}{\partial \zeta_a} \right) k_i + d \frac{\partial a}{\partial d} n_i n_j k_j + \omega \rho \frac{\partial a}{\partial \pi_i} + \left(\frac{\partial a}{\partial n_j} - ik_{\lambda} \frac{\partial a}{\partial \nabla_{\lambda} n_j} \right) \delta_{ij}^{\perp}(\mathbf{n}) n_k k_k, \\ D_{ij} &= \omega^2 \delta_{ij} - c^2 k_i k_j - c^2 \lambda (\mathbf{kn})^2 n_i n_j, \end{aligned}$$

которые отличаются от соответствующих выражений (2.26) для стержнеподобных молекул. Поступая аналогично предыдущему случаю, приведем в явном виде некоторые функции Грина динамических переменных

$$G_{\rho\rho} = \rho \frac{\omega^2 (k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2) - \lambda c^2 k_{\parallel}^2 k_{\perp}^2}{\omega^4 - \omega^2 (c^2 (k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2) + \lambda c^2 k_{\parallel}^2) + \lambda c^4 k_{\parallel}^2 k_{\perp}^2},$$



$$G_{dd} = \frac{d^2}{\rho} \frac{k_{\perp}^2 (\omega^2 - k_{\parallel}^2 c^2 (1 + \lambda))}{\omega^4 - \omega^2 (c^2 (k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2) + \lambda c^2 k_{\parallel}^2) + \lambda c^4 k_{\parallel}^2 k_{\perp}^2}, \quad (3.15)$$

$$G_{n_i n_j} = \frac{k_{\parallel}^2}{\omega^2 (\omega^4 - c^2 \omega^2 ((k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2) + \lambda k_{\parallel}^2) + \lambda c^4 k_{\parallel}^2 k_{\perp}^2)} \times \\ \times \left\{ \delta_{ij}^{\perp} \omega^2 (\omega^2 - c^2 (k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2) - \lambda c^2 k_{\parallel}^2) + \omega^2 c^2 (k_i - n_i k_{\parallel}) (k_j - n_j k_{\parallel}) + \lambda c^4 k_{\parallel}^2 (\mathbf{k} \times \mathbf{n})_i (\mathbf{k} \times \mathbf{n})_j \right\}.$$

В рассматриваемом случае также имеет место зависимость асимптотик функций Грина (3.14) от порядка предельных переходов

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = -\frac{\rho}{c^2}, \quad \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = \rho \frac{k_{\perp}^2}{\omega^2 - c^2 k_{\perp}^2}, \quad \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = \rho \frac{k_{\parallel}^2}{\omega^2 - k_{\parallel}^2 c^2 (1 + \lambda)}, \\ \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = -\frac{\rho}{c^2}, \quad \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = 0, \quad \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = -\frac{\rho}{c^2 (1 + \lambda)}, \\ \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} G_{\rho\rho} = 0, \\ \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{dd} = -\frac{d^2}{\rho} \frac{1 + \lambda}{\lambda c^2}, \quad \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{dd} = \frac{d^2}{\rho} \frac{k_{\perp}^2}{\omega^2 - k_{\perp}^2 c^2}, \quad \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} G_{dd} = 0, \\ \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{dd} = -\frac{d^2}{\rho c^2}, \quad \lim_{k_{\perp} \rightarrow 0} \lim_{k_{\parallel} \rightarrow 0} G_{dd} = 0. \quad (3.16)$$

Сравнивая формулы (2.28) и (3.16), видим, что низкочастотные асимптотики функций Грина имеют различный вид в случае одноосных нематиков с молекулами стержнеподобной и дископодобной формы. Также легко видеть, что и в данном случае не выполняется теорема Боголюбова об особенностях типа $1/k^2, 1/k$, поскольку в набор параметров сокращенного описания не входит орбитальный момент.

Литература

1. de Gennes P.G.J., Prost J. The Physics of Liquid Crystals. Oxford: Oxford University Press, 1995. 400 p.
2. Лебедев В.В., Кац Е.М. Динамика жидких кристаллов. М.: Наука, 1988. 144 с.
3. Chaikin P.M., Lubensky T.C. Principles of Condensed Matter Physics. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 699 p.
4. Аверьянов Е.М. Эффекты локального поля в оптике жидких кристаллов. Новосибирск: Наука, 1999. 552 с.
5. Ericksen J.L. // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1960. V. 4. P. 231.
6. Leslie F.M. // Quart. J. Mech. Appl. Math. 1966. V. 19. P. 357-370.
7. Dzyaloshinsky I.E., Volovick G.E. // Ann. Phys. 1980. V. 125. P. 67-97.
8. А.А. Исаев, М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский // ЭЧАЯ. 1996. Т. 27, вып. 2. С. 431.
9. Pleiner H., Brand H.R. // Chapt. 2 Pattern Formation in Liquid Crystals / eds. A. Buka and L. Kramer. N.Y.: Springer, 1996. P. 15.
10. Olmsted P.D., David Lu C.Y. // Phys. Rev. E. 1999. V. 60. P. 4397.
11. Stark H., Lubensky T.C. // Phys. Rev. E. 2003. V. 67. P. 061709.
12. Qian T., Sheng P. // Phys. Rev. E. 1998. V. 58, № 6. P. 7475.
13. Воловик Г.Е. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. С. 297.
14. Ковалевский М.Ю., Кузнецов В.В. // ДАН Украины. 1999. № 12. С. 90.
15. Kovalevsky M.Y., Shishkin A.L. // J. of Molecular Liquids. 2003. V. 105/2-3. P. 197.
16. Kovalevsky M.Y., Logvinova L.V., Matskevich V.T. // Вопросы атомной науки и техники. 2007. № 3. С. 380.
17. Selinger J.V., Spector M.S., Greanya V.A., Weslowski B.T., Shenoy D.K., Shashidhar R. // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. P. 051708/1.

18. Greanya V.A., Malanovsky A.P., Weslowski B.T., Spector M.S., Selinger J.V. // Liquid Crystals. 2005. V. 32, № 7. P. 933.
19. А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 377 с.
20. N.N. Bogolubov – Physica. 1960. V. S26. P. 1.
21. М.Ю. Ковалевский, С.В. Пелетминский. Статистическая механика квантовых жидкостей и кристаллов. М.: Физматлит, 2006. 368 с.
22. Liu M. // Phys. Rev. A. 1979. V. 19. P. 2090-2094.
23. Bhattacharya S., Sarma B.K., Ketterson J.B. // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 40, № 40. P. 1582.

INVESTIGATION OF UNIAXIAL NEMATIC LIQUID CRYSTAL DYNAMICS UNDER INFLUENCE OF EXTERNAL ALTERNATING FIELD

M.Y. Kovalevsky¹⁾, L.V. Logvinova¹⁾, V.T. Matskevich²⁾, A.N. Schvets³⁾

¹⁾Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia,

²⁾National Science Center "Kharkov Institute of Physics&Technology"
Academicheskaya, 1, Kharkov, 61108, Ukraine

³⁾Kharkiv Karazin National University 4 Svobody sq, Kharkiv, 61077, Ukraine 4
mikov@kharkov.ua

The dynamic equations of uniaxial nematic liquid crystals with rod-like and disc-like molecules in alternative external field are obtained. The low-frequency asymptotics of two-temporary Green functions are calculated. It is clarified that their structure depends essentially on the character of spatial anisotropy of considered condensed matter and on molecules shape. The polarization features of acoustic waves in uniaxial nematics are investigated. It is shown that the first and second sounds are superpositions of longitudinal and transversal components. The relation between the amplitudes of these components as the function of an angle between wave vector and anisotropy axis is established.

Key words: Hamiltonian approach, Poisson brackets, uniaxial nematic, low-frequency asymptotics of Green functions, polarizations.

АНАЛИЗ СТРУКТУРА ГАМИЛЬТониАНА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ВЕТРОВЫХ ВОЛН НА ГЛУБОКОЙ ВОДЕ

А.Н. Сердюченко

Национальный университет кораблестроения им. адм. С. О. Макарова, 54025, г. Николаев,
просп. Героев Сталинграда, 9, Украина, e-mail: san@cte.nk.ukrtel.net

Рассмотрено применение механики Гамильтона к исследованию гидродинамики нелинейных ветровых волн в открытом и глубоком океане. Внимание сосредоточено на исключении неканонической переменной – вертикальной проекции скорости на волновой поверхности из гамильтоновской формулировки волновой задачи. Выделено три основных группы методов в решении данной проблемы, это 1) проекционные или, другими словами, спектральные методы, 2) дифференциальные и 3) интегральные методы. Показано, что во всех случаях техника исключения не является тривиальной, она существенно связана со степенью нелинейности волн и порождает достаточно громоздкие алгоритмы. Приведены также результаты расчетов канонических и неканонических переменных для периодических волн Стокса и укрученных ветровых волн, близких к предельным волнам. Показано формирование особенностей в окрестности гребней волн.

Ключевые слова: гамильтонова механика сплошных сред, гамильтониан, канонические переменные, ветровые волны на воде, нелинейность.

Введение

Начиная с первых работ В.Е.Захарова, Дж. Майлза [1, 2], в 60-70-е годы прошлого столетия внимание исследователей привлекла возможность применения хорошо отработанного формализма классической нелинейной гамильтоновой механики [3 – 5] к исследованию волновых движений на воде. Затем техника гамильтоновского формализма нашла свое применение в нелинейных задачах для других сплошных сред – волоконной оптике, плазме, электродинамике и др. [6 – 9]. Основательный обзор возможностей гамильтоновой механики для различных сплошных сред можно найти в работах [6, 7].

Применительно к волнам на воде перспективность применения гамильтоновой механики была связана в первую очередь с возможностью преодоления одной из ключевых трудностей соответствующей краевой задачи – формулировки нелинейных граничных условий на неизвестной волновой границе области жидкости [2, 10]. Кроме того привлекательной выглядела и хорошо отработанная в классической механике техника канонических преобразований гамильтоновского формализма [4, 5]. Однако для поверхностных волн формулировка уравнений движения в терминах механики Гамильтона оказалась не замкнутой относительно канонических переменных – ординат волновой поверхности и поверхностных значений потенциала скоростей частиц жидкости. В уравнения входила также вертикальная проекция скоростей на волновой поверхности и поэтому возникла проблема исключения этой неканонической переменной из уравнений Гамильтона для волн на воде.

Естественно, что этой в общем технической проблеме уделялось внимание исследователями, было разработано ряд методов замыкания уравнений Гамильтона для волн на глубокой воде [10 – 12], в жидкости ограниченной глубины [9, 13, 14]. Результаты показали, что имеет место нетривиальная ситуация: алгоритмы замыкания оказались громоздкими, а при их разработке существенным являлось допущение о слабой нелинейности волн. В то же время в достаточно сильных штормах в океане ветровые волны достигают и сильной степени нелинейности: гребни особо крутых волн укручи-

ваются, опрокидываются и частично разрушаются [15]. Поэтому целью данной статьи является, во-первых, анализ существующих методов исключения неканонических переменных в гамильтоновском формализме для волн на воде и, во-вторых, их обобщение на сильно нелинейные волны с большими градиентами волновой поверхности.

Базовые соотношения и уравнения

Будем рассматривать поверхностные ветровые волны в глубоком и безграничном океане, жидкость считать идеальной, однородной и баротропной, а ее движение – безвихревым с потенциалом скоростей $\varphi(\vec{x}, z, t)$, где $\vec{x} = (x, y)$ – декартовы координаты в плоскости тихой воды и вертикальная координата z направлена вверх. В данной работе внимание будет сосредоточено на описании движения ветровых волн в достаточно развитом и интенсивном шторме на интервалах квазистационарности (порядка 30–40 мин по времени) [16], что дает право пренебречь эффектами давления ветрового потока на волновой поверхности, поскольку это давление по крайней мере на три порядка меньше волновых давлений в жидкости [17]. Естественно, ветровое давление влияет на волновые движения, но это влияние проявляется на временных интервалах протяженностью, по крайней мере, в несколько часов (синоптических интервалах) [16]. Кроме того, основное внимание будет уделено крупномасштабной энергонесущей компоненте в спектре нерегулярного волнового поля с длинами волн порядка 100–200 м, высотами до 15–25 м., слабо выраженной трехмерностью и умеренной нерегулярностью волновой поверхности.

При указанных соотношениях высот и длин волн их следует считать нелинейными и использовать общие уравнения гидродинамики потенциальных волновых движений [18]. На языке гамильтоновой механики сплошных сред [6 – 8] эти уравнения записываются следующим образом. Функция Гамильтона (далее гамильтониан), определенная как сумма кинетической и потенциальной энергий волнового движения, имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \rho \iint_{(S_o)} \left(\int_{-\infty}^{\zeta_w} \vec{v}_w^2 dz + g \zeta_w^2 \right) d\vec{x}, \quad (1)$$

где ρ – плотность жидкости; $\vec{v}_w = (v_x, v_y, v_z) = \nabla \varphi$ – поле скоростей частиц жидкости в волнах ($\nabla = (\tilde{\nabla}, \partial/\partial z) = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ – оператор Гамильтона); $z = \zeta_w(x, y, t)$ – уравнение волновой поверхности; g – ускорение свободного падения и S_o – область, покрытая волнами в плоскости тихой воды и также для краткости обозначено $d\vec{x} \equiv dx dy$.

Парой канонических переменных в гамильтоновой формулировке являются ординаты волновой поверхности $\zeta_w(\vec{x}, t)$ и поверхностное значение потенциала скоростей на волновой поверхности $\psi^s(\vec{x}, t) = \varphi[\vec{x}, t, \zeta_w(\vec{x}, t)] \equiv (\varphi)^s$ (верхний индекс s далее будет указывать на принадлежность величины к свободной волновой поверхности) [2, 10]. Определение вариационных производных от гамильтониана (1) по каноническим переменным ζ_w, ψ^s порождает пару уравнений Гамильтона следующего вида [6, 10, 12]

$$\frac{\partial \zeta_w}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta \psi^s} = -(\tilde{\nabla} \zeta_w \cdot \tilde{\nabla} \psi^s)_+ + w^s \left[1 + (\tilde{\nabla} \zeta_w)^2 \right], \quad (2)$$

$$\frac{\partial \psi^s}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta \zeta_w} = -g \zeta_w - \frac{1}{2} (\tilde{\nabla} \psi^s)^2 + \frac{1}{2} (w^s)^2 \left[1 + (\tilde{\nabla} \zeta_w)^2 \right], \quad (3)$$

где $w^s(\vec{x}, t) \equiv (v_z)^s$ – вертикальная проекция скорости \vec{v} на волновой поверхности.

Укажем на некоторые особенности уравнений (2), (3). Во-первых, отметим, что при получении вариационных производных по каноническим переменным необходимо обращаться к специальным предельным переходам в окрестности волновой поверхности, поскольку переменная ζ_w входит в Гамильтониан в том числе и как граница, а переменная ψ^s вообще входит неявно [6, 7, 9]. Во-вторых, эти уравнения физически являются кинематическим и динамическим граничными условиями на волновой поверхности и они соответствуют эйлеровому описанию волновых движений [18, 19]. Поэтому данная формулировка не может описывать эффекты опрокидывания гребней особо крутых (нелинейных) ветровых волн, когда возникает многозначность в функции $\zeta_w(\vec{x}, t)$ (рис. 1). Это, в частности, ограничивает область применимости гамильтоновского формализма в данном виде для изучения сильно нелинейных ветровых волн на воде. И, в-третьих, в уравнения (2), (3) входит третья неканоническая переменная w^s – вертикальная проекция скорости на волновой поверхности, и это является вполне естественным, поскольку уравнение Лапласа для потенциала скоростей в жидкости $\nabla^2\varphi = 0$ имеет второй порядок по всем координатам. Появление в уравнениях Гамильтона неканонической переменной w^s требует либо дополнения уравнений (2), (3) третьим уравнением, либо определения переменной w^s через канонические переменные ζ_w, ψ^s . Этому вопросу и будет уделено основное внимание в данном изложении.



Рис. 1. Профили ветровых волн с различной степенью укрученности гребней;
1 – симметричная волна Стокса

Гамильтониан (1) можно далее несколько модифицировать, если вычислить интеграл по вертикальной координате и использовать дифференциальное соотношение $\tilde{\nabla}\psi^s = (\tilde{\nabla}\varphi)^s + w^s\tilde{\nabla}\zeta_w$. Это приводит последовательно к выражениям

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2}\rho \iint_{(S_0)} \left\{ \psi^s \left[w^s - (\tilde{\nabla}\zeta_w \cdot (\tilde{\nabla}\varphi)^s) \right] + g\zeta_w^2 \right\} d\vec{x} = \\
 &= \frac{1}{2}\rho \iint_{(S_0)} \left\{ \psi^s \left[w^s \left[1 + (\tilde{\nabla}\zeta_w)^2 \right] - (\tilde{\nabla}\zeta_w \cdot \tilde{\nabla}\psi^s) \right] + g\zeta_w^2 \right\} d\vec{x}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

К сожалению, наличие функциональной связи $w^s(\zeta_w, \psi^s)$ не позволяет использовать для вариационных производных от гамильтониана выражение (4) и вынуждает исходить из базового соотношения (1).

По определению «лишняя» переменная w^s и канонические переменные (ζ_w, ψ^s) связаны совершенно очевидными соотношениями

$$w^s = \varphi_z(\vec{x}, t; \zeta_w), \quad \psi^s = \varphi(\vec{x}, t; \zeta_w), \tag{5}$$

где использовано индексное обозначение для производной по координате z .

Однако поиск оператора явной зависимости $w^s(\zeta_w, \psi^s)$ уже встречает довольно существенные трудности. В периодической литературе разработано ряд методов определения этой зависимости, однако все они основаны на допущении о слабой нелинейности волновых движений (малости крутизны волн и углов волнового склона). Поэтому обратимся сначала к слабо нелинейным волнам на поверхности воды.

Слабо нелинейные волны

Приближение слабой нелинейности позволяет использовать спектральные представления волнового поля и асимптотические ряды в предположении малых нелинейных взаимодействий между спектральными компонентами [1, 7, 11, 12]. Вообще спектральные разложения играют очень важную роль в гамильтоновском формализме для сплошной среды, поскольку они, с одной стороны, относятся к классу канонических преобразований а, с другой стороны, являются инструментом для дискретизации канонических переменных путем перехода к дискретному множеству Фурье-трансформант. Только после этого можно ставить вопрос о применении арсенала канонических преобразований, накопленного в классической механике Гамильтона [5], с целью дальнейшей редукции Гамильтониана системы. В нашей задаче для начального волнового поля преобразование Фурье по пространственным координатам для всех основных переменных имеет вид

$$\varphi(\vec{x}, z, t) = \sum_{(\vec{k})} \tilde{\varphi}_{\vec{k}}(t) \exp\left(\left|\vec{k}\right|z + i(\vec{k} \cdot \vec{x})\right), \quad \left|\vec{k}\right| = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}; \quad (6)$$

$$(\zeta_w, \psi^s, w^s)(\vec{x}, t) = \sum_{(\vec{k})} (\tilde{\zeta}_{\vec{k}}, \tilde{\psi}_{\vec{k}}, \tilde{w}_{\vec{k}})(t) \exp i(\vec{k} \cdot \vec{x}), \quad (7)$$

где $\tilde{\varphi}_{\vec{k}} \equiv \tilde{\varphi}(\vec{k})$ и аналогичные величины под знаками сумм являются Фурье-трансформантами; $\vec{k} = (k_x, k_y)$ – вектор волнового числа элементарной гармоник в спектральном разложении начального волнового поля; $\sum_{(\vec{k})}$ определяет двойную сумму по точечному множеству всех значений волновых чисел в декартовом прямоугольнике $[-k_x^{\max}; k_x^{\max}] \times [-k_y^{\max}; k_y^{\max}]$, $k_{x,y}^{\max}$ – максимальные значения проекций волнового числа.

Отметим, что для слабо нерегулярной компоненты волнового поля со слабой трехмерностью $k_y^{\max} \ll k_x^{\max}$, а продольные волновые числа k_x в основном концентрируются в окрестности некоторого характерного значения k_0 . При равномерной дискретизации для адекватного описания движения волнового поля на интервалах квазистационарности ветрового волнения (порядка 35–40 мин.) необходимо не менее 10^3 базовых гармоник основного порядка (т.е. без учета кратных гармоник, порождаемых нелинейными взаимодействиями третьего, четвертого и более высоких порядков). Однако использование специальных технологий дискретизации [20], основанных на рандомизации дискретных значений и более плотной их концентрации в окрестности максимума спектра волнового поля, позволяет примерно на порядок снизить число базовых гармоник, что существенно снижает объемы вычислений. Кроме того, все Фурье-трансформанты $(\tilde{\varphi}_{\vec{k}}, \tilde{\zeta}_{\vec{k}}, \tilde{\psi}_{\vec{k}}, \tilde{w}_{\vec{k}})$ будут являться также функциями времени через нелинейные взаимодействия между отдельными гармониками в спектральных разложениях (6), (7).

Таким образом, в формулировке (6), (7) исключение неканонической переменной w^s из уравнений Гамильтона сводится к отысканию зависимости для Фурье-

трансформант $\tilde{w}_{\vec{k}}(\tilde{\zeta}_{\vec{k}}, \tilde{\psi}_{\vec{k}})$. Для этого необходимо подставить разложения (6), (7) в базовые определения (5), использовать для экспонент $\exp[\vec{k} \cdot \sum_{(\vec{k})} \tilde{\zeta}_{\vec{k}} \exp i(\vec{k} \cdot \vec{x})]$ разложение в ряд Тейлора, а окончательные результаты получить в виде асимптотических рядов по степеням малого параметра, характеризующего степень нелинейности волн. Громоздкость соответствующих зависимостей очевидна и поэтому практически удается получить не более одного-трех приближений по малому параметру (показательным примером является работа [12]). В отдельных работах, например, [14] процедура исключения неканонических переменных $\tilde{w}_{\vec{k}}$ вообще не выделяется как отдельный этап решения, а «погружена» в общую цепочку канонических преобразований гамильтоновых переменных $(\tilde{\zeta}_{\vec{k}}, \tilde{\psi}_{\vec{k}})$ – переход к нормальным переменным, исключение нерезонансных взаимодействий и пр. Данный подход можно назвать проекционным или, другими словами, спектральным из-за ключевой роли спектрального представления переменных задачи.

Более общим представляется следующий метод, разработанный в [13] для поверхностных волн в жидкости конечной глубины. Согласно этому методу, выражение $[w^s - (\tilde{\nabla} \zeta_w \cdot (\tilde{\nabla} \phi)^s)]$, которое входит в гамильтониан (5) и является линейным по неканоническим переменным w^s , $(\tilde{\nabla} \phi)^s$, представляется некоторым оператором $G(\zeta_w) \psi^s$, который определяется только каноническими переменными (ζ_w, ψ^s) . При этом полагается, что для слабо нелинейных волн оператор $G(\zeta_w)$ можно записать в виде асимптотического ряда $G(\zeta_w) = \sum_j \varepsilon^j G_j(\zeta_w)$ по степеням положительного малого параметра $\varepsilon \ll 1$.

Для волн на глубокой воде алгоритм реализуется следующим образом. Используя для величин w^s и ϕ ряды (6), (7), а также снова разложив экспоненты в объемном потенциале в ряды Тейлора, получим для операторов $G_j(\zeta_w)$ следующие рекуррентные соотношения (в плоскости волновых чисел элементарных гармоник \vec{k})

$$G_j(\zeta_w) = \frac{\zeta_w^j}{j!} \left(|\vec{k}|^{j+1} - i(\tilde{\nabla} \zeta_w \cdot \vec{k}) |\vec{k}|^j \right) - \sum_{l < j} \frac{1}{(j-l)!} G_l(\zeta_w) \zeta_w^{j-l} |\vec{k}|^{j-l}, \quad (8)$$

где $j = 0, 1, 2, \dots$

Далее необходимо вернуться из плоскости волновых чисел в физическую плоскость координат \vec{x} . С этой целью напомним, что множитель $\vec{k} = (k_x, k_y)$ в (8) связан с действием оператора $D = -i\tilde{\nabla}$ на потенциал ϕ , а множитель $|\vec{k}| = (\vec{k} \cdot \vec{k})^{1/2} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ в (8) может быть определен как результат действия дифференциального оператора в виде $|D| = [-\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\nabla}]^{1/2}$. Тогда окончательно получим для членов ряда $G_j(\zeta_w)$ следующую рекуррентную зависимость

$$G_j(\zeta_w) = \frac{1}{j!} \left(\zeta_w^j |D|^{j+1} + (D \zeta_w \cdot D) |D|^{j-1} \right) - \sum_{l=0}^{j-1} \frac{1}{(j-l)!} G_l(\zeta_w) \zeta_w^{j-l} |D|^{j-l}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (9)$$

Несколько первых членов ряда $G_j(\zeta_w)$, $j = 0 \dots 4$ были получены в явном виде и приведены к самосопряженной форме

$$\begin{aligned}
 G_0 &= |D|, & G_1 &= D \cdot \zeta_w D - |D| \cdot \zeta_w |D|, \\
 G_2 &= -\frac{1}{2!} \left[|D|^2 \cdot \zeta_w^2 |D| + |D| \cdot \zeta_w^2 |D|^2 - 2|D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \right], \\
 G_3 &= \frac{1}{3!} \left[\left(|D|^3 \cdot \zeta_w^3 |D| + |D| \cdot \zeta_w^3 |D|^3 \right) - 2|D|^2 \cdot \zeta_w^3 |D|^2 + 3 \left(|D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w^2 |D|^2 + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + |D|^2 \cdot \zeta_w^2 |D| \cdot \zeta_w |D| \right) - 3 \left(|D| \cdot \zeta_w (D\zeta_w)^2 |D| + |D| \cdot (D\zeta_w)^2 \zeta_w |D| \right) - \right. \\
 &\quad \left. - 6|D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \right], \\
 G_4 &= \frac{1}{4!} \left[2 \left(|D| \cdot \zeta_w^4 |D|^4 + |D|^4 \cdot \zeta_w^4 |D| \right) + 3 \left(|D|^2 \cdot \zeta_w^4 |D|^3 + |D|^3 \cdot \zeta_w^4 |D|^2 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + 4 \left(|D|^3 \cdot \zeta_w^3 |D| \cdot \zeta_w |D| + |D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w^3 |D|^3 \right) + 6|D|^2 \cdot \zeta_w^2 |D| \cdot \zeta_w^2 |D|^2 - \right. \\
 &\quad \left. - 12 \left(|D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w^2 |D|^2 \cdot \zeta_w |D| + |D| \cdot \zeta_w |D|^2 \cdot \zeta_w^2 |D| \cdot \zeta_w |D| \right) - \right. \\
 &\quad \left. - 12 \left(|D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w^2 |D|^2 + |D|^2 \cdot \zeta_w^2 |D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \right) - \right. \\
 &\quad \left. - 24 \left(|D| \cdot (D\zeta_w)^2 \zeta_w^2 |D|^2 + |D|^2 \cdot \zeta_w^2 (D\zeta_w)^2 |D| \right) - \right. \\
 &\quad \left. - 24|D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \cdot \zeta_w |D| \right],
 \end{aligned} \tag{10}$$

где операторы D и $|D|$ действуют на все выражение, стоящее справа от них.

Формально с помощью рекуррентной формулы (9) можно получить и следующие члены операторного ряда, однако приведение их к каноническому виду с симметричной самосопряженной структурой требует чрезвычайно громоздких преобразований.

Таким образом, использование асимптотического ряда $\sum_j \varepsilon^j G_j(\zeta_w) \psi^s$ для неканонических переменных трансформирует гамильтониан (4) и уравнения Гамильтона (2), (3) к виду

$$H = \frac{1}{2} \rho \iint_{(s_0)} \left[\psi^s \sum_j \varepsilon^j G_j(\zeta_w) \psi^s + g \zeta_w^2 \right] d\bar{x}, \tag{11}$$

$$\left. \begin{aligned}
 \frac{\partial \zeta_w}{\partial t} &= \sum_j \varepsilon^j G_j(\zeta_w) \psi^s, \\
 \frac{\partial \psi^s}{\partial t} &= -g \zeta_w - \frac{1}{2} (\tilde{\nabla} \psi^s)^2 + \frac{1}{2} \left[(\tilde{\nabla} \zeta_w \cdot \tilde{\nabla} \psi^s) + \sum_j \varepsilon^j G_j(\zeta_w) \psi^s \right]^2 \left[1 + (\tilde{\nabla} \zeta_w)^2 \right]^{-1}.
 \end{aligned} \right\} \tag{12}$$

Подчеркнем, что получить уравнения (12) прямыми вариациями гамильтониана (11), к сожалению, практически невозможно из-за довольно сложной дифференциальной структуры операторов $G_j(\zeta_w)$ согласно (10).

Приведенные зависимости являются более общими, чем при использовании Фурье-трансформант в явном виде, однако и они не применимы для сильно нелинейных волн, поскольку операторы $G_j(\zeta_w)$ содержат степени волновых ординат ζ_w^m и особенно степени градиентов $(\tilde{\nabla} \zeta_w)^m$, которые с увеличением порядка нелинейности волн начинают резко возрастать, что нарушает сходимость ряда для оператора $G(\zeta_w)$. При опрокидывании гребня сильно нелинейной волны вообще $|\tilde{\nabla} \zeta_w| \rightarrow \infty$ и в окрестности гребня фактически формируется особенность.

Данный подход можно назвать дифференциальным из-за формы представления результирующих зависимостей (10), которые включают градиенты волновой поверх-

ности $\tilde{\nabla}\zeta_w$. Отметим ещё, что элементы дифференциального подхода рассматривались также в работах [2, 9].

Таким образом, проблема исключения неканонической переменной w^s из гамильтониана и уравнений Гамильтона в принципе решена для слабо нелинейных волн, хотя и связана с довольно громоздкими формулами для соответствующих зависимостей в приближениях по нелинейности. Однако эта проблема остается актуальной для сильно нелинейных волн, для которых при укрупнении гребней волн градиенты волнового склона резко возрастают, а насыщенность волнового профиля кратными связанными гармониками оказывается достаточно сильной. Из-за этого спектральные разложения и асимптотические ряды описанного выше типа являются мало эффективными и нужны другие подходы и методы, один из которых и рассмотрен ниже.

Сильно нелинейные волны

Как было сказано выше, сильно нелинейные волны характеризуются большими градиентами волновой поверхности, для них не применим метод суперпозиции, и поэтому попытаемся получить другие выражения для вертикальной проекции скорости $w^s = (\varphi_z)^s$. С этой целью проинтегрируем уравнение неразрывности поля скоростей $\varphi_{zz} + \tilde{\nabla}^2\varphi = 0$ по вертикальной координате z в пределах $(-\infty; \zeta_w]$, что приводит к зависимостям

$$w^s = (\varphi_z)^s = - \int_{-\infty}^{\zeta_w} \tilde{\nabla}^2\varphi dz = \left((\tilde{\nabla}\varphi)^s \cdot \tilde{\nabla}\zeta_w \right) - \tilde{\nabla} \cdot \int_{-\infty}^{\zeta_w} \tilde{\nabla}\varphi dz, \quad (13)$$

где, напомним, $\tilde{\nabla}\varphi = (v_x, v_z)$ и имеет место соотношение $(\tilde{\nabla}\varphi)^s = \tilde{\nabla}\psi^s - w^s\tilde{\nabla}\zeta_w$.

Зависимости в (13) содержат объемный потенциал φ (или его градиенты по координатам в плоскости тихой воды) под знаком интегралов и для его определения используем классическую интегральную формулу Грина, которую запишем в виде [21]

$$\varphi(p, t) = \frac{1}{4\pi} \iint_{(Z_w)} \left\{ \varphi_n(p^s, t)G(p, p^s) - \varphi(p^s, t)G_n(p, p^s) \right\} dZ_w(p^s), \quad (14)$$

где $p(\vec{x}, z)$ – заданная точка в области жидкости; $p^s(\vec{\xi}, \zeta = \zeta_w)$, $\vec{\xi} = (\xi, \eta)$ – текущая точка на волновой поверхности $Z_w(p^s) = \zeta_w(\xi, \eta, t) - \zeta = 0$; $G(p, p^s) = R^{-1}(p, p^s)$ – простейшая функция Грина краевой задачи для потенциала волновых движений [18,21] – величина, обратная расстоянию между точками в области и на волновой поверхности, и индекс n указывает на производную по внешней нормали \vec{n} к поверхности Z_w .

Если выразить все величины в правой части уравнения (14) через поверхностные величины w^s и ψ^s , а затем подставить выражение для потенциала в соотношение (13), то окончательно получим следующее линейное интегральное уравнение относительно «лишней» переменной w^s

$$w^s(\vec{x}) - \frac{1}{4\pi} \iint_{(S_o)} w^s(\vec{\xi})\Gamma_w(\vec{x}, \vec{\xi})d\vec{\xi} = \frac{1}{4\pi} \iint_{(S_o)} \Gamma_\psi(\vec{x}, \vec{\xi})\psi^s(\vec{\xi})d\vec{\xi}, \quad (15)$$

где ядра Γ_w, Γ_ψ имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_w(\vec{x}, \vec{\xi}) &= [1 + (\tilde{\nabla}_\xi\zeta_w)^2](G_z)^s, \\ \Gamma_\psi(\vec{x}, \vec{\xi}) &= [(\tilde{\nabla}_\xi\zeta_w \cdot \tilde{\nabla}_\xi(G_z)^s) - \partial(G_z)^s/\partial\zeta_w(\vec{\xi})] - \\ &\quad - (G_z)^s(\tilde{\nabla}_\xi\zeta_w \cdot \tilde{\nabla}_\xi), \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

и $(G_z)^s = [\zeta_w(\bar{\xi}) - \zeta_w(\bar{x})] / [(\xi - x)^2 + (\eta - y)^2 + [\zeta_w(\bar{\xi}) - \zeta_w(\bar{x})]^2]^{3/2}$, оператор Гамильтона $\tilde{\nabla}_\xi$ действует по переменным $\bar{\xi}$ и для краткости записи зависимость гидродинамических характеристик волн от времени не указана.

Крупномасштабная компонента ветрового волнения является слабо трехмерной, так что зависимость гидродинамических характеристик волн вдоль гребней (т.е. по поперечной координате y) примерно на порядок медленнее, чем по продольной координате x в направлении бега волн, и поэтому уравнение (15) допускает существенные упрощения. В предельном приближении плоских волн можно ввести комплексные переменные $\mathfrak{E} = x + iz$, $\mathfrak{E} = v_x - iv_z$ и использовать для поля скоростей интегральную формулу Коши [18]

$$\mathfrak{E}(\mathfrak{E}) = -\frac{i}{2\pi} V.P. \int_{Z_w} \frac{\mathfrak{E}(\xi)}{\xi - \mathfrak{E}} d\xi, \quad (17)$$

где теперь Z_w – уравнение волнового профиля в области определения волновых движений $\xi = \zeta + i\zeta_w$, $z < \zeta_w$ и также берется главное значение интеграла (17).

Тогда, если разделить в (17) действительную и мнимую части, подставить полученные выражения для проекций волновых скоростей в первую форму зависимости (13) и проинтегрировать по вертикальной координате, то снова получим интегральное уравнение относительно неканонической переменной w^s , которое приводится к виду

$$w^s(x) - \frac{1}{2\pi} \int_{(L)} w^s(\xi) \Gamma_w(\xi, x) d\xi = \frac{1}{2\pi} \int_{(L)} \psi^s(\xi) \Gamma_\psi(\xi, x) d\xi, \quad (18)$$

где теперь ядра Γ_w, Γ_ψ имеют вид

$$\Gamma_w(\xi, x) = \frac{\Delta\zeta_w(1 + \zeta_{wx}^2)}{(\Delta\zeta_w^2 + \Delta x^2)^2}, \quad \Gamma_\psi(\xi, x) = \frac{\Delta x - \Delta\zeta_w\zeta_{wx}}{(\Delta\zeta_w^2 + \Delta x^2)^2}, \quad (19)$$

и также $\Delta x = x - \xi$, $\Delta\zeta_w = \zeta_w(x) - \zeta_w(\xi)$, а L – длина интервала интегрирования.

При $\xi \rightarrow x$ ядра интегралов (19) определяются следующими асимптотиками $\Gamma_w(\xi, x) \rightarrow \zeta_{wx} / |\Delta x|$, $\Gamma_\psi(\xi, x) \rightarrow (1 - \zeta_{wx}^2) / [(1 + \zeta_{wx}^2) |\Delta x|]$. Поскольку при $|\zeta_{wx}| \rightarrow \infty$ также и $w^s \rightarrow 0$, то укрупнение переднего фронта ветровой волны не порождает особенности в уравнении (18.) Решение (18) можно искать, например, методом резольвентных ядер [22].

Таким образом, в рамках соотношения (13) для получения явной зависимости $w^s(\psi^s, \zeta_w)$ необходимо решать интегральные уравнения (15) для трехмерных волн или (18) для плоских волн. Следовательно, в общем случае связь между переменной w^s и каноническими переменными (ψ^s, ζ_w) является нелокальной и ее присоединение к дифференциальным уравнениям Гамильтона (12) трансформирует задачу в интегродифференциальную. Полученные выше дифференциальные соотношения для зависимости $w^s(\psi^s, \zeta_w)$ в виде асимптотических рядов являются по сути аппроксимацией интегральных зависимостей, поскольку с возрастанием порядка возмущения возрастают и порядки старших производных от канонических переменных, расчет которых при конечно-разностной их интерпретации требует привлечения все большего семейства точек в окрестности расчетной точки.

Отметим еще, что в работе [11] также был разработан интегральный метод, основанный на рекуррентном решении линейных краевых задач для потенциалов в воз-

мушениях в процессе исключения неканонической переменной. Однако и этот метод также требовал использования рядов Фурье, асимптотических разложений и рядов Тейлора, что возможно только для слабо нелинейных волн на воде.

Периодические стационарные модели нелинейных волн на воде

Наиболее простыми являются периодические стационарные модели нелинейных волн на воде. Это в первую очередь классическая модель свободных волн Стокса [18], а также периодическая модель ветровых волн, полученная недавно автором [23]. В таких моделях пренебрегается обменом энергией между кратными равновесными гармониками, а также появляется возможность связать независимые переменные в фазовую координату $\theta(x, t)$

$$\theta(x, t) = k(x + ct), \quad c = c_0 \left(1 + \frac{1}{2} \delta_w^2 + \frac{1}{8} \delta_w^4 + O(\delta_w^6) \right),$$

где обозначено $c_0 = \sqrt{g/k} = \sqrt{g\lambda/2\pi}$ – фазовая скорость линейного приближения, $\delta_w = \pi h_w/\lambda$ – крутизна волнового склона, h_w, λ – высота и длина волн.

Для волн Стокса крутизна волны $h_w/\lambda \leq 1/7$, а для ветровых волн примерно $h_w/\lambda \leq 1/9$ из-за эффекта укручивания и опрокидывания гребней волн.

Полезно рассмотреть канонические и неканонические переменные для этого класса моделей волн на воде. Асимптотические разложения в ряды по степеням малого параметра – крутизны волн, а также численные расчеты показали следующее. На рис. 2 приведен профиль и продольный градиент волны Стокса с крутизной $1/8$, т.е. близкой к предельной (на оси абсцисс указаны номера точек дискретизации). Для предельной крутизны $1/7$ на гребне сформируется угловая точка, а в градиенте возникнет разрыв первого рода. Таким образом, в уравнениях Гамильтона в этой точке будет иметь место особенность. На рис. 3, 4 показаны поверхностные значения потенциала и вертикальной скорости, рассчитанные асимптотическими и численными методами. Как видно, независимые методы дают близкие результаты и, кроме того, нет тенденции к формированию особенности для данных величин в окрестности гребня волны.

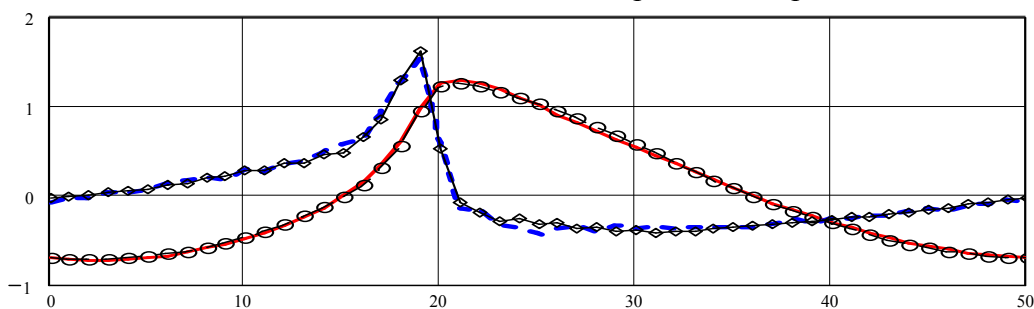


Рис. 2. Профиль периодической волны Стокса $2\zeta_w/h_w$ и ее продольный градиент ζ_{wx}/δ_w ($\diamond \diamond \diamond \diamond$)

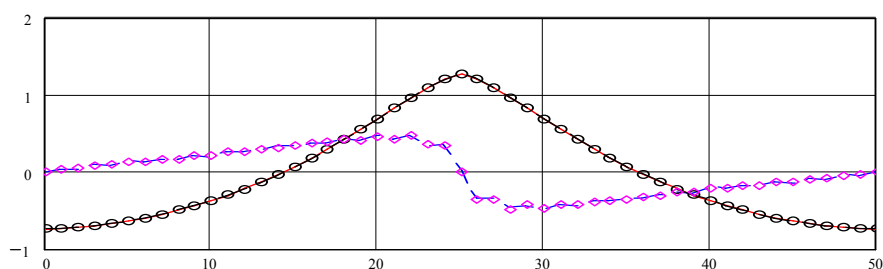


Рис. 3. Поверхностный потенциал $\psi^s/(c_0 h_w/2)$ на основе асимптотических оценок (-----) и ($\times \times \times \times$), а также численных расчетов методом полуобратной задачи [23] ($\circ \circ \circ \circ$) для волны Стокса

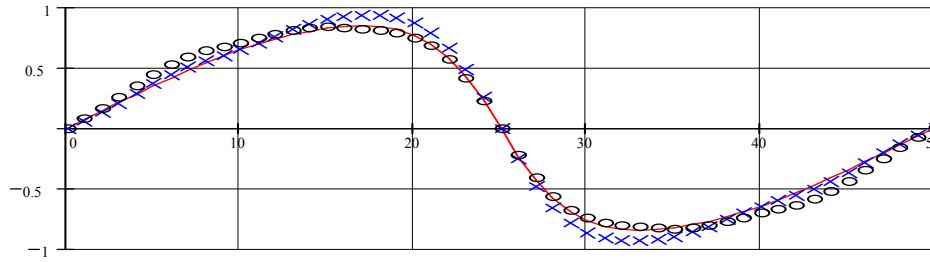


Рис. 4. Вертикальная скорость $w^s / (c_0 \delta_w)$ на основе асимптотических оценок (-----) и (+ + + +), а также численных расчетов методом полуобратной задачи [23] (o o o o) для волны Стокса

На рис. 5 показаны профиль и его продольный градиент для периодической ветровой волны также с крутизной $1/8$. Как видно, с увеличением степени укрупненности переднего фронта волны в градиенте возникнет разрыв второго рода и соответствующая особенность в уравнениях Гамильтона. Далее на рис. 6 приведены результаты численных расчетов поверхностных значений продольной и вертикальной проекций скоростей и продольного градиента потенциала. Мелкие осцилляции на графиках связаны с численными расчетами на основе дифференциальных соотношений [23] и при удержании в волновом профиле не более 25 кратных гармоник. Как видно, в вертикальной скорости и градиенте потенциала имеют место резкие изменения значений в окрестности переднего фронта волны и здесь также поэтому можно ожидать формирования особенности при полном опрокидывании гребня волны.

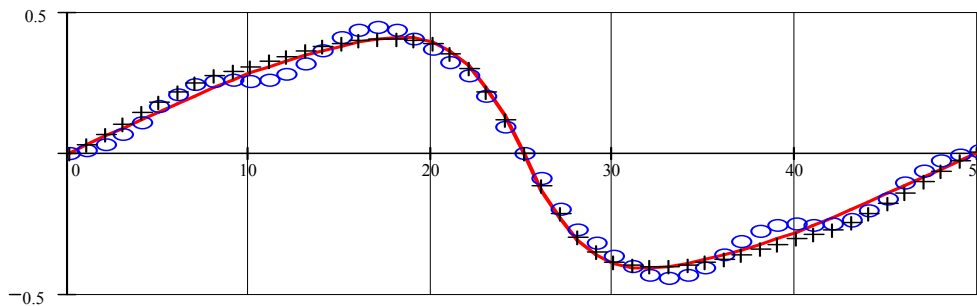


Рис. 5. Профиль периодической ветровой волны $2\zeta_w / h_w$ и ее продольный градиент ζ_{wx} / δ_w (o o o o o o)

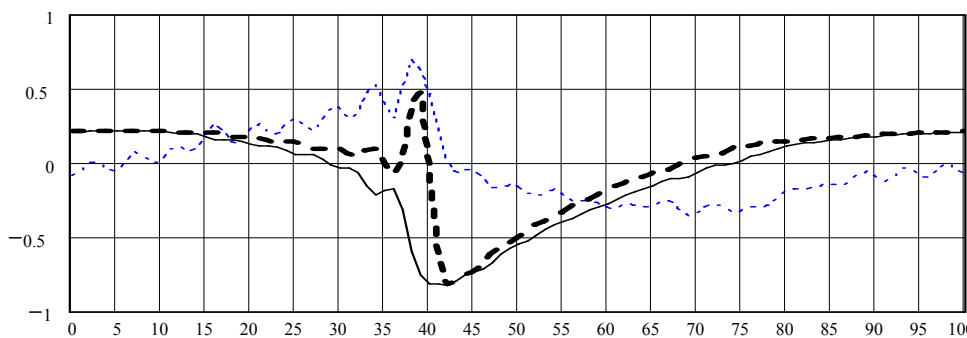


Рис. 6. Поверхностные значения продольной скорости $v_x^s / (c_0 \delta_w)$ (—), вертикальной скорости $v_z^s / (c_0 \delta_w)$ (· · · · ·) и градиента потенциалу $\psi_x^s / (c_0 h_w / 2)$ (----) в периодической ветровой волне

Таким образом, для сильно нелинейных моделей волн, для которых на гребнях волн могут формироваться угловые точки (волны Стокса) или гребни могут опрокиды-



ваться (ветровые волны), в уравнениях Гамильтона следует ожидать появление особенностей в окрестности гребней волн. Эти особенности не только будут усложнять процедуры исключения неканонической переменной из уравнений Гамильтона, но и создавать дополнительные трудности при решении самих уравнений.

Заключение

В работе рассмотрен один из аспектов применения гамильтоновского формализма к исследованию гидродинамики нелинейных ветровых волн на воде – исключение неканонических переменных из гамильтониана и уравнений Гамильтона. Как оказалось, эта, вообще говоря, техническая процедура существенно связана со степенью нелинейности волн и порождает достаточно громоздкие алгоритмы. В основном разработанные методы применимы для слабо нелинейных волн, когда можно еще использовать спектральный анализ для нерегулярных волновых полей. При переходе к сильно нелинейным волнам определенные надежды можно возлагать на использование интегральных уравнений, определяющих нелокальную связь между каноническими и неканоническими переменными. Численные расчеты этих переменных даже для сравнительно простых периодических моделей волн (симметричных волн Стокса и укрупненных ветровых волн) указывают на возможные дополнительные трудности, обусловленные формированием особенностей в окрестности гребней предельно крутых волн.

Литература

1. Захаров В.Е. Устойчивость периодических волн конечной амплитуды на поверхности глубокой жидкости // Прикл. матем. и техн. физика. – 1968. – № 2. – С. 86-91.
2. Miles J.W. On Hamilton's principle for surface waves // J. Fluid Mech. – 1977. – Vol. 83. – Part 1. – P. 153-158.
3. Арнольд В.И. Математические методы классической механики. – М.: Наука, 1974. – 432 с.
4. Гантмахер Ф.П. Лекции по аналитической механике. – М.: Наука, 1966. – 300 с.
5. Джакаля Г.Е.О. Методы теории возмущений для нелинейных систем. – М.: Наука, 1979. – 320 с.
6. Захаров В.Е., Кузнецов Е.А. Гамильтоновский формализм для нелинейных волн // Успехи физ. наук. – 1997. – Т. 167, № 11. – С. 1137-1168.
7. Конторович В.М. Линейные и нелинейные волны (элементарное введение в теорию гамильтоновых переменных с приложениями к физике и астрофизике) // Радиофизика и радиоастрономия. – 2001. – Т. 19, № 3. – С. 165-211.
8. Гуленко В.В., Гущин В.В. Гамильтонова формулировка нелинейных динамических уравнений // Доклады АН Украины. – 1994. – № 3. – С. 73-77.
9. Alstrom P. Surface waves. Patterns, Instabilities and Turbulence. – Niels Bohr Institute Publ. – 1999. – 132 p.
10. Benjamin T.B., Olver P.J. Hamiltonian structure, symmetries and conservation laws for water waves // J. Fluid Mech. – 1982. – Vol. 125. – P. 137-185.
11. Dommermuth D.J., Yue D.K.P. A high-order spectral method for the study of nonlinear gravity waves // J. Fluid Mech. – 1987. – Vol. 184. – P. 267-288.
12. Krasitsky V.P. On reduced equations in the Hamiltonian theory of weakly nonlinear surface waves // J. Fluid Mech. – 1994. – Vol. 272. – P. 1-20.
13. Craig W., Groves M.D. Hamiltonian long-wave approximations to the water-wave problem // Wave Motion. – 1994. – Vol. 19, № 4. – P. 367-390.
14. Stiassnie M., Shemer L. On modifications of the Zakharov equation for surface gravity waves // J. Fluid Mech. – 1984. – Vol. 143. – P. 47-67.
15. Зейтунян Р.Х. Нелинейные длинные волны на поверхности воды и солитоны // Успехи физ. наук. – 1995. – Т. 165, № 12. – С. 1403-1456.
16. Монин А.С. О задачах исследования поверхности океана // Изв. АН СССР (Сер. ФАО). – 1985. – Т. 21, № 1. – с. 3-11.
17. Давидан И.Н., Лопатухин Л.И., Рожков В.А. Ветровое волнение как вероятностный гидродинамический процесс. – Л.: Гидрометеиздат, 1978. – 286 с.
18. Buckles J., Hanratty T.J., Adrian R.J. Turbulent flow over large-amplitude wavy surface // J. Fluid Mech. – 1984. – Vol. 140. – P. 27-44.
19. Сердюченко А.Н. Обобщенная модель спектрального представления морского нерегулярного волнения // Вісник ОНМУ. – Одеса: ОНМУ, 2007. – Вип. 22. – С. 69-82.
20. Метод граничных интегральных уравнений / Под ред. Круз Т., Риццо Ф.: Пер. с англ. – М.: Мир, 1978. – 210 с.

21. Трикоми Ф. Интегральные уравнения. – М.: ИЛ, 1960. – 299 с.
22. Сретенский Л.Н. Теория волновых движений жидкости. – М.: Наука, 1977. – 815 с.
23. Сердюченко А.М. Гідродинаміка гранично крутих вітрових хвиль // Доповіді НАН України. – 2001. – № 10. – С. 35-41.

ANALYSIS OF THE STRUCTURE OF HAMILTONIAN FOR NONLINEAR WIND WAVES ON DEEP WATER

A.N. Serdjuchenko

National Shipbuilding University, Gerojev Stalingrada Av., 9, Nikolayev, 54025, Ukraine,
e-mail: san@cte.nk.ukrtel.net

The application of Hamiltonian mechanics into the investigations of hydrodynamics of nonlinear wind waves in open and deep ocean is considered. The main attention has been paid on the problem of excluding of no canonical variable –vertical velocity of surface fluid particles – from the Hamiltonian formulation of the wave problem. Three main approaches are determined in the solution of the problem. The first one may be called as spectral and the second and third approaches – as differential and integral approaches correspondently. It has been shown that excluding technique depends on the nonlinearities degree of the waves and is not trivial anyway (in all cases). Some numerical results for both canonical and non canonical variables in periodic Stokes waves an asymmetric wind waves are considered too. It has been shown the formation of singularity in the vicinity of the wave crests.

Key words: Hamiltonian mechanics, Hamiltonian function, canonical variables, surface water waves, nonlinearity of wave motion.

ОЦЕНКА ЧИСЛА ОГРАНИЧЕННЫХ ЗАПОЛНЕННЫХ КЛАСТЕРОВ С ФИКСИРОВАННОЙ ВЕРШИНОЙ НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЁТКЕ

Е.С. Антонова, Ю.П. Вирченко

Белгород, БелГУ; antonova_e_s@mail.ru; virch@bsu.edu.ru

Дается верхняя оценка числа ограниченных многогранников с заданной величиной площади поверхности, которые не имеют внутренних пустот, сложены из элементарных кристаллических ячеек простой кубической решетки и содержат некоторый фиксированный её узел. Это число играет большую роль в статистической механике решеточных систем и дискретной теории перколяции. Полученная оценка аналогична известной оценке числа ограниченных циклов заданной длины без самопересечений на плоской квадратной решетке.

Ключевые слова: кубическая решетка, ограниченный кластер, верхняя оценка.

1. Введение. В статистической механике [1] и дискретной теории перколяции [2] известен метод кластерного разложения, который позволяет доказывать, в первом случае, существование фазового перехода второго рода в решеточных моделях ферромагнитного типа, а, во втором случае, наличие порога перколяции. Одной из существенных составляющих метода кластерного разложения, является получение оценки числа ограниченных кластеров с заданной величиной площади поверхности, содержащих фиксированную вершину решетки и которые представляют собой связные множества узлов решетки, находящихся в одном и том же фазовом физическом состоянии. Геометрически, они представляются в виде связанных ограниченных многогранников, составленных из элементарных кристаллических ячеек решетки и не содержащих внутренних пустот. Число таких геометрических образований определяет величину комбинаторной энтропии статистической системы, состоящей из узлов кристаллической решетки, которые случайным образом могут находиться в различном фазовом состоянии. Значение комбинаторной энтропии играет решающую роль при формировании физически нового фазового состояния всей системы в целом. Поэтому, её вычисление на основе микроскопического распределения вероятностей в рамках статистической теории фазовых переходов, для системы, испытывающей фазовое превращение, с одной стороны, является главной составляющей при определении термодинамических характеристик, а, с другой стороны, представляет сложную математическую проблему. Впервые на роль комбинаторной энтропии при возникновении фазового превращения указал Пайерлс [3], где было показано существование фазового перехода в двумерной модели Изинга ферромагнитного типа. Его рассуждения были основаны на элементарной оценке числа замкнутых несамопересекающихся контуров, которые могут быть расположены на квадратной решетке таким образом, чтобы они заключали внутри себя некоторую заранее фиксированную вершину решетки. Его рассуждения привели к появлению метода кластерного разложения, сначала, в статистической механике, а, затем, в теории перколяции. В частности, на основе аналогичных рассуждений, в работе [4] было доказано существование фазового перехода в трёхмерной модели Изинга, где была использована оценка числа многогранников с фиксированной величиной поверхности, аналогичная оценке Пайерлса. Однако, в этой работе, такая оценка не доказывалась, а была высказана только общая идея, на основе которой это доказательство может быть получено. В настоящей работе, мы восполняем имеющийся пробел и даём подробное доказательство указанной оценки.

2. Постановка задачи. Пусть Z^3 - множество точек в R^3 с целочисленными декар-

товыми координатами в базисе относительно репера единичных векторов

$$\langle e_1 = \langle 1, 0, 0 \rangle, e_2 = \langle 0, 1, 0 \rangle, e_3 = \langle 0, 0, 1 \rangle \rangle.$$

Пусть на этом множестве введено отношение связности, которое определяется множеством рёбер, получаемом из множества рёбер $\{\{0, e_1\}, \{0, e_2\}, \{0, e_3\}\}$ произвольными трансляциями на Z^3 . Множество Z^3 , снабжённое указанным отношением связности, называется трёхмерной кубической решёткой. Введём множество Γ ограниченных многогранников в R^3 , угловыми точками которых являются точки из Z^3 . Потребуем также, чтобы границы многогранников из Γ были плоскими и представляли собой объединения единичных квадратов с угловыми токами

$$\begin{aligned} & \{\langle i + \alpha, j + \alpha, k \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \{\langle i, j + \alpha, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \\ & \{\langle i + \alpha, j, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \langle i, j, k \rangle \in Z^3 \end{aligned} \quad (1)$$

Другое, эквивалентное определение многогранников из Γ состоит в том, что каждый из них представляет собой объединение единичных кубов с угловыми точками

$$\{\langle i + \alpha, j + \alpha, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \langle i, j, k \rangle \in Z^3$$

Пусть $G \in \Gamma$. Точку, не принадлежащую G будем называть внутренней по отношению к G , если любой непрерывный путь, начинающийся в этой точке и уходящий на бесконечность, обязательно пересекает G . Многогранник из Γ , не содержащий внутренних точек, будем называть заполненным. Множество всех заполненных многогранников будем обозначать $\bar{\Gamma}$.

С каждым единичным кубом, имеющим угловые точки $\{\langle i + \alpha, j + \alpha, k + \alpha \rangle; \alpha \in \{0, 1\}\}, \langle i, j, k \rangle \in Z^3$ свяжем характеризующую его точку $x = \langle i + 1/2, j + 1/2, k + S \rangle$ - центр куба. Множество всех таких характеристических точек совпадает с $Z^3 + x_0, x_0 = \langle 1/2, 1/2, S \rangle$. Класс всех многогранников из $\bar{\Gamma}$, содержащих фиксированную характеристическую точку $x \in Z^3 + x_0$, обозначим $\bar{\Gamma}(x)$. Наконец, множество всех характеристических точек фиксированного многогранника $G \in \Gamma$ будем называть кластером, соответствующим G .

Очевидно, что

$$\bar{\Gamma} = \bigcup_{x \in Z^3 + x_0} \bar{\Gamma}(x)$$

и все классы $\bar{\Gamma}(x), x \in Z^3 + x_0$ находятся во взаимно однозначном соответствии друг с другом. Каждое такое соответствие устанавливается посредством подходящей операции параллельного переноса. По этой причине, в дальнейшем, мы будем интересоваться только множеством $\Gamma^* = \bar{\Gamma}(x_0)$.

Границы многогранников из Γ^* представляют собой замкнутые двусторонние поверхности. Очевидно, что площадь поверхности $\sum(G)$ многогранника $G \in \Gamma^*$, которую мы будем обозначать посредством $|\sum(G)|$ принимает чётные значения из N . Более того, $|\sum(G)| \geq 6$. С топологической точки зрения, для любого значения $r \in N_+$, в классе Γ^* имеются многогранники G , род граничной поверхности $\sum(G)$ которых принимает значение r .

Обозначим посредством Γ_n подмножество многогранников из Γ^* , имеющих одну и ту же площадь поверхности, равную n . Множество Γ^* представляется в виде дизъюнктивного объединения



$$\Gamma^* = \bigcup_{k=3}^{\infty} \Gamma_{2k}.$$

Целью нашей работы будет нахождение верхней оценки числа $|\Gamma_n|$ как функции от $n \in N$.

3. Класс $\Gamma_{n,l}$. Пусть зафиксирована ось e_l . По отношению к этой оси, определим, для данного n и для каждого $l \in N_+$, подкласс $\Gamma_{n,l}$. К этому подклассу отнесём те и только те многогранники из Γ_n , для которых полуось, с началом в точке $\langle 1/2, 1/2, 1/2 \rangle$ и направленная вдоль e_l , имеет в качестве первой (и может быть единственной) точки пересечения с $\Sigma(G)$ точку $x_l = \langle 1/2 + l, 1/2, S \rangle$. Очевидно, что, для значений $l > (n-2)/4 - l = n$, $\Gamma_{n,l}$ пусты, так как, при заданной величине l , минимальной площадью поверхности обладает параллелепипед, два торца у которого перпендикулярны оси e_l и имеют единичную площадь. При этом четыре параллельных ребра, соединяющих эти торцы, имеют длину $(l+1)$, и, поэтому, площадь поверхности такого параллелепипеда равна $[4(l+1) + 2]$.

Имеет место дизъюнктивное разложение

$$\Gamma_n = \bigcup_{l=0}^n \Gamma_{n,l}$$

и, следовательно,

$$|\Gamma_n| = \sum_{l=0}^n |\Gamma_{n,l}|. \quad (2)$$

По этой причине, для получения верхней оценки числа Γ_n , достаточно найти, для каждого $l = 1, \dots, n$, верхнюю оценку числа $|\Gamma_{n,l}|$.

Для получения требуемой оценки, определим класс $\Sigma_{n,l}$ поверхностей, составленных из единичных квадратов с угловыми точками на кубической решётке. Этот класс является более широким по отношению к классу $\{\Sigma(G); G \in \Gamma_{n,l}\}$. Он состоит из специальных двусторонних поверхностей без самопересечений, которые имеют первое (в направлении от точки $\langle 1/2, 1/2, 1/2 \rangle$) пересечение с осью e_l в точке $x_l = \langle 1/2 + l, 1/2, S \rangle$. С топологической точки зрения, эти поверхности являются либо замкнутыми двусторонними поверхностями, либо поверхностями, полученными из таких замкнутых поверхностей посредством вырезания некоторого конечного набора отверстий. Поверхности составлены из единичных квадратов вида (1) и, если они не замкнуты, то для каждой из них, число квадратов входящих в соответствующее объединение равно $(n-l)$. Эти поверхности определяются посредством конструирующего их алгоритма, который описывается в следующем пункте. Этот алгоритм построен таким образом, что множество $\{\Sigma(G); G \in \Gamma_{n,l}\}$ находится во взаимно однозначном соответствии с некоторым подмножеством из $\Sigma_{n,l}$ и, поэтому, $|\Gamma_{n,l}| < |\Sigma_{n,l}|$. Следовательно,

$$|\Gamma_n| < \sum_{l=0}^n |\Sigma_{n,l}|. \quad (3)$$

Нашей целью, теперь, является нахождение подходящей верхней оценки числа $\Sigma_{n,l}$. Эта оценка будет следовать, непосредственно, из алгоритма, конструирующего все поверхности класса $\Sigma_{n,l}$.

4. Оценка числа $\Sigma_{n,l}$. Необходимый нам алгоритм состоит из последовательного построения поверхностей различного уровня $m=0, 1, 2, \dots$. На каждом уровне m поверхности строятся последовательным подклеиванием единичных квадратов. Это подклеивание представляет собой отождествление рёбер подклеиваемого квадрата (по крайней мере, одного) с соответствующим числом рёбер квадратов, которые составляют край уже построенной поверхности предыдущего уровня $(m-1)$ и, возможно, с рёб-

рами уже подклеенных квадратов на уровне m .

Описание алгоритма даётся индукцией по номеру уровня $m \in N_+$. Поэтому, оно распадается на три части:

- 1) должно быть описано начало алгоритма для нулевого уровня;
- 2) должен быть описан индукционный шаг от уровня m к уровню $(m+1)$;
- 3) должен быть описан критерий останова исполнения алгоритма.

1. Началом алгоритма является единственная поверхность нулевого уровня, которая представляет собой единичный квадрат, содержащий точку x_l . По определению, внешняя нормаль этого квадрата направлена по направлению e_l . Она определяет внешнюю сторону квадрата. На квадрате отмечается одно ребро, которое мы называем первым среди рёбер из входящих в состав края этой поверхности нулевого уровня. На контуре, который является краем этого квадрата, задаётся ориентация против часовой стрелки относительно направления e_l .

Заметим, что у каждой поверхности, получаемой в результате подклеивания очередного квадрата на любом уровне построения поверхности, определены внешняя и внутренняя стороны. Внешняя сторона выявляется посредством непрерывного движения по стороне поверхности без пересечения края поверхности, начиная это движение с внешней стороны первого квадрата.

2. Пусть построена поверхность уровня m . На ней, как указано выше, выделены внешняя и внутренняя стороны. Край этой завершённой поверхности уровня m может быть несвязным. Каждая связная компонента края поверхности является простым кусочно-линейным циклом, составленным из последовательности рёбер решётки Z^3 , то есть из пар вида

$$\{\langle i, j, k \rangle, \langle i+1, j, k \rangle\}, \{\langle i, j, k \rangle, \langle i, j+1, k \rangle\}, \text{ либо } \{\langle i, j, k \rangle, \langle i, j, k+1 \rangle\},$$

$\langle i, j, k \rangle \in Z^3$. Причём под несвязными циклами здесь понимаются циклы, не имеющие ни одного общего ребра.

В результате построения поверхности уровня m , на каждой отдельной связной компоненте края этой поверхности имеется отмеченное ребро, которое входит в состав этой компоненты, и на каждой из этих компонент задана ориентация, которая выбирается против часовой стрелки относительно направления наружу из этой поверхности. Кроме того, зафиксирован порядок на множестве всех таких связных компонент края поверхности уровня m . Всё множество рёбер края поверхности $\Sigma^{(m)}$ упорядочено согласно порядку циклов, в которых они находятся, и затем внутри каждого цикла, согласно его ориентации, начиная с первого ребра на каждом из них.

Построим индукционный шаг от уровня m к уровню $(m+1)$, то есть, по заданной поверхности $\Sigma^{(m)}$ уровня m , вместе с зафиксированным порядком на множестве связных компонент её края, а также, вместе с выделенными на каждой связной компоненте края ориентацией обхода и первым рёбром. Поверхность $\Sigma^{(m+1)}$ уровня $(m+1)$ строится вместе с указанием первых рёбер и ориентаций на связных компонентах края этой поверхности. Построение поверхности $\Sigma^{(m+1)}$, как указывалось выше, состоит в последовательном приклеивании некоторого множества единичных квадратов. При приклеивании каждого конкретного квадрата, должно соблюдаться следующее правило. Те его рёбра, несовпадающие с ребром, по которому производится приклеивание, но которые, после приклеивания, совпали с рёбрами уже построенной к данному шагу поверхности, должны быть также приклеены к тем рёбрам, с которыми они совпадают. При такой договорённости, допустимыми для приклеивания квадратами на каждом шаге построения, являются такие, которые приводят к поверхности указанного выше топологического типа. Заметим, что в любом случае, имеется не более трёх возможностей выбора квадрата для приклеивания.



Конструкцию поверхности $\Sigma^{(m+1)}$ определим индукцией по номеру k подклеиваемого квадрата. Поэтому, она состоит из трёх пунктов: указания первого шага, индукционного перехода от одного шага построения к следующему шагу и указания момента остановки построения.

2.1. На первом шаге построения поверхности уровня $(m+1)$, приклеим допустимым образом единичный квадрат к первому ребру α_1 поверхности $\Sigma^{(m)}$. Если ребро α_1 , которое является противоположным в этом квадрате к ребру α_1 , по которому производилось приклеивание, принадлежит краю вновь образуемой поверхности $\Sigma^{(m+1)}$ уровня $(m+1)$, то оно объявляется первым в первом цикле, составляющем этот край. Однако, это ребро может не принадлежать краю поверхности $\Sigma^{(m+1)}$ в том случае, если оно совпало с одним из рёбер края поверхности $\Sigma^{(m)}$. Если реализовалась такая ситуация, то переходим к подклеиванию следующего квадрата. Причём, может быть две ситуации: в первом случае, приклеивание первого квадрата не оставляет свободными ни одно из его рёбер- ни одно из них не может входить в состав края новой поверхности $\Sigma^{(m+1)}$; во втором случае, после подклеивания первого квадрата, некоторые рёбра первого квадрата остались свободными, и подклеивание следующего квадрата осуществляется к первому по порядку на первом цикле свободному в нём ребру.

В первом случае, подклеиванием первого квадрата закончился первый цикл, то есть он приклеился всеми своими рёбрами к поверхности $\Sigma^{(m)}$. Тогда процесс приклеивания допустимым образом новых квадратов к рёбрам первого цикла прекращается и происходит переход к следующему циклу края поверхности $\Sigma^{(m)}$, то есть следующий квадрат подклеивается к первому ребру второго цикла края поверхности $\Sigma^{(m)}$. Если цикл в крае поверхности был при этом единственным, то процесс построения поверхности $\Sigma^{(m+1)}$ заканчивается.

Во втором случае, происходит образование двух новых циклов. Следующий по порядку квадрат лежит в одном из них он считается первым в этом цикле. Для того чтобы реализовать алгоритм в другом цикле, нужно задать в нём первое ребро. Таким мы будем считать ребро с номером, минимальным в порядке следования на рассматриваемом цикле края поверхности $\Sigma^{(m)}$ среди попавших в этот второй из числа вновь образовавшихся циклов.

2.2. Пусть произведено k подклеиваний единичных квадратов к рёбрам края поверхности $\Sigma^{(m)}$. Тогда, $(k+1)$ -й квадрат подклеивается допустимым образом к первому же, по порядку следования, ребру α_k в крае поверхности $\Sigma^{(m)}$, которое принадлежит тому же циклу, где был приклеен предыдущий k -й квадрат.

Если противоположное к α_k ребро α_k приклеиваемого квадрата остаётся свободным, то можно переходить к подклеиванию следующего квадрата.

Если же противоположное ребро α_k также склеивается с каким-то ребром края поверхности $\Sigma^{(m)}$, то, при таком подклеивании, образуются два новых цикла. Дальнейшая подклейка квадратов поверхности $\Sigma^{(m+1)}$ в каждом из них осуществляется таким же образом, как и в соответствующем случае, описанном в п.2.1.

Если подклеиванием k -го квадрата исчерпались все рёбра текущего цикла, то $(k+1)$ -й квадрат является первым в следующем цикле и принцип его подклеивания описан в п.2.1.

2.3. Поверхность $\Sigma^{(m+1)}$ считается построенной тогда, когда все рёбра края поверхности $\Sigma^{(m)}$ перестают входить в состав края поверхности, возникшей после приклеивания очередного квадрата.

3. Остановка алгоритма может произойти по двум причинам. Во-первых, число использованных, в процессе подклеивания, квадратов достигло значения $(n-1)$. Тогда, независимо от того, произошло ли завершение построения поверхности $\Sigma^{(m)}$ текущего уровня m или нет, дальнейшее подклеивание квадратов прекращается. Во-вторых,

подклеивание квадратов прекращается после завершения очередного уровня m построения поверхности $\sum_{n,l}$, если поверхность $\sum^{(m)}$ замкнута, то есть у неё отсутствует край и переход к следующему уровню невозможен.

5. Оценка числа $|\Gamma_{n,l}|$. Из приведенного выше алгоритма построения поверхности класса $\sum_{n,l}$ следует, что для каждого подклеивания квадрата, увеличивающего площадь поверхности на единицу, имеется не более трёх допустимых возможностей. Так как, в процессе конструирования производится $(n-2)$ подклеивания, то в классе $\sum_{n,l}$ имеется не более чем 3^{n-2} поверхностей. Поверхности этого класса, либо не являются замкнутыми, либо обладают площадью поверхности меньшей чем n . Рассмотрим незамкнутые поверхности из $\sum_{n,l}$. Среди них имеются такие, что приклеивание к ним одного квадрата превращает их в замкнутые поверхности, которые имеют площадь, равную n . С другой стороны, для любой замкнутой поверхности, которая является границей многогранника класса $\Gamma_{n,l}$, найдётся единственная незамкнутая поверхность класса $\sum_{n,l}$, обладающая таким свойством.

Для доказательства последнего положения, достаточно построить каждую из поверхностей $\sum(G)$, $G \in \Gamma_{n,l}$ шаг за шагом, согласно описанному алгоритму, до шага когда, в процессе построения, величина площади конструируемой поверхности достигает $(n-1)$. В результате, мы получим поверхность того же топологического типа, что и поверхности из класса $\sum_{n,l}$ и при этом у неё будет одно квадратное отверстие с единичной площадью. Полученная, таким образом поверхность сопоставляется поверхности $\sum(G)$, которая получается из неё однозначно приклеиванием квадрата, недостающего до её замкнутости. При этом, из процесса построения, следует, что различным поверхностям $\sum(G_1)$ и $\sum(G_2)$ с $G_1 \neq G_2$, $G_1, G_2 \in \Gamma_{n,l}$ соответствуют различные поверхности \sum_1 и \sum_2 из $\sum_{n,l}$.

Таким образом, доказано, что имеется инъекция класса $\Gamma_{n,l}$ в класс $\sum_{n,l}$. Следовательно, $|\Gamma_{n,l}| < |\sum_{n,l}|$ и, поэтому, $|\Gamma_{n,l}| \leq 3^{(n-2)}$. Эта оценка не зависит от l . Тогда, из (3) следует, что $|\Gamma_{n,l}| \leq 3^{(n-2)}(n+1) = 3^{(n-2)}(n-2)/4$.

Литература

1. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты. – М. : Мир. – 1971. – 368 с.
2. Меньшиков М.В., Молчанов С.А., Сидоренко А.Ф., Теория перколяции и некоторые приложения, в кн. Итоги науки и техники. сер. теор. вер., мат. стат. и теор. кибер., т.24. --ВИНИТИ: Москва, 1986. – С.53-110.
3. Peierls R. On Ising's Model in Ferromagnetism // Proc.Camb.Phil.Soc. – 1936. – 32. – С.477-481.
4. Добрушин Р.Л. Существование фазового перехода в двумерной и трёхмерной моделях Изинга // Теория вероятностей и её применения. – 1965. – 10. – С. 209-230.

THE ESTIMATION OF THE NUMBER OF BOUNDED FULL CLUSTERS WITH THE FIXED VERTEX ON THE CUBIC LATTICE

E.S. Antonova, Yu.P. Virchenko

Belgorod, BelSU; antonova_e_s@mail.ru; virch@bsu.edu.ru

The upper estimation of the number of bounded polyhedrons having the fixed surface area is done. These polyhedrons have no some internal cavities. They are combined on the basis of elementary crystal cells of simple cubic lattice and they contain a fixed vertex in them. This number plays great role in statistical mechanics of lattice systems and in discrete percolation theory. The estimation obtained is analogous to known estimation of the number of bounded cycles having fixed length without self-intersections on square lattice.

Key words: cubic lattice, bounded cluster, high estimation

ПРОФИЛИ ВНЕДРЕНИЯ, СОЗДАВАЕМЫЕ ИОНАМИ В УСЛОВИЯХ КАНАЛИРОВАНИЯ

С.И. Матюхин

Орловский государственный технический университет
302020, г.Орёл, Наугорское шоссе, 29; e-mail: sim1@mail.ru

Получены аналитические выражения для профилей внедрения, которые создаются ионами, инжектированными в кристаллы в условиях каналирования, и для доли ионов, остановившихся и не остановившихся на заданной глубине проникновения. Показано, что полученные формулы демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментом и могут быть использованы при решении задачи управления глубиной и формой создаваемых ионами профилей внедрения и повреждений, а также для экспрессного определения по экспериментальным данным длины деканалирования ионов и вероятности их захвата в режим каналирования.

Ключевые слова: ионная имплантация, эффект каналирования, профили внедрения.

Введение

В комплексе современных высоких технологий важную роль играет задача управления глубиной и формой создаваемых ионами профилей внедрения и повреждений. Такая задача возникает, например, при разработке новых ядерно-физических методов модификации электрических, физико-химических и механических свойств материалов в современном материаловедении, при конструировании полупроводниковых структур и приборов в современной микро- и нанoeлектронике, а также при решении проблемы радиационных повреждений первой стенки термоядерных реакторов и конструкционных материалов в реакторах на быстрых нейтронах. При этом одним из возможных путей решения этой задачи является использование метода ионной имплантации в сочетании с эффектом каналирования, в связи с чем возникает необходимость как можно более точного определения профилей внедрения и профилей повреждений, создаваемых частицами, инжектированными в кристаллы в условиях каналирования.

В разное время к расчету этих профилей обращались различные авторы [1–5]. Однако в работах [1, 2] для этого использовались функции и величины, полученные путем решения проблемы деканалирования ионов в приближении монотонного набора их поперечных энергий, а в работах [3, 4], несмотря на физическую корректность предлагаемых в них методов, при вычислении профилей внедрения был сделан ряд математических ошибок, что, по-видимому, заставило авторов работы [5] обратиться к численным расчетам.

В настоящей работе на основе подхода, предложенного в работах [3, 4], получены аналитические выражения для профилей внедрения ионов и найдены относительные доли ионов, остановившихся и не остановившихся на заданной глубине проникновения. Показано, что полученные формулы демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментом и могут быть использованы как при решении задачи управления глубиной и формой создаваемых ионами профилей внедрения и повреждений, так и для экспрессного определения по экспериментальным данным длины деканалирования ионов и вероятности их захвата в режим каналирования.

1. Профили внедрения ионов, инжектированных в кристаллы в условиях каналирования

В самом общем случае частица с начальной энергией E_0 , инжектированная в кристалл в условиях каналирования, внедряется на глубине z следующим образом. Двига-

ясь в канале, она достигает глубины $z' \leq z$, на которой деканализует, имея энергию $E(z')$, после чего достигает глубины z , двигаясь в хаотическом режиме. Из этого вытекает следующее общее выражение для профиля внедрения $f(z)$ ионов, инжектированных в кристалл в условиях каналирования [3]:

$$f(z) = \int_0^z f_{ch}(z', E(z')) f_r(z - z', E(z - z')) dz', \quad (1)$$

где $f_{ch}(z, E)$ – плотность вероятности того, что частица, инжектированная в канал с энергией E в точке $z = 0$, деканализует на глубине z , а $f_r(z, E)$ – профиль внедрения частиц, стартовавших с энергией E на глубине $z = 0$ в хаотическом режиме.

В большинстве практически важных случаев функцию $f_r(z, E)$ можно представить в гауссовом виде (см., например, [6–8]):

$$f_r(z, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(E)}} \exp\left\{-\frac{[z - R_p(E)]^2}{2\sigma^2(E)}\right\}, \quad (2)$$

где $R_p(E)$ – проективный пробег, а $\sigma(E)$ – страгглинг.

Если страгглингом частиц можно пренебречь ($\sigma \ll R_p$), эта функция приобретает следующую, наиболее простую форму: $f_r(z, E) \approx \delta(z - R_p(E))$.

Что касается функции $f_{ch}(z, E)$, то она, по сути, представляет собой функцию распределения глубин деканализирования ионов [9], и может быть представлена в виде:

$$f_{ch}(z, E) = [1 - P_{ch}(0)] \delta(z) + \frac{P_{ch}(0)}{R_{ch}(E(z))} \exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{R_{ch}(E(z'))}\right) \theta(z_c - z) + \\ + P_{ch}(0) \exp\left(-\int_0^{z_c} \frac{dz'}{R_{ch}(E(z'))}\right) \delta(z_c - z), \quad (3)$$

где $P_{ch}(z)$ – вероятность того, что частица останется в канале на глубине z , $R_{ch}(E)$ – длина деканализирования ионов, а $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда.

Последнее слагаемое в формуле (3) учитывает тот факт, что частицы, которые, двигаясь в режиме каналирования, снизили свою энергию до критического значения E_c [10], интенсивно деканализируют на глубине z_c , определяемой соотношением:

$$z_c = \int_{E_0}^{E_c} \left(\frac{dE}{dz}\right)^{-1} dE, \quad (4)$$

где dE/dz – полные потери энергии каналированного иона на единице пути. Второе слагаемое отвечает частицам, которые переходят в неориентированную (хаотическую) фракцию на глубине $z < z_c$. Наконец, первое – частицам, которые деканализируют сразу на входе в каналы.

Функции $E(z)$, которые входят в выражения (1) – (3), должны быть получены путем решения относительно E двух уравнений типа (4) (для частиц, движущихся в каналированном и хаотическом режиме), в которых произведена замена: $z_c \rightarrow z$, $E_c \rightarrow E$. При этом для каналированных частиц и для частиц, движущихся в хаотическом режиме, должны быть использованы различные выражения для потерь энергии dE/dz . Поскольку универсальных формул для этих потерь, справедливых во всем диапазоне энергий, не существует, в самом общем случае профили внедрения ионов (1) могут быть найдены только численными методами. Однако аналитические выражения для этих функций могут быть получены при следующем упрощающем допущении [3].



В силу экспоненциального уменьшения с глубиной числа оставшихся в канале частиц, можно считать, что все ионы, покинувшие канал на глубине $0 \leq z < z_c$, покидают его с энергией $E \approx E_0$, а остальные – с энергией $E \approx E_c$.

В этом случае из формул (1), (2) и (3) вытекает следующее аналитическое выражение для профиля внедрения $f(z)$:

$$\begin{aligned}
 f(z) = N^{-1} & \left[\frac{1 - P_{ch}(0)}{\sqrt{2\pi\sigma^2(E_0)}} \exp\left(-\frac{[z - R_p(E_0)]^2}{2\sigma^2(E_0)}\right) + \frac{P_{ch}(0)}{2R_{ch}(E_0)} \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)} + \frac{\sigma^2(E_0)}{2R_{ch}^2(E_0)}\right) \right] \times \\
 & \times \left\{ \theta(z_c - z) \operatorname{erf}\left(\frac{R_p(E_0) + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{z - R_p(E_0) - \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) + \right. \\
 & \left. + \theta(z - z_c) \operatorname{erf}\left(\frac{z_c + R_p(E_0) + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0) - z}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) \right\} + \\
 & + \frac{P_{ch}(0)}{\sqrt{2\pi\sigma^2(E_c)}} \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)} - \frac{[z - z_c - R_p(E_c)]^2}{2\sigma^2(E_c)}\right) \theta(z - z_c),
 \end{aligned} \quad (5)$$

где $\operatorname{erf}(x)$ – интеграл ошибок, а N^{-1} – нормировочный множитель, определяемый из условия нормировки функции $f(z)$ на единицу.

Если страгглингом частиц можно пренебречь ($\sigma \ll R_p$), $f(z)$ равна

$$\begin{aligned}
 f(z) \approx N^{-1} & \left\{ [1 - P_{ch}(0)] \delta(z - R_p(E_0)) + \right. \\
 & + \frac{P_{ch}(0)}{R_{ch}(E_0)} \exp\left[-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right] \theta(z - R_p(E_0)) + \\
 & \left. + P_{ch}(0) \exp\left[-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right] \delta(z - z_c - R_p(E_c)) \right\}.
 \end{aligned} \quad (6)$$

Отсюда, учитывая, что $R_{ch} \ll z_c$, находим:

$$N \approx 1 + P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) \approx 1. \quad (7)$$

Как показывает выражение (6), функция $f(z)$ имеет два максимума, величина и положение которых определены практически с нулевой погрешностью, поскольку эти максимумы образуются частицами, покидающими канал в точках $z = 0$ и $z = z_c$ с энергиями, равными, соответственно, E_0 и E_c . Что касается значений функции $f(z)$ в интервале $R_p(E_0) < z < R_p(E_c) + z_c$, то погрешность δ выражения (5) по отношению к точной формуле (1) не превышает в нем значения [3]

$$\delta \approx \exp\left[-\frac{R_p(E_0) - R_p(E_c)}{2R_{ch}(E_0)}\right], \quad (8)$$

и поскольку всегда имеет место неравенство $R_p(E) \ll R_{ch}(E)$, величина $\delta \ll 1$.

В качестве примера на рис. 1 изображены рассчитанные по формуле (5) профили внедрения ионов криптона с энергией 40, 80 и 120 кэВ, инжектированных в условиях каналирования в направлении $\langle 100 \rangle$ монокристалла алюминия. Сравнение этих расчетов с экспериментальными данными [11] будет произведено ниже, на рис. 2.

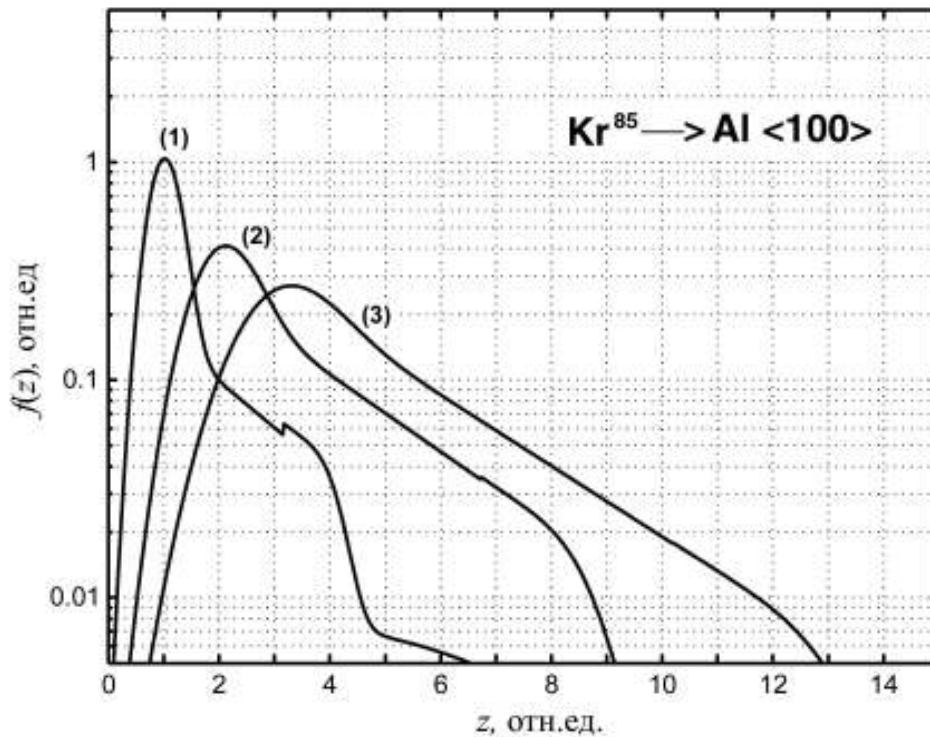


Рис. 1. Профили внедрения ионов Kr^{85} с энергией 40, 80 и 120 кэВ, инжектированных в условиях каналирования в направлении $\langle 100 \rangle$ монокристалла алюминия. Кривая (1) соответствует энергии ионов, равной 40 кэВ, (2) – 80 кэВ, (3) – 120 кэВ. На кривой (1) отчетливо виден второй максимум, образованный частицами, покидающими каналы на глубине $z_c \approx 79$ нм

2. Доля ионов, остановившихся и не остановившихся на заданной глубине проникновения

Зная функцию $f(z)$, определяющую профиль внедренных ионов, в силу ее нормировки легко найти долю частиц $F(z)$, инжектированных в кристаллы в условиях каналирования и остановившихся на глубине проникновения, меньшей или равной z :

$$F(z) = \int_0^z f(z') dz' . \quad (9)$$

Отсюда полная вероятность $P(z)$ того, что инжектированная в кристалл частица достигнет глубины, большей, чем z (то есть не остановится на глубине z), равна

$$P(z) = 1 - F(z) = 1 - \int_0^z f(z') dz' . \quad (10)$$

Считая, что профиль внедренных ионов $f(z)$ определяется выражением (5), из формулы (10) находим следующее громоздкое, но достаточно точное аналитическое выражение для доли ионов, не остановившихся на заданной глубине проникновения:

$$P(z) = 1 - N^{-1} \left\{ \frac{1 - P_{ch}(0)}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{R_p(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{z - R_p(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}} \right) \right] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{P_{ch}(0)}{2} \exp\left(\frac{\sigma^2(E_0)}{2R_{ch}^2(E_0)}\right) \left\{ \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{R_p(E_0) + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{\sqrt{2\sigma^2(E_0)}}\right) \right] \times \right. \\
& \times \left[\exp\left(-\frac{\sigma(E_0)}{\sqrt{2}R_{ch}(E_0)} - \frac{\sigma^2(E_0)}{R_{ch}^2(E_0)}\right) - \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) \right] \theta(z - R_p(E_0) - \sigma(E_0)) + \\
& + \left. \left[\exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) - \exp\left(-\frac{z_c - \sigma(E_0)/\sqrt{2} + \sigma^2(E_0)/R_{ch}(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) \right] \theta(z - z_c) \right\} + \\
& + \frac{P_{ch}(0)}{2} \exp\left(-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{z - R_p(E_c) - z_c}{\sqrt{2\sigma^2(E_c)}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R_p(E_c)}{\sqrt{2\sigma^2(E_c)}}\right) \right] \theta(z - z_c) \}.
\end{aligned} \tag{11}$$

При $\sigma \ll R_p$ это выражение переходит в формулу:

$$P(z) \approx \begin{cases} 1 & \text{при } z < R_p(E_0), \\ P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) & \text{при } R_p(E_0) \leq z < z_c + R_p(E_c), \\ P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) - P_{ch}(0) \exp\left\{-\frac{z_c}{R_{ch}(E_0)}\right\} & \text{при } z \geq z_c + R_p(E_c), \end{cases} \tag{12}$$

которую можно также получить из (10), считая, что профиль внедренных ионов $f(z)$ определяется выражениями (6) и (7).

Для легких ионов, торможением которых можно пренебречь, глубина z_c , как правило, много больше их длины деканализирования R_{ch} . При этом из (12) вытекает следующая простейшая формула для $P(z)$ [4]:

$$P(z) \approx \begin{cases} 1 & \text{при } z < R_p(E_0), \\ P_{ch}(0) \exp\left(-\frac{z - R_p(E_0)}{R_{ch}(E_0)}\right) & \text{при } z \geq R_p(E_0). \end{cases} \tag{13}$$

Заключение

На рис. 2 проведено сравнение теоретических расчетов, произведенных по формулам (11) и (13), со ставшими классическими экспериментальными данными [11] по проникновению ионов Kг^{85} с энергией 40 кэВ вдоль главных кристаллографических направлений монокристалла алюминия. Как показывает этот рисунок, построенная теория демонстрирует не только качественное, но и удовлетворительное количественное согласие с экспериментом. При этом следует обратить внимание на то, что качественное поведение функции $P(z)$ хорошо описывают и штриховые линии, соответствующие элементарному выражению (13).

Из рисунка видно, что это выражение может быть использовано для экспрессного определения по экспериментальным данным длины деканализирования ионов и вероятности $P_{ch}(0)$ их захвата в режим каналирования. Однако формула (13) не учитывает деканализирования частиц, энергия которых снизилась до критического значения E_c , и не

воспроизводит реальных профилей внедрения $f(z)$, которые имеют форму, изображенную на рис. 1.

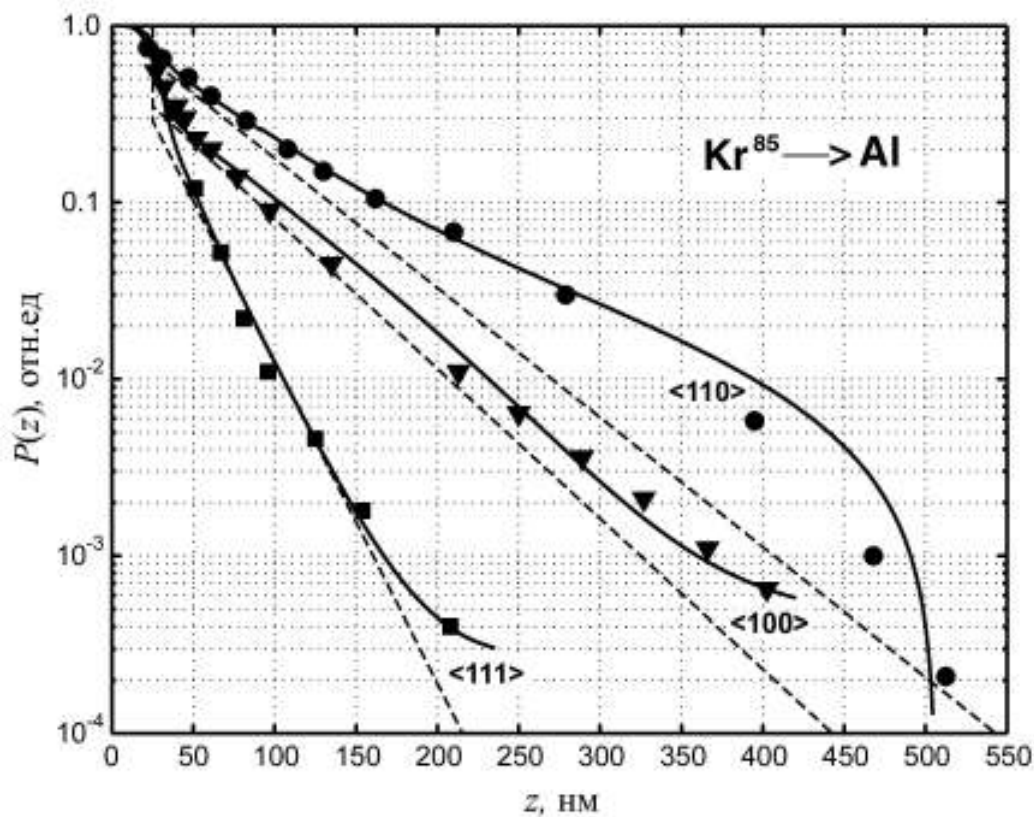


Рис. 2. Проникновение ионов Kr^{85} с энергией 40 кэВ вдоль главных кристаллографических направлений монокристалла алюминия. Сплошные кривые – расчеты по формуле (11), маркеры – экспериментальные данные [11]. Штриховкой изображены кривые, рассчитанные по формуле (13)

Литература

1. Ю.В. Мартыненко. Распределение по глубине проникновения каналированных частиц // ФТТ. – 1971. – Т.13. №9. – С.2580-2586.
2. М.А. Кумахов, В.А. Муралев, В.А. Симонов. Пространственное распределение внедренных ионов и радиационных дефектов при учете эффекта каналирования // Труды IV Всесоюзного совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами. – М.: Изд-во МГУ, 1973. С.118–130.
3. В.В. Рожков. Профили внедрения частиц, инжектированных в кристалл в условиях каналирования // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1980. – Вып.2 (13). – С.87-90.
4. В.В. Рожков, П.Б. Руткевич. Теория теплового деканалирования из аксиальных каналов // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1981. – Вып.2 (16). – С.42-49.
5. М.И. Братченко, С.В. Дюльдя, А.С. Бакай. Теория и моделирование имплантации ионов бора в монокристаллы кремния // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники. – 2006. – Вып.1 (15). – С.179-183.
6. В.С. Галишев. Вопросы теории многократного рассеяния частиц. – М.: Атомиздат, 1972.
7. Ю.В. Готт. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. – М.: Атомиздат, 1978.
8. Н.П. Калашников, В.С. Ремизович, М.И. Рязанов. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. – М.: Атомиздат, 1980.
9. V.V. Rozhkov. Theory of Dechanneling // Phys. Stat. Sol. (b). – 1979. – V.96. – P.463-468.
10. С.И. Матюхин. Критические параметры каналирования // ЖТФ. – 2008. – Т. 78. – Вып.12. – С.47-53.



11. G.R. Piercy, M. McCargo, F. Brown, J.A. Davies. Experimental evidence for the channeling of heavy ions in monocrystalline aluminium // *Canad. J. Phys.* – 1964. – V.42. № 6-7. – P.1116-1134.

IMPLANTATION PROFILES PRODUCED BY CHANNELING IONS

S.I. Matyukhin

Orel State Technical University
Naugorskoe shosse, 29, Orel, 302020, Russia; e-mail: *sim1@mail.ru*

The analytical expressions for implantation profiles produced by channeling ions and parts of the ions stopped and not stopped on given depth of penetration are obtained. It's shown, that the obtained formulas are demonstrated the satisfactory agreement with experimental data and can be used both at solution of control problem for depth and shape of ion implantation and damage profiles, and for express definition of dechanneling length and probability of ion invading in channeling mode on experimental data.

Key words: ion implantation, channeling, implantation and damage profiles.

МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА ЦЕРНИКЕ-ПРИНСА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУНКЦИИ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ

П.Н. Жукова, Н.Н. Насонов

Лаборатория радиационной физики, Белгородский государственный университет,
Студенческая 14, Белгород, 308007, Россия. (nnn@bsu.edu.ru)

Предложена модификация метода Цернике – Принса определения функции распределения атомов в веществе, основанная на замене угловых измерений рассеянного изучаемым образцом квазимонохроматического рентгеновского излучения спектральными измерениями рассеянного широкополосного излучения. Показано, что в рамках предлагаемого метода удастся избежать принципиального затруднения метода Цернике–Принса, заключающегося в ограниченности области изменения аргумента измеряемой функции углового распределения рассеянного излучения.

Ключевые слова: Рентгеновские лучи, радиальная функция распределения, метод Цернике-Принса, энергодисперсионный метод.

1. Метод Цернике-Принса (ЦП) основан на восстановлении функции радиального распределения атомов в среде с помощью интегрального уравнения, связывающего искомую функцию с угловым распределением рассеянного мишенью квазимонохроматического рентгеновского излучения, измеряемым в эксперименте [1]. Решение уравнения находится обращением интегрального преобразования Фурье. При этом возникает затруднение, обусловленное определением аргумента измеряемого углового распределения только на конечном интервале. Данное затруднение является принципиальным и не может быть преодолено в рамках метода ЦП.

В настоящей работе предлагается использовать энергодисперсионный подход, основанный на спектральных измерениях рассеянного образцом широкополосного излучения. Показывается, что в рамках данного подхода аргументы входящих в интегральное уравнение функций определены на всей числовой оси. При этом удается избежать искажений функции радиального распределения, присущих методу ЦП.

2. Рассмотрим процесс рассеяния рентгеновской волны в среде атомов. Исходим из уравнений Максвелла для фурье-образа поля в среде

$$(k^2 - \omega^2)\vec{E}_{\omega\vec{k}} - \vec{k}(\vec{k}\vec{E}_{\omega\vec{k}}) = 4\pi i\omega \vec{J}_{\omega\vec{k}} = -\omega^2 \int d^3k G(\vec{k}', \vec{k}) \vec{E}_{\omega\vec{k}'},$$

$$G(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{1}{2\pi^2} \alpha(\vec{k}' - \vec{k}, \omega) \sum_l e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}_l}, \quad \alpha = \alpha_0(\omega) F(|\vec{k}' - \vec{k}|) / Z, \quad \alpha_0 = \frac{e^2}{m} \sum_{n \geq 1} \frac{f_{n0}}{\omega_{n0}^2 - \omega^2}, \quad (1)$$

$\vec{J}_{\omega\vec{k}}$ – фурье-образ плотности индуцированного электронного тока всех атомов среды, функция отклика $G(\vec{k}', \vec{k})$ вычислена в дипольном приближении [2], $\alpha_0(\omega)$ – дипольная атомная поляризуемость, f_{n0} – сила осциллятора для перехода $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$, $\omega_{n0} = E_n - E_0$ – разность энергий уровней атома, $F(|\vec{k}' - \vec{k}|)$ – атомный формфактор, Z – число электронов в атоме, \vec{r}_l – координата ядра l -ого атома. Разделяя функцию $G(\vec{k}', \vec{k})$ на сумму усредненной и флуктуационной составляющих

$$G(\vec{k}', \vec{k}) = \bar{G}(\vec{k}', \vec{k}) + \tilde{G}(\vec{k}', \vec{k}), \quad \bar{G}(\vec{k}', \vec{k}) = \langle G(\vec{k}', \vec{k}) \rangle = 4\pi n_0 \alpha_0(\omega) \delta(\vec{k}' - \vec{k}), \quad (2)$$



где n_0 – атомная плотность мишени, сводим (1) к уравнению

$$(k^2 - \omega^2 \varepsilon(\omega)) \vec{E}_{\omega \vec{k}} = -\omega^2 \int d^3 k' \tilde{G}(\vec{k}', \vec{k}) (\vec{E}_{\omega \vec{k}'} - \vec{k} \frac{\vec{k}' \vec{E}_{\omega \vec{k}'}}{\omega^2 \varepsilon(\omega)}), \quad (3)$$

в котором преломляющие свойства среды описываются следующей из (2) диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi n_0 \alpha_0(\omega) = 1 + \chi(\omega)$ ($\chi(\omega)$ – диэлектрическая восприимчивость среды).

Решение (3) следует искать итерациями. Полагая $\vec{E}_{\omega \vec{k}} = \vec{E}_{\omega \vec{k}}^{(i)} + \vec{E}_{\omega \vec{k}}^{(s)}$, где первое слагаемое описывает падающую волну, удовлетворяющую уравнению (3) в нулевом приближении по $\tilde{G}(\vec{k}', \vec{k})$, а второе слагаемое соответствует рассеянной волне удовлетворяющей уравнению (3) в первом порядке по $\tilde{G}(\vec{k}', \vec{k})$. Обсуждаемые слагаемые имеют вид:

$$\begin{aligned} \vec{E}_{\omega \vec{k}}^{(i)} &= \vec{e}_i E_\omega \delta(\vec{k} - \omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} \vec{n}_i), \quad \vec{e}_i \vec{n}_i = 0, \\ \vec{E}_{\omega \vec{k}}^{(s)} &= -\frac{\omega^2}{k^2 - \omega^2 \varepsilon(\omega)} E_\omega (\vec{e}_i - \vec{k} \frac{\vec{k} \vec{e}_i}{\omega^2 \varepsilon(\omega)}) \tilde{G}(\omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} \vec{n}_i, \vec{k}), \end{aligned} \quad (4)$$

где \vec{e}_i – вектор поляризации падающей некогерентной волны, спектр которой описывается амплитудой E_ω , \vec{n}_i – единичный вектор в направлении распространения падающей волны.

Следующее из (4) выражение для спектрально-углового распределения рассеянного излучения имеет вид

$$\omega \frac{dN^{(s)}}{d\omega d\Omega} = 4\pi^4 \omega^4 |E_\omega|^2 (1 - (\vec{n}_s \vec{e}_i)^2) \langle |\tilde{G}(\omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} \vec{n}_i, \omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} \vec{n}_s)|^2 \rangle, \quad (5)$$

где \vec{n}_s – единичный вектор в направлении распространения рассеянной волны, скобки $\langle \rangle$ означают усреднение по положениям атомов в среде. При усреднении следует использовать формулу

$$\begin{aligned} &\langle \sum_l \sum_m \exp(i\omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} (\vec{n}_i - \vec{n}_s) \cdot (\vec{r}_l - \vec{r}_m)) \rangle = N + \\ &\sum_l \sum_{m \neq l} \int d^3 r_l d^3 r_m f_2(\vec{r}_l, \vec{r}_m) \exp(i\omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} (\vec{n}_i - \vec{n}_s) \cdot (\vec{r}_l - \vec{r}_m)), \end{aligned} \quad (6)$$

где N – число атомов в мишени, $f_2(\vec{r}_l, \vec{r}_m)$ – двухчастичная функция распределения атомов, которую можно представить в виде суммы произведения одночастичных функций $f_1(\vec{r}_l) = 1/V$ (V – объем мишени, мишень предполагается однородной) и парной корреляционной функции $g(|\vec{r}_l - \vec{r}_m|)$, убывающей с ростом аргумента [3]. Подстановка (6) в (5) приводит к окончательному виду выражения для плотности рассеянного излучения

$$\begin{aligned} \frac{dN^{(s)}}{d\omega d\Omega} &= \frac{N}{Z^2} (1 - (\vec{n}_s \vec{e}_i)^2) \omega^3 |E_\omega|^2 F^2(2\omega \sqrt{\varepsilon(\omega)} \sin(\vartheta/2)) |\alpha_0(\omega)|^2 \times \\ &[1 - \frac{2\pi}{\omega \sqrt{\varepsilon} \sin(\vartheta/2)} \int_0^\infty dr r (n_0 - n(r)) \sin(2\omega \sqrt{\varepsilon} r \sin(\vartheta/2))], \end{aligned} \quad (7)$$

где введены угол рассеяния ϑ по формуле $|\vec{n}_i - \vec{n}_s| = 2 \sin(\vartheta/2)$ и функция радиального распределения атомов $n(r)$ по формуле $n_0 g(r) = (n(r) - n_0)/V^2$ [4], стремящаяся с уве-

личением радиуса к средней плотности атомов мишени $n_0 = N/V$. Следует иметь в виду, что в рентгеновском диапазоне частот отличие диэлектрической проницаемости от единицы весьма мало, поэтому в правой части (7) можно положить $\varepsilon(\omega) \approx 1$.

3. Формула (7), рассматриваемая как интегральное уравнение для определения функции радиального распределения $n(r)$, аналогична уравнению ЦП [1]. Как уже отмечалось, для восстановления $n(r)$ в методе ЦП используется угловая зависимость величины $dN^{(S)}/d\omega d\Omega$, измеряемая в эксперименте при фиксированном значении ω . При этом аргумент измеряемой функции $x = 2\omega \sin(\vartheta/2)$ изменяется в конечных пределах $0 < x < 2\omega$, что приводит к искажениям искомой функции $n(r)$, определяемой формулой обращения преобразования Фурье, в которой интегрирование ведется в бесконечных пределах.

Обратим внимание на следующую из (7) возможность определения $n(r)$ по спектральным измерениям рассеянного широкополосного излучения с заданным начальным спектром $|E_\omega|^2$ и фиксированным значением угла рассеяния ϑ . В самом деле, поскольку все входящие в (7) величины определены как функции ω (в настоящее время доступны измеренные в широком диапазоне частот восприимчивости $\chi(\omega)$ для многих веществ [5]), то искомая функция $n(r)$ может быть определена в соответствии со следующей из (7) формулы

$$n(r) - n_0 = \frac{1}{2\pi^2 r_0} \int_0^\infty dx x J(x) \sin(xr), \quad J(x) = \frac{dN^{(S)}/d\omega d\Omega}{dN_0/d\omega d\Omega} - 1, \quad (8)$$

где аргумент x связан с частотой ω приведенным выше соотношением $x = 2\omega \sin(\vartheta/2)$, величина $dN_0/d\omega d\Omega$ совпадает с коэффициентом перед квадратной скобкой в правой части (7), описывающим спектрально-угловое распределение излучения, рассеянного атомами среды независимо (ясно, что с ростом частоты ω коллективные эффекты в рассеянии уменьшаются и измеряемая величина $dN^{(S)}/d\omega d\Omega$ стремится к $dN_0/d\omega d\Omega$). В отличие от результата ЦП, подинтегральная функция $J(x)$ в (8) определена на всей числовой оси, что позволяет избежать искажений искомой функции $n(r)$, возникающих в методе ЦП.

Следует отметить, что схема спектральных измерений при фиксированном положении рентгеновского детектора является более простой по сравнению со схемой угловых измерений в методе ЦП. С другой стороны в рамках предлагаемого подхода возникает необходимость знания восприимчивости мишени и спектрального распределения зондирующего излучения. С учетом последнего требования одним из наиболее подходящих источников зондирующих фотонов является синхротрон, обеспечивающий высокую интенсивность излучения и возможность точного расчета его характеристик.

Литература

1. Zernicke, F. and Prins, J.A., Die Beugung von Röntgenstrahlen in Flüssigkeiten als Effekt der Molekülanordnung. Z. Phys. (1927) 41, pp. 184–195.
2. Король А.В., Лялин А.Г., Соловьев А.В. Поляризационное тормозное излучение. СПб.: Изд. СПбГПУ, 2004. 300 с.
3. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 368 с.
4. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: ИЛ, 1950, 572 с.
5. Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C. Atomic Data and Nuclear Data Tables (1993) V. 54, № 2, pp.181-342.



MODIFICATION OF ZERNICKE-PRINC APPROACH TO DETERMINE THE RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION OF ATOMS IN A DENSE MEDIUM

P.N. Zhukova, N.N. Nasonov

Laboratory of Radiation Physics, Belgorod State University,
14, Studencheskaja str., Belgorod, 308007, Russia.
e-mail: nnn@bsu.edu.ru

The modification of Zernicke-Prins approach to determine the distribution function of atoms in a medium is presented. New approach is based on the replacement of angular measurements of quasi-monochromatic X-rays scattered by a sample on spectral measurements of scattered wideband radiation. The possibility to solve the fundamental problem of Zernicke-Prins approach consisting in a bounded region of argument variations of a measured angular distribution of scattered X-rays is shown in the work.

Key words: X-rays, radial distribution function, Zernicke-Prins approach, energy dispersive X-ray diffraction.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ КАСКАДНОЙ ТЕОРИИ ФРАГМЕНТАЦИИ ПРИ НАРУШЕНИИ САМОПОДОБИЯ ДРОБЛЕНИЯ

Р.Е. Бродский

Институт монокристаллов НАН Украины, 61001, Харьков, Украина

В работе изучен процесс каскадной кинетической фрагментации в случае, когда условная плотность вероятности образования осколков не зависит от времени и обладает свойством $P(\rho, r, t) = P(\rho/r)$. Получено уравнение для предельной при $t \rightarrow \infty$ плотности распределения вероятности числа фрагментов в терминах преобразования Меллина. В частном случае $P(\rho/r) = C(\rho/r)^\alpha$ найдено решение этого уравнения, которое отличается от закона Колмогорова.

Ключевые слова: фрагментация, самоподобие, кинетическое уравнение, финальная плотность распределения.

В настоящей работе исследуется каскадный процесс фрагментации образца материала. Этот процесс является частным случаем каскадных кинетических процессов, изучаемых в различных областях теоретической физики (см., например, [1]). Несмотря на то, что каскадный тип фрагментации является простейшим, и более распространённой в природе является фрагментация, которая не носит каскадный характер, тем не менее, этот тип процессов не является полностью изученным. В частности, не изучен процесс каскадной фрагментации, который не является полностью масштабно инвариантным, в отличие от рассмотренного в классической работе [2]. В настоящем сообщении изучается не масштабно инвариантный процесс фрагментации, аналогичный введённому в работе [3].

Мы описываем процесс фрагментации материала посредством плотности числа частиц $n(r, t)$. Величина $n(r, t)dr$ указывает среднее число фрагментов, имеющих размеры в интервале $(r, r + dr)$ в момент времени t . Процесс фрагментации полностью определяется условной плотностью вероятности $P(\rho, r, t)$ образования осколков фрагментов. А именно, вероятность образования осколка с размером в интервале $(\rho, \rho + d\rho)$ за интервал времени $(t, t + dt)$ при распаде фрагмента размера r равна $P(\rho, r, t)d\rho dt$. Введём также интенсивность распадов фрагментов $\mu(r, t)$ – среднее число распадов фрагментов с размером r в интервале времени $(t, t + dt)$. Эволюция плотности $n(r, t)$ описывается, в терминах указанных величин, на основе кинетического уравнения

$$\dot{n}(r, t) = \int_r^\infty P(r, \rho, t)n(\rho, t)d\rho - \mu(r, t)n(r, t). \quad (1)$$

В статье [4], следуя идее пионерской работы [2], исследовался масштабно инвариантный процесс дробления, у которого вероятность $P(\rho/r)d\rho/r$ образования осколков с размерами в интервале $(\rho, \rho + d\rho)$ из фрагмента с размером r зависит от отношения ρ/r . Соответственно, плотность условной вероятности перехода имеет вид

$$P(\rho, r, t) = \frac{1}{r}P(\rho/r).$$

В данной работе, как и в работе [3], будет рассмотрен процесс дробления с нарушением масштабной инвариантности, которая предполагает наличие выделенного фи-



зического масштаба

$$P(\rho, r, t) = P(\rho/r) \quad (2)$$

в том смысле, что плотность $P(\rho, r, t)$ приобретает размерность обратной длины и, благодаря чему, в теории имеется выделенная величина размерности длины. Следуя работам [3-5], будем учитывать сохранение объёма системы фрагментов

$$V = \int_0^{\infty} r^3 n(r, t) dr = \text{const}. \quad (3)$$

Это свойство приводит к следующему соотношению для интенсивности

$$\mu(r, t) = \int_0^r P(\rho/r) \left(\frac{\rho}{r}\right)^3 d\rho = r \int_0^1 P(x) x^3 dx \equiv \mu r, \quad \mu = \text{const}. \quad (4)$$

Таким образом, мы рассматриваем следующее кинетическое уравнение для плотности числа частиц

$$\dot{n}(r, t) = \int_r^{\infty} P(r/\rho) n(\rho, t) d\rho - \mu r n(r, t). \quad (5)$$

Формула (2) позволяет использовать, для изучения уравнения (5), преобразование Меллина

$$M(s, t) = \int_0^{\infty} r^{s-1} n(r, t) dr.$$

В этом случае $M(1, t) = N(t)$ – число фрагментов в момент времени t ; $M(2, t) = N(t)\lambda(t)$, где $\lambda(t)$ – средний размер фрагмента; $M(3, t) = S(t)$ – суммарная площадь поверхности фрагментов; $M(4, t) = V = \text{const}$ – суммарный объём фрагментов. Применение преобразования Меллина к обоим частям уравнения (5) приводит к уравнению

$$\dot{M}(s, t) = M(s+1, t)(p(s) - \mu), \quad (6)$$

где $p(s) = \int_0^1 x^{s-1} P(x) dx$ и $\mu = p(4)$, согласно (4). В частности, так как

$M(4, t) = V = \text{const}$, то

$$M(3, t) = M(3, 0) + V(p(3) - p(4))t. \quad (7)$$

Нас будет интересовать асимптотическое поведение при $t \rightarrow \infty$ плотности распределения $f(r, t)$. В этом случае можно оставить в последнем выражении только второе слагаемое, $M(3, t) \propto V(p(3) - p(4))t$, $M(3, t) \propto V(p(3) - p(4))t$. Из уравнений (6) и (7) находим

$$M(2, t) \propto \frac{1}{2} V(p(3) - p(4))(p(2) - p(4))t^2 = N(t)\lambda(t), \quad (8)$$

$$M(1, t) \propto \frac{1}{6} V(p(3) - p(4))(p(2) - p(4))(p(1) - p(4))t^3 = N(t). \quad (9)$$

Отсюда следует

$$\lambda(t) \propto \frac{M(2, t)}{M(1, t)} = \frac{3}{p(1) - p(4)} \frac{1}{t} \quad (10)$$

Решение дифференциально-разностного уравнения (6) представляется чрезвычайно сложным в общем случае. Однако, для плотности распределения вероятности $f(r, t) = n(r, t)/N(t)$ фрагментов по размерам, в которой переменная r заменена на $\lambda(t)r$, где $\lambda(t)$ – средний размер, анализ этого уравнения значительно упрощается.

Обозначим посредством $F(s, t)$ преобразование Меллина

$$F(s, t) = \lambda^s(t) \int_0^{\infty} r^{s-1} f(\lambda(t)r, t) dr.$$

плотности распределения $\lambda(t)f(\lambda(t)r, t)$. Вводя замену переменных $r \Rightarrow \lambda(t)r$ в уравнении (5) и вычисляя указанное преобразование Меллина, получим

$$\dot{F}(s, t) = -F(s, t) \frac{d}{dt} \ln \left(\frac{N}{\lambda} \right) - \frac{s}{\lambda} F(s, t) \dot{\lambda} + (p(s)\lambda - \mu\lambda) F(s+1, t). \quad (11)$$

Плотность распределения $\lambda(t)f(\lambda(t)r, t)$ и, соответственно, её преобразование Меллина $F(s, t)$ стремятся $\lambda(t)f(\lambda(t)r, t) \rightarrow f_{\infty}(r)$, $F(s, t) \rightarrow F(s)$ при $t \rightarrow \infty$ к нетривиальным предельным значениям ($\neq 0; \infty$). При этом $\dot{F}(s, t) \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$. Поэтому, при асимптотически больших значениях t , уравнение (11) принимает вид

$$0 = -F(s) \frac{d}{dt} \ln \left(\frac{N}{\lambda} \right) + \lambda(p(s) - \mu) F(s+1) - \lambda \frac{s}{\lambda} F(s). \quad (12)$$

Найдём предельную плотность распределения $f_{\infty}(r)$ для модельной зависимости $P(x)$:

$$P(\rho/r) = C \left(\frac{\rho}{r} \right)^{\alpha}. \quad (13)$$

В этом случае имеем выражения

$$p(s) = \frac{C}{\alpha + s}, \quad \mu = p(4) = \frac{C}{\alpha + 4}.$$

Таким образом, суммарная площадь и средний размер определяются формулами

$$S(t) \propto \frac{CV}{(\alpha + 3)(\alpha + 4)} t, \quad (14)$$

$$\lambda(t) \propto \frac{(\alpha + 1)(\alpha + 4)}{C} t^{-1}, \quad (15)$$

а полное число фрагментов

$$N(t) \propto \frac{C^3 V}{(\alpha + 4)^3 (\alpha + 1)(\alpha + 2)(\alpha + 3)} t^3.$$

Используя (13), преобразуем уравнение (12) как

$$F(s+1) = \frac{\alpha + s}{\alpha + 1} F(s).$$

Решением этого функционального уравнения, удовлетворяющим условию нормировки $F(1, t) = 1$, является

$$F(s) = \frac{\Gamma(\alpha + s)}{\Gamma(\alpha + 1)(\alpha + 1)^{s-1}}.$$

Вычисляя обратное преобразование Меллина, находим предельную плотность распределения по размерам

$$f_{\infty}(r) = \frac{(\alpha + 1)^{\alpha+1} r^{\alpha} e^{-(\alpha+1)r}}{\Gamma(\alpha + 1)},$$

что находится в согласии с результатом работы [3], полученным в случае, когда α – целое число, однако существенно отличается от логарифмически нормального закона Колмогорова.



Литература

1. Bharucha-Reid A.T., Elements of the Theory of Markov Processes and Their Applications. Mc Graw-Hill Book Company, Inc. New York, 1960. 510p.
2. Колмогоров А.Н. // ДАН СССР. 1941. Т. XXXI. №2. С.99-101.
3. Virchenko Yu.P., Brodskii R.E. // Functional Materials. 2003. V.10. N.3. P.378-387.
4. Virchenko Yu.P., Brodskii R.E. // Functional Materials. 2006. V.13. N.1. P.2-13.
5. Сагдеев Р.З., Тур А.В., Яновский В.В. // ДАН СССР. 1987. Т. 294. №5. С.1105-1110.

INVESTIGATION OF THE KINETIC EQUATION OF CASCADE FRAGMENTATION THEORY AT THE BREAKING DOWN OF SELF-CONSISTENT SUBDIVISION

Brodskii R.Ye.

Single Crystal Institute NASU, 61001, Kharkov, Ukraine

The cascade kinetic fragmentation process is investigated when the condition probability density of splinter forming do not depends on time and has the property $P(\rho, r, t) = P(\rho / r)$. It is obtained the equation for the probability distribution density in terms of the Mellin transformation. In the particular case $P(\rho / r) = C(\rho / r)^\alpha$, at the limit in $t \rightarrow \infty$, the solution of this equation is found that is differs from the Kolmogorov law.

Key words: fragmentation, self-similarity, kinetic equation, final distribution density

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НА НИТЕВИДНЫХ МИШЕНЯХ

В.В. Сыщенко, Н.В. Соболева

Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14,
e-mail: syshch@bsu.edu.ru

В работе вычислено сечение рассеяния плоской электромагнитной волны на мишени, представляющей собой линейную цепочку зарядов или сплошную нить. Полученные формулы позволяют дать наглядную интерпретацию недавним результатам, касающимся переходного излучения частиц высоких энергий на нитевидных мишенях различной структуры.

Ключевые слова: электромагнитная волна, частицы высокой энергии, рассеяние, переходное излучение, кристалл, нитевидная мишень, нанотрубка.

Введение

При взаимодействии заряженных частиц высоких энергий с мишенями сложной структуры (таким как ориентированные определенным образом относительно падающего пучка кристаллы или связки углеродных нанотрубок) возникает излучение, характеристики которого открывают новые возможности как в диагностике структуры мишени, так и в создании новых источников излучения.

В работе [1] рассматривалось излучение, возникающее при равномерном движении релятивистской заряженной частицы вблизи тонкой диэлектрической нити под малым углом к ней. Было установлено, что в случае, когда толщину нити можно считать пренебрежимо малой, возникающее излучение обладает симметрией углового распределения относительно оси нити. В настоящей работе, рассматривая вместо падения на нить волнового пакета, каковым можно представить релятивистски сплющенное кулоновское поле частицы, более простой случай падения плоской монохроматической волны, мы продемонстрируем, что указанный характер излучения может быть интерпретирован следующим образом. Падающая волна создает в нити возмущение, которое смещается вдоль нити со сверхсветовой скоростью и порождает излучение, аналогичное излучению Вавилова-Черенкова.

Кроме того, нами будет показано, что описанная симметрия распределения излучения относительно оси нити нарушается уже в случае падения волны на систему из двух параллельных нитей. Причиной нарушения симметрии является интерференция излучения, рассеянного каждой из двух нитей. По этой же причине нарушается симметрия излучения, рассеянного на нитевидных мишенях конечной толщины.

Рассеяние плоской волны на линейной цепочке зарядов

Пусть плоская монохроматическая электромагнитная волна с электрическим полем вида

$$\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = A\mathbf{e} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t), \quad (1)$$

где \mathbf{e} – вектор поляризации волны, \mathbf{k} – волновой вектор, $\omega = |\mathbf{k}| \cdot c$, падает на линейную цепочку свободных зарядов (заряды находятся на расстоянии a друг от друга) под углом ψ к оси цепочки (см. рис. 1). Роль таких зарядов могут играть электроны, связанные в атомах; если частота собственных колебаний электронов много меньше частоты падающей электромагнитной волны, электроны можно рассматривать как свободные.

Заряды, составляющие цепочку, под действием поля падающей волны будут придти в движение. Будем предполагать, что скорость, приобретаемая зарядом под действием поля волны, мала по сравнению со скоростью света.

В этом случае силой, действующей со стороны магнитного поля, можно пренебречь [2].

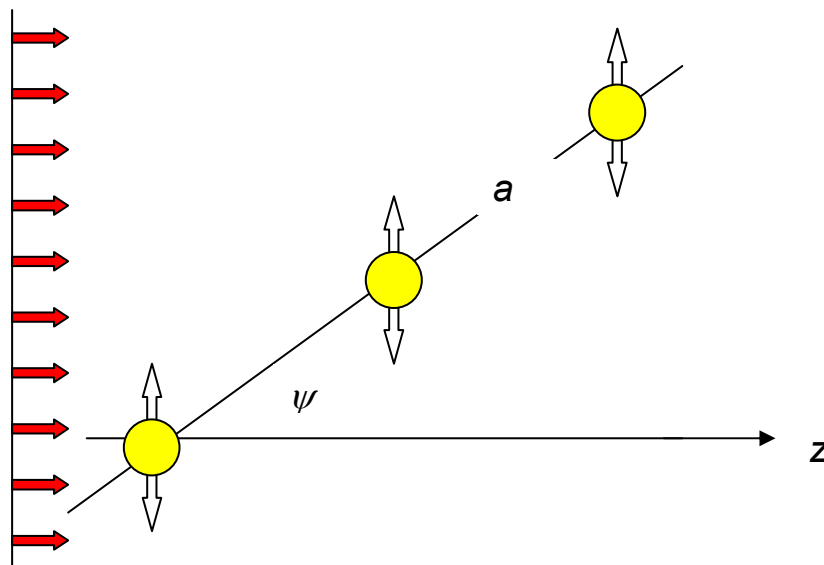


Рис. 1. Электромагнитное поле плоской волны (ее фронт движется в направлении оси z) заставляет колебаться заряды, образующие цепочку с периодом, направленную под малым углом ψ к оси z

Электрическое и магнитное поля волны, излученной n -ым колеблющимся зарядом, в дипольном приближении определяются формулами [2]

$$\mathbf{E}_n = \frac{1}{c^2 R_n} [\ddot{\mathbf{d}}_n, \mathbf{e}_n], \quad \mathbf{H}_n = \frac{1}{c^2 R_n} [\dot{\mathbf{d}}_n, \mathbf{e}_n], \quad (2)$$

где \mathbf{R}_n – вектор от заряда до точки наблюдения, $\mathbf{e}_n = \mathbf{R}_n / R_n$, вторая производная от дипольного момента \mathbf{d}_n вычисляется в момент времени $t - R_n / c$. Таким образом, величина $\ddot{\mathbf{d}}_n$ определяется уравнением движения

$$\ddot{\mathbf{d}}_n = \frac{e^2}{m} \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}_n, t - R_n / c), \quad (3)$$

где \mathbf{r}_n – радиус-вектор равновесного положения n -го заряда. С учетом (1) получаем

$$\ddot{\mathbf{d}}_n = \frac{e^2}{m} A \mathbf{e} e^{-i\omega(t - R_n / c)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n}. \quad (4)$$

Введем радиус-вектор точки наблюдения \mathbf{R}_0 . Тогда

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_0 - \mathbf{r}_n.$$

Поскольку мы рассматриваем поле на большом расстоянии от излучающей системы, $|\mathbf{R}_0| \gg |\mathbf{r}_n|$, можно приближенно записать

$$R_n = R_0 - \mathbf{r}_n \mathbf{e}_0,$$

где $\mathbf{e}_0 = \mathbf{R}_0 / R_0$. Тогда

$$\ddot{\mathbf{d}}_n = \frac{e^2}{m} A \mathbf{e} e^{-i\omega(t-R_0/c)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n - i\mathbf{e}_0\mathbf{r}_n \omega/c}. \quad (5)$$

В случае падения плоской волны на нашу цепочку зарядов поле рассеянной волны будет представлять собой когерентную сумму полей, излучаемых отдельными колеблющимися зарядами. Поле излученной волны $\mathbf{E} = \sum_n \mathbf{E}_n$ с той же точностью, что

и (5), можно записать в виде

$$\mathbf{E} = \frac{1}{c^2 R_0} \left[\left[\sum_n \ddot{\mathbf{d}}_n, \mathbf{e}_0 \right], \mathbf{e}_0 \right] = \frac{e^2 A}{m \omega^2 R_0} e^{-i\omega(t-R_0/c)} [[\mathbf{e}, \mathbf{k}], \mathbf{k}] \sum_n e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{e})\mathbf{r}_n}, \quad (6)$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{e}_0 \omega/c$ – волновой вектор излученной волны. Суммирование в (6) ведется по всем зарядам, составляющим цепочку:

$$\sum_n e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{e})\mathbf{r}_n} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(\kappa_{\parallel}-k_{\parallel})na} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ i \left(\frac{\omega}{c} \cos \psi - k_x \sin \psi - k_z \cos \psi \right) na \right\},$$

где κ_{\parallel} и k_{\parallel} – компоненты \mathbf{k} и \mathbf{k} , параллельные оси цепочки, a – период цепочки.

При $a \rightarrow 0$ суммирование можно приближенно заменить интегрированием (такая замена означает переход от дискретной цепочки зарядов к нити с непрерывным распределением заряда):

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(\kappa_{\parallel}-k_{\parallel})na} \approx \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\kappa_{\parallel}-k_{\parallel})z'} dz' = 2\pi n_e \delta(\kappa_{\parallel}-k_{\parallel}), \quad (7)$$

где $n_e = 1/a$ – число электронов на единицу длины нити.

Соответствующая напряженности поля излучения (6) энергия, излучаемая в единицу времени в элемент телесного угла $d\Omega$, равна

$$\frac{dE}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi c^3} \left[\sum_n \ddot{\mathbf{d}}_n, \mathbf{e}_0 \right]^2. \quad (8)$$

Подставляя результат (6) с учетом (7) в (8), находим интенсивность излучения нашей системы зарядов:

$$\frac{dE}{d\Omega} = \frac{A^2}{4} \frac{[\mathbf{k}, \mathbf{e}]^2}{\omega^2 c} \left(\frac{e^2}{m} \right)^2 \frac{L}{a^2} \delta(\kappa_{\parallel}-k_{\parallel}), \quad (9)$$

где $L = Na$ – длина цепочки. В последнем результате мы ввели дополнительный коэффициент $1/2$ по сравнению с (8). Дело в том, что формула (8) справедлива в предположении, что мы отделяем вещественную часть уже в выражениях (2) для электрического и магнитного полей. Если же этого не делать, то результат (8) нужно еще домножить на $1/2$ в силу известного соотношения для среднего по периоду (см. параграф 48 в [2]):

$$\overline{\operatorname{Re} \mathbf{A} \cdot \operatorname{Re} \mathbf{B}} = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}^*),$$

где $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}$, $\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0 e^{-i\omega t}$.

Разделив интенсивность рассеянного излучения (9) на плотность потока энергии в падающей волне (1), получим сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \frac{[\mathbf{k}, \mathbf{e}]^2}{\omega^2 c} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{L}{a^2} \delta(\kappa_{\parallel} - k_{\parallel}). \quad (10)$$

Дельта-функция в (10) показывает, что компонента волнового вектора излученной волны, параллельная оси нити, будет равна

$$k_{\parallel} = \kappa_{\parallel} = \frac{\omega}{c} \cos \psi.$$

В то же время, абсолютная величина компоненты \mathbf{k} , перпендикулярной оси нити, фиксирована условием $|\mathbf{k}| = \omega/c$. Это означает, что излучение будет происходить в направлениях, составляющих угол ψ с осью нити.

Описанный характер углового распределения рассеянных электромагнитных волн допускает наглядную интерпретацию. Падающая под углом ψ к нити электромагнитная волна создает в ней возмущение, движущееся вдоль нити со сверхсветовой фазовой скоростью

$$v_{\text{perturb}} = \frac{\omega}{\kappa_{\parallel}} = \frac{c}{\cos \psi} > c.$$

Действительно, при смещении фронта падающей волны на величину $c dt$ в направлении оси z (см. рис. 2) точка пересечения фронта волны с нитью сместится на расстояние

$$\frac{z + c dt}{\cos \psi} - \frac{z}{\cos \psi} = \frac{c dt}{\cos \psi},$$

то есть скорость движения возмущения вдоль нити будет $c/\cos \psi > c$. Такое сверхсветовое движение возмущения приводит к возникновению излучения, аналогичного черенковскому [3-5]. При этом угол раствора черенковского конуса, определяемый соотношением $\cos \theta_{Ch} = c/v_{\text{perturb}}$, как раз будет равен ψ .

Аналогичный эффект используется в радиотехнике и акустике для создания направленного излучения с помощью цепочки диполей, на которые подается сигнал со сдвигом фазы, обеспечивающим фазовую скорость волны в цепочке, превышающую скорость света (или звука) [3].

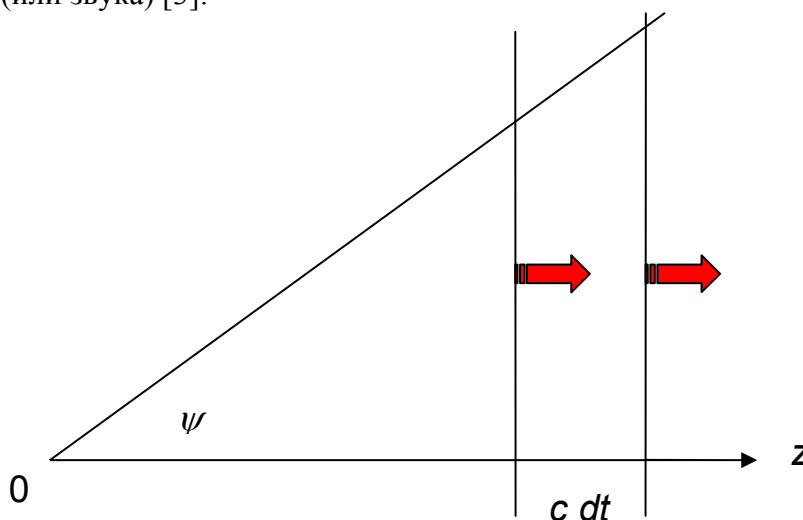


Рис. 2. Точка пересечения фронта волны (вертикальная линия), смещающегося в направлении оси z со скоростью c , с нитевидной мишенью (наклонная линия) будет смещаться со скоростью $c/\cos \psi > c$

Подставим в (10) явные выражения $k_{\parallel} = (\omega/c)\cos\psi$ и $k_{\parallel} = k_x \sin\psi + k_z \cos\psi$. Тогда сечение рассеяния (10) может быть записано в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \frac{[\mathbf{k}, \mathbf{e}]^2}{\omega^2 c} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{L}{a^2 \sin\psi} \delta\left(\frac{\omega/c - k_z}{\sin\psi} \cos\psi - k_x\right). \quad (11)$$

Мы видим, что сечение рассеяния будет расти с уменьшением угла падения волны на цепочку ψ . Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать только случай $\psi \ll 1$. С другой стороны, условие $k_{\parallel} = \kappa_{\parallel}$ позволяет заключить, что характерные углы, на которые будет происходить рассеяние волн, также будут малы. В этом случае волновой вектор рассеянной волны будет почти перпендикулярен вектору поляризации падающей волны. Тогда можно приближенно записать

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{2\pi}{\omega} \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 \frac{L}{a^2 \psi} \delta\left(\theta \cos\varphi - \frac{\theta^2}{2\psi}\right), \quad (12)$$

где мы ввели углы излучения θ и φ таким образом, что $k_z = (\omega/c)\cos\theta$, $k_x = (\omega/c)\sin\theta\cos\varphi$. Задаваемое дельта-функцией в (12) угловое распределение рассеянного излучения, как и в общем случае, имеет вид конуса с углом раствора ψ и осью, совпадающей с осью нашей цепочки (нити), в чем легко убедиться аналитически. Введем «декартовы компоненты» углов излучения $\theta_x = \theta \cos\varphi$, $\theta_y = \theta \sin\varphi$. Тогда аргумент дельта-функции можно записать в виде

$$\theta \cos\varphi - \frac{\theta^2}{2\psi} = \theta_x - \frac{\theta_x^2 + \theta_y^2}{2\psi} = \theta_x - \frac{(\theta_x - \psi + \psi)^2 + \theta_y^2}{2\psi} = \frac{\psi}{2} - \frac{\theta_x'^2 + \theta_y'^2}{2\psi},$$

где $\theta_x' = \psi - \theta_x$, $\theta_y' = \theta_y$ – углы излучения, отсчитанные от нового направления (направления оси нити). Мы видим, что аргумент дельта-функции будет зависеть только от угла $\theta' = \sqrt{\theta_x'^2 + \theta_y'^2}$ и обращается в нуль при $\theta' = \psi$, что и соответствует распространению рассеянных волн вдоль образующих описанного выше конуса.

Рассеяние на системе из двух нитей

Рассмотрим теперь систему из двух параллельных друг другу цепочек зарядов, смещенных друг относительно друга на расстояние b вдоль оси z (см. рис.3). Тогда суммарный вклад в (8) всех диполей будет равен

$$\begin{aligned} \sum \ddot{\mathbf{d}}_n &= \sum_n \ddot{\mathbf{d}}_{1n} + \sum_m \ddot{\mathbf{d}}_{2m} = \\ &= \mathbf{e} A \frac{e^2}{m} e^{-i\omega(t-R_0/c)} \left\{ \sum_n e^{i(\omega/c)z_{1n} - i\mathbf{k}\mathbf{r}_{1n}} + \sum_m e^{i(\omega/c)z_{2m} - i\mathbf{k}\mathbf{r}_{2m}} \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

После преобразований, аналогичных проведенным в предыдущем разделе, получаем для малых углов падения ψ , $a \rightarrow 0$ (что соответствует сплошным нитям) и малых значений b (что соответствует переходу к одной нити конечной толщины вместо двух отдельных бесконечно тонких нитей) следующее выражение для сечения рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx 2\pi \left(\frac{e^2}{m}\right)^2 n_e^2 \frac{L}{\omega\psi} \left(1 - \left(\frac{b\omega\theta^2}{4}\right)^2\right) \delta\left(\theta \cos\varphi - \frac{\theta^2}{2\psi}\right), \quad (14)$$

где n_e означает в данном случае число электронов на единицу длины нашей комбинированной нити. Этот результат отличается от формулы (12) наличием дополнительного множителя $1 - (b\omega\theta^2/4)^2$.

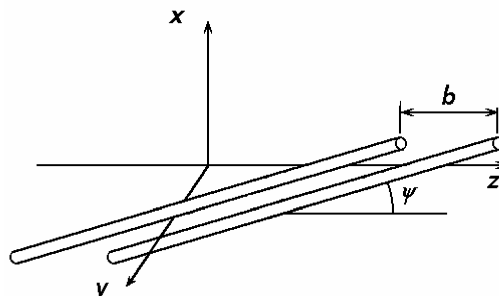


Рис. 3. Две параллельные цепочки зарядов, находящиеся друг от друга на расстоянии b вдоль оси z

Мы видим (см. также рис. 4), что с ростом угла рассеяния интенсивность рассеянного излучения будет уменьшаться, причем тем сильнее, чем больше величина b (то есть толщина нашей комбинированной нити). Такое подавление излучения на большие углы допускает наглядную интерпретацию. Действительно, из формулы (13) видно, что для излучения вперед (когда волновой вектор \mathbf{k} параллелен оси z) сдвиг по фазе во втором члене за счет отличия z_{2n} от z_{1n} будет компенсирован сдвигом по фазе за счет отличия \mathbf{r}_{2n} от \mathbf{r}_{1n} . А при излучении в направлении оси x сдвиг по фазе за счет отличия z_{2n} от z_{1n} будет таким же, как и при излучении вперед, в то время как сдвига по фазе за счет отличия \mathbf{r}_{2n} от \mathbf{r}_{1n} не будет. Таким образом, второй член в (13) будет обладать результирующим сдвигом фазы относительно первого члена, что и приведет к подавлению излучения на большие углы.

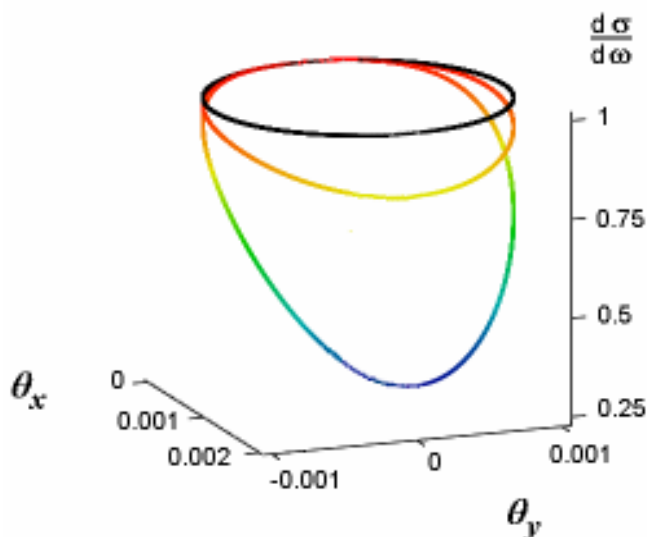


Рис. 4. Сечение рассеяния плоской волны на нитевидной мишени (в относительных единицах), рассчитанное по формулам (12) (верхняя кривая) и (14) (средняя и нижняя кривые), как функция углов рассеяния (в радианах). Сечения нормированы на одинаковую плотность электронов на единицу длины мишени. Угол падения волны на нить ψ составляет 0,001

рад; $b\omega = 0,2\psi^{-2}$ (средний график), $b\omega = 0,4\psi^{-2}$ (нижний график).

Отметим, что аналогичная асимметрия предсказывалась в работе [6] для излучения, возникающего при взаимодействии ультрарелятивистской частицы с нитевидной диэлектрической мишенью конечной толщины, причем эффект имел место при соотношении между толщиной нити и частотой излучения того же порядка, что и соотношение между расстоянием между нитями и частотой в рассматриваемой задаче.

Рассеяние на нитях конечной толщины

Для описания рассеяния излучения на диэлектрической нити конечной толщины с заданным распределением электронной плотности $n(\mathbf{r}')$ в плоскости, поперечной оси нити, необходимо использовать приближенные методы. Добиться упрощения можно, в частности, если диэлектрическая проницаемость нити мало отличается от единицы, $|1 - \varepsilon_\omega(\mathbf{r})| \ll 1$. Такая ситуация всегда будет иметь место для достаточно больших частот, когда диэлектрическая проницаемость имеет плазменный вид:

$$\varepsilon_\omega(\mathbf{r}) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2},$$

где $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n(\mathbf{r}) / m}$ – плазменная частота. В этом случае электрическое поле рассеянной волны может быть записано в виде [7]

$$\mathbf{E}^{(scattered)}(\mathbf{R}_0, t) = -\frac{1}{4\pi R_0} \frac{e^{i\omega R_0/c}}{c^2} \left(\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{I}) \right), \quad (15)$$

где

$$\mathbf{I} = \int d^3 r \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})(1 - \varepsilon_\omega(\mathbf{r}))\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (16)$$

$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ – полное электрическое поле в веществе мишени.

Самым грубым приближением, справедливым в случае $|1 - \varepsilon_\omega(\mathbf{r})| \ll 1$, будет подстановка в (16) вместо $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ поля падающей волны $\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ (1). Такое приближение будет аналогично борновскому приближению в квантовой теории рассеяния.

По аналогии с квантовой теорией рассеяния можно построить также эйкональное приближение. В этом приближении электрическое поле в веществе мишени будет описываться функцией вида

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, t) \exp \left\{ -i \frac{\omega}{2c} \int_{-\infty}^z (1 - \varepsilon_\omega(\mathbf{r})) dz \right\}.$$

Приведем результаты для рассеяния на однородной цилиндрической нити радиуса R . В этом случае в обоих приближениях борновское приближение приводит к результату

$$\mathbf{I}_\perp^{(B)} = \mathbf{e} A \frac{2}{\psi} \frac{\omega_p^2}{\omega^2} 2\pi \delta \left(k_x - \frac{\omega - k_z}{\psi} \right) \pi R^2 \frac{J_1(R k_\perp)}{R k_\perp} \quad (17)$$

(где $J_1(x)$ – функция Бесселя первого рода), а эйкональное – к формуле

$$\mathbf{I}_\perp^{(eik)} = \mathbf{e} A \frac{\omega_p^2 / \omega^2}{\omega - k_z - \frac{\omega \omega_p^2}{2 \omega^2}} 2\pi \delta \left(k_x - \frac{\omega - k_z}{\psi} \right) 2R \times$$

$$\left\{ \frac{\pi}{2} \frac{\omega - k_z - \omega \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}{\psi \sqrt{k_y^2 + \left(\omega - k_z - \omega \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)^2 / \psi^2}} J_1 \left(R \sqrt{k_y^2 + \left(\omega - k_z - \omega \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)^2 / \psi^2} \right) \right. \\
 \left. + \frac{\pi}{2} \frac{\omega - k_z}{\psi \sqrt{k_y^2 + \left(\frac{\omega - k_z}{\psi} \right)^2}} J_1 \left(R \sqrt{k_y^2 + \left(\frac{\omega - k_z}{\psi} \right)^2} \right) \right. \\
 \left. - i \int_0^1 d\alpha \cos(k_y R \alpha) \cos \left(\frac{R}{\psi} \left(\omega - k_z - \omega \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) \sqrt{1 - \alpha^2} \right) \right. \\
 \left. + i \int_0^1 d\alpha \cos(k_y R \alpha) \cos \left(\frac{R}{\psi} (\omega - k_z) \sqrt{1 - \alpha^2} \right) \right\}. \quad (18)$$

В обоих случаях дельта-функция (имеющая такой же вид, как и в формуле (11) в пределе малого ψ) показывает, что рассеянное излучение сконцентрировано в черенковском конусе. Результаты борновского и эйконального приближений будут совпадать в случае, когда параметр $\frac{\omega \omega_p^2}{2 \omega^2} \frac{2R}{\psi}$ окажется много меньше единицы. Пример ситуации,

когда реализуется противоположное условие, $\frac{\omega \omega_p^2}{2 \omega^2} \frac{2R}{\psi} \geq 1$, показан на рис. 5.

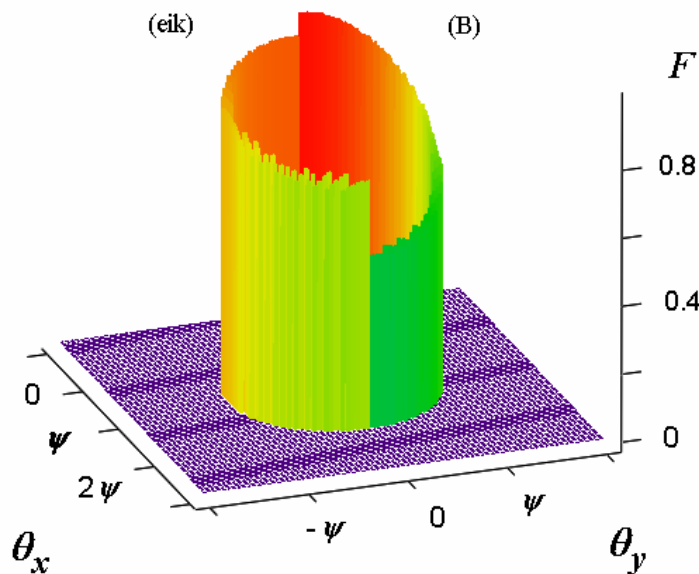


Рис. 5. Интенсивность волн, рассеянных на однородной цилиндрической нити (в относительных единицах), вычисленная с использованием борновского (справа) и эйконального (слева) приближений для случая $\psi = 10^{-3}$, $2\omega R\psi = 1,6$ и $\omega_p^2 / \omega^2 = 1,25 \cdot 10^{-6}$.

Заключение

В настоящей работе рассчитано сечение рассеяния электромагнитной волны, падающей под углом к линейной цепочке зарядов. Показано, что в пределе непрерывного распределения заряда в цепочке (в этом случае последняя превращается в диэлектрическую нить) угловое распределение рассеянного излучения имеет вид конуса с углом раствора, равным углу падения волны на нить. Такой угол раствора соответствует черенковскому условию для излучения возмущением в нити, вызываемым падающей электромагнитной волной, и смещающимся вдоль нити со сверхсветовой скоростью.

На примере системы из двух близкорасположенных параллельных нитей продемонстрировано, каким образом описанная симметрия углового распределения рассеянного излучения нарушается в случае, когда нитевидная мишень имеет конечную толщину. В предельном случае высоких частот рассчитано сечение рассеяния излучения на однородной цилиндрической нити конечной толщины. Полученные результаты позволяют дать наглядную интерпретацию результатам расчета спектрально-угловой плотности переходного излучения частиц высоких энергий на нитевидных мишенях, полученных с использованием борновского и эйконального приближений [1, 6, 7].

Работа поддержана внутриуниверситетским грантом БелГУ.

Литература

1. Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В. О переходном излучении релятивистских заряженных частиц на цепочках атомов кристалла // ЯФ. – 2003. – Т. 66, № 2. – С. 425-428.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. – М.: Наука, 1988. – 512 с.
3. Болотовский Б.М., Гинзбург В.Л. Эффект Вавилова-Черенкова и эффект Доплера при движении источников со скоростью больше скорости света в вакууме // Эйнштейновский сборник, 1972. – М.: Наука, 1974. – С. 212-236.
4. Болотовский Б.М., Давыдов В.А. Заряд, среда, излучение. – М.: Знание, 1989. – 64 с.
5. Гинзбург В.Л. Теоретическая физика и астрофизика. – М.: Наука, 1987. – 488 с.
6. N.F.Shul'ga, V.V.Syshchenko. Transition radiation of high energy particles on fiber-like targets // Phys.Lett. A. – 2003. – V. 313. – P. 307-311.
7. Сыщенко В.В., Шульга Н.Ф. Об эйкональном приближении в теории переходного излучения // Поверхность. – 2007. – № 4. – С. 49-55.

SCATTERING OF ELECTROMAGNETIC WAVES ON FIBER-LIKE TARGETS

V.V. Syshchenko, N.V. Soboleva

Belgorod State University, 308007, Belgorod, Studencheskaya St., 14, e-mail: syshch@bsu.edu.ru

The cross section of electromagnetic wave scattering on the linear string of charges and on the continuous fiber is calculated. The formulae obtained permit to give an interpretation to the recent results concerning the transition radiation of high energy particles on fiber-like targets of different structures.

Key words: electromagnetic wave, high energy particles, scattering, transition radiation, crystal, fiber-like target, nanotube.

ЖЕСТКОЕ НЕКОГЕРЕНТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛАХ

В.В. Сыщенко, А.И. Тарновский

Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14,
e-mail: syshch@bsu.edu.ru

Некогерентное тормозное излучение электронов высокой энергии в кристалле обусловлено тепловым разбросом атомов относительно их равновесных положений в решетке. В настоящей работе развита процедура моделирования некогерентного излучения, основанная на квазиклассических формулах теории тормозного излучения. Продемонстрирована значительная ориентационная зависимость интенсивности жесткого некогерентного излучения при углах падения электронов на плотно упакованную атомами кристаллографическую ось, близких к критическому углу аксиального каналирования. В работе представлены новые результаты, относящиеся, в частности, к излучению в толстых кристаллах и учитывающие коллимацию излучения. Результаты моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными

Ключевые слова: тормозное излучение, жесткие фотоны, электрон, позитрон, кристалл, длина когерентности, когерентный, некогерентный, моделирование.

Введение

При движении быстрых заряженных частиц в кристалле вдоль какой-либо кристаллографической оси или плоскости возможно явление каналирования, когда частицы движутся в каналах, образованных атомными цепочками или плоскостями кристалла (см., например, [1-3]). В процессе каналирования имеет место перераспределение потока частиц в кристалле. Благодаря этому возможно как увеличение, так и уменьшение выхода процессов, связанных с малыми прицельными параметрами. Это связано с тем фактом, что положительно заряженные частицы в режиме каналирования не могут приблизиться на малые расстояния к атомным ядрам в решетке, поэтому такие частицы будут сталкиваться с ядрами реже, чем в отсутствие каналирования. Для отрицательно заряженных частиц имеет место обратный эффект. Если же угол разориентации кристалла существенно превышает критический угол каналирования, эффект перераспределения потока частиц в кристалле отсутствует [3]. Таким образом, в случае разориентации кристалла на углы порядка критического угла каналирования должна иметь место существенная ориентационная зависимость выхода процессов, связанных с малыми прицельными параметрами. Такая ориентационная зависимость наблюдалась ранее для выхода ядерных реакций, дельта-электронов и ряда других процессов (см., например, [2, 3, 5-7]).

В работах [8, 9] с помощью процедуры, основанной на квазиклассической теории тормозного излучения, исследовалась аналогичная ориентационная зависимость интенсивности некогерентного излучения релятивистских электронов и позитронов при движении частиц в кристалле вблизи плотно упакованной атомами кристаллографической оси и плоскости. В настоящей статье представлены новые результаты, учитывающие коллимацию излучения, регистрируемого в экспериментах. Такой учет оказывается существенным при исследовании излучения в толстых кристаллах, когда частица может существенно отклониться от первоначального направления движения за счет многократного рассеяния. Результаты моделирования сравниваются с полученными ранее в Харьковском физико-техническом институте экспериментальными данными [6] по ориентационной зависимости выхода фотонов в области энергий, близких к энергии излучающего электрона.

Методика

Процесс тормозного излучения релятивистского электрона развивается в большой пространственной области вдоль импульса частицы, называемой длиной когерентности, $l_{coh} \sim 2\varepsilon\varepsilon' / m^2c^3\omega$, где ε – энергия начального электрона, ω – частота излученного фотона, $\varepsilon' = \varepsilon - \hbar\omega$, m – масса электрона, c – скорость света в вакууме [3, 10]. В широкой области частот излучения длина когерентности будет превышать межатомные расстояния в веществе:

$$l_{coh} \gg a. \quad (1)$$

В этом случае эффективная константа взаимодействия электрона с атомами решетки может оказаться большой по сравнению с единицей, что позволяет использовать квазиклассическое приближение для описания излучения электрона в кристалле. При этом в дипольном приближении спектральная плотность тормозного излучения описывается формулой [3, 11]

$$\frac{dE}{d\omega} = \frac{e^2\omega}{2\pi c^4} \int_{\delta}^{\infty} \frac{dq}{q^2} \left[1 + \frac{(\hbar\omega)^2}{2\varepsilon\varepsilon'} - 2\frac{\delta}{q} \left(1 - \frac{\delta}{q} \right) \right] |\mathbf{W}_q|^2, \quad (2)$$

где $\delta = m^2c^3\omega / 2\varepsilon\varepsilon' \sim l_{coh}^{-1}$, а величина

$$\mathbf{W}_q = \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\mathbf{v}}_{\perp}(t) e^{iqt} dt \quad (3)$$

представляет собой фурье-образ ускорения электрона в направлении, ортогональном его начальной скорости \mathbf{v} .

Основной вклад в интеграл (2) вносят малые значения q ,

$$q \sim \delta. \quad (4)$$

С другой стороны, характерные расстояния, на которых ускорение электрона в поле атома в (3) отлично от нуля, по порядку величины равны радиусу экранирования атомного потенциала R . Соответствующие промежутки времени, в течение которых подынтегральное выражение в (3) будет отлично от нуля, составляют $\Delta t \sim R/c$. Но в силу условия (1) в интересующей нас области частот $\delta \ll R^{-1}$. Поэтому мы можем представить \mathbf{W}_q в виде [12]

$$\mathbf{W}_q = c \sum_n \mathcal{G}_n e^{iqt_n}, \quad (5)$$

где \mathcal{G}_n – двумерный угол рассеяния электрона при столкновении с n -ым атомом, t_n – момент времени, когда происходит столкновение.

Угол рассеяния на атоме как функцию прицельного параметра столкновения легко найти из уравнения движения электрона в поперечной плоскости [1-3]

$$\dot{\mathbf{v}}_{\perp} = -\frac{c^2 e}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\rho}} U(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Выбирая потенциал атома в виде экранированного потенциала Кулона, $U(r) = (Z|e|/r) \exp(-r/R)$, где Z – атомный номер, находим, что

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{\rho}_n) = \frac{2Ze|e|}{\varepsilon R} K_1\left(\frac{\rho_n}{R}\right) \frac{\boldsymbol{\rho}_n}{\rho_n}, \quad (7)$$

где $K_1(x)$ – модифицированная функция Бесселя третьего рода (функция Макдональда), ρ_n – прицельный параметр n -ого столкновения.

Рассмотрим излучение, возникающее при падении электрона на кристалл под малым углом ψ к одной из плотно упакованных атомами кристаллографических осей (оси z). Известно [3], что усреднение выражения для $|\mathbf{W}_q|^2$ по тепловым колебаниям атомов в кристалле приводит к расщеплению этой величины (а с ней и интенсивности излучения) на сумму двух слагаемых, описывающих когерентные и некогерентные эффекты в излучении:

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{W}_q|^2 \rangle &= c^2 \sum_{n,m} e^{iqc(t_n - t_m)} \langle \mathcal{G}(\rho_n + \mathbf{u}_n) \rangle \langle \mathcal{G}(\rho_m + \mathbf{u}_m) \rangle + \\ &+ c^2 \sum_n \left\{ \langle (\mathcal{G}(\rho_n + \mathbf{u}_n))^2 \rangle - \langle \mathcal{G}(\rho_n + \mathbf{u}_n) \rangle^2 \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\rho_n = \rho(t_n) - \rho_n^0$ – прицельный параметр столкновения с n -ым атомом в его равновесном положении ρ_n^0 , $\rho(t)$ – траектория электрона в плоскости, ортогональной оси z , \mathbf{u}_n – тепловое смещение n -го атома относительно положения равновесия.

В области частот, удовлетворяющей условию

$$l_{coh} \ll a / \psi, \quad (9)$$

где a – расстояние между двумя ближайшими параллельными атомными цепочками, основной вклад в интенсивность излучения вносит слагаемое, описывающее некогерентные эффекты [3]. Подстановка формулы (7) для угла рассеяния на отдельном атоме во второе слагаемое (8) приводит к следующему выражению для некогерентной части:

$$|\mathbf{W}_{incoh}|^2 = \frac{4Z^2 e^4 c^2}{\varepsilon^2 R^2} \sum_n F(\rho_n), \quad (10)$$

где

$$F(\rho) = \left\langle \left(K_1 \left(\frac{|\rho + \mathbf{u}|}{R} \right) \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{\rho + \mathbf{u}}{|\rho + \mathbf{u}|} K_1 \left(\frac{|\rho + \mathbf{u}|}{R} \right) \right\rangle^2.$$

Формула (2) описывает интенсивность излучения отдельного электрона, движущегося по заданной траектории. Излучение однородного пучка частиц единичной плотности характеризуется эффективностью излучения, равной интенсивности (2), проинтегрированной по прицельным параметрам падения частицы на мишень

$$\frac{dK}{d\omega} = \int \frac{dE}{d\omega} d^2 \rho_0. \quad (11)$$

В частности, для излучения в поле отдельного атома использование (7) приводит (с логарифмической точностью, обусловленной неприменимостью дипольного приближения на прицельных расстояниях, меньших $\rho_{min} = \hbar / mc$) к формуле Бете-Гайтлера

$$\frac{dK}{d\omega} = \hbar \omega \frac{d\sigma_{BH}}{d\omega} = \frac{16}{3} \frac{Z^2 e^6}{m^2 c^2} \left(1 + \frac{3}{4} \frac{(\hbar \omega)^2}{\varepsilon \varepsilon'} \right) \ln \left(\frac{mRc}{\hbar} \right). \quad (12)$$

Интересующую нас эффективность некогерентного излучения в кристалле удобно сравнивать с эффективностью излучения в аморфной среде (при равном числе N соударений с атомами). Легко видеть, что отношение этих двух величин будет равно

$$N_\gamma = \frac{\int d^2 \rho_0 \left(\frac{dE}{d\omega} \right)_{incoh}}{N \hbar \omega \frac{d\sigma_{BH}}{d\omega}} = \frac{\int d^2 \rho_0 \sum_n F(\mathbf{p}_n)}{2 \pi N R^2 \ln \left(\frac{m R c}{\hbar} \right)}, \quad (13)$$

где интегрирование по $d^2 \rho_0$ означает интегрирование по всем возможным точкам влета электрона в кристалл в пределах одной элементарной ячейки.

Прицельные параметры столкновений с атомами \mathbf{p}_n определяются по траектории электрона в кристалле, найденной путем численного моделирования, детали которого обсуждаются в [8, 9, 13]. Интегрирование по $d^2 \rho_0$ может быть выполнено методом Монте-Карло.

Отметим, что среднее значение квадрата угла некогерентного рассеяния $\langle \mathcal{G}^2 \rangle_{incoh}$ описывается формулой, совпадающей с (10) с точностью до множителя c^2 :

$$\langle \mathcal{G}^2 \rangle_{incoh} = \frac{4Z^2 e^4}{\varepsilon^2 R^2} \sum_n F(\mathbf{p}_n). \quad (14)$$

Таким образом, при моделировании траектории электрона в кристалле наличие некогерентного рассеяния на тепловых колебаниях атомов можно учесть прибавлением к каждой из компонент скорости электрона в плоскости (x, y) в момент столкновения с n -ым атомом случайной величины, подчиняющейся распределению Гаусса с дисперсией, равной $(2Z^2 e^4 c^2 / \varepsilon^2 R^2) F(\mathbf{p}_n)$.

Результаты и их обсуждение

Рассмотрим излучение, возникающее при падении электрона на кристалл под малым углом ψ к одной из плотно упакованных атомами кристаллографических осей. Формула (8) показывает, что не только излучение, но и само рассеяние можно рассматривать как суперпозицию когерентной и некогерентной частей. Наличие когерентного рассеяния на атомах, составляющих цепочку, приводит к возможности приближенно описывать движение частицы в поле цепочки как движение в непрерывном потенциале (то есть в потенциале совокупности атомов, усредненном вдоль оси цепочки). При этом компонента импульса частицы, параллельная оси цепочки, будет сохраняться, и задача о движении в непрерывном потенциале сводится к двумерной. Если энергия поперечного движения частицы $\varepsilon_\perp = \varepsilon \psi^2 / 2$ не превышает высоты барьера, создаваемого непрерывным потенциалом цепочки, становится возможным явление каналирования. В режиме каналирования траектории электронов будут локализованы вблизи осей атомных цепочек, что приведет увеличению доли столкновений с атомами с малыми значениями прицельного параметра по сравнению с движением в аморфной среде. Канализованные позитроны, напротив, не смогут приблизиться к осям цепочек на достаточно малые расстояния, и доля близких столкновений с атомами будет меньше, чем в аморфной среде. Таким образом, при углах падения, много меньших критического угла аксиального каналирования [1-3] $\psi_c = \sqrt{2U_R(0)/\varepsilon} \approx \sqrt{4Ze^2/\varepsilon a_z}$, эффективность некогерентного излучения электронов в кристалле будет превышать

эффективность излучения в аморфной среде; для позитронов ситуация будет противоположной.

При углах падения, намного превышающих критический угол аксиального каналирования, все возможные значения прицельных параметров столкновений с атомами кристалла становятся равновероятными, как в аморфной среде, и эффективность некогерентного излучения становится (с точностью до фактора Дебая-Валлера) равной эффективности излучения в аморфной среде [9].

Возможность некогерентного рассеяния частиц на тепловых колебаниях атомов решетки приводит к ослаблению описанного выше эффекта, так как частица, столкнувшись с отдельным атомом, может рассеяться на большой угол и покинуть канал (так называемое деканалирование).

Конкретные параметры моделирования были выбраны в соответствии с условиями экспериментов, описанных в [6]. В одном из них регистрировалось излучение электронов с энергией $\varepsilon = 800$ МэВ, падающих на кристалл кремния ($Z = 14$, $R = 0.194$ Å) под малым углом ψ к оси $\langle 111 \rangle$ в жесткой области спектра ($\hbar\omega = 700$ МэВ), где определяющий вклад вносит некогерентный механизм тормозного излучения. На рис. 1 приведены экспериментальные данные ([6], Fig. 1b) и результаты моделирования, проведенного с учетом как когерентного рассеяния электронов в непрерывных потенциалах атомных цепочек, так и некогерентного рассеяния на тепловых колебаниях атомов, а также расходимости пучка электронов, составляющего в обсуждаемом эксперименте порядка $5 \cdot 10^{-4}$ рад. Отметим, что с ростом угла падения ψ начинает сказываться влияние атомных плоскостей кристалла, подробно описанное в [8, 9].

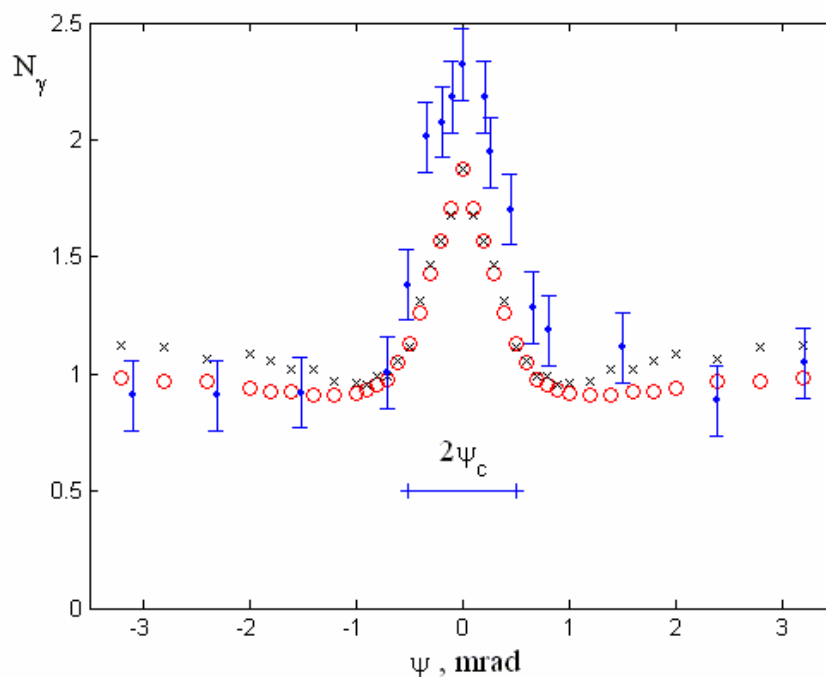


Рис. 1. Выход фотонов с энергией $\hbar\omega = 700$ МэВ в зависимости от угла падения электронов с энергией $\varepsilon = 800$ МэВ по отношению к оси $\langle 111 \rangle$ монокристалла кремния толщиной 30 микрон [6] (экспериментальные точки) и относительная эффективность некогерентного излучения электронов по результатам моделирования на основе формулы (9) с учетом некогерентного рассеяния электронов на тепловых колебаниях атомов решетки и расходимости пучка, при условии, когда ось пучка электронов параллельна плоскости $(22\bar{1})$ (кружки) и плоскости $(\bar{1}10)$ (крестики). Критический угол аксиального каналирования составляет в данном случае $5,1 \cdot 10^{-4}$ рад

В случае падения частиц на толстый кристалл становится существенным также учет коллимации излучения. Действительно, в эксперименте [6] пучок регистрируемых фотонов был ограничен коллиматором с углом раствора $\theta_{coll} = 2mc^2 / \varepsilon$. Поскольку характерные углы тормозного излучения релятивистских частиц составляют именно такую величину, использование формулы (2), описывающую интегральную по углам интенсивность тормозного излучения, является вполне оправданным. Однако, при прохождении через толстый кристалл частица может за счет некогерентного рассеяния на тепловых колебаниях атомов отклониться на значительный угол относительно своего первоначального направления движения. Излучение частицы, генерируемое на соответствующих участках траектории, не даст вклада в суммарный выход фотонов, регистрируемый в эксперименте с коллимацией излучения. Этот эффект учтен при моделировании некогерентного излучения электронов с энергией 800 МэВ, падающих под малым углом к оси $\langle 110 \rangle$ кристалла алмаза толщиной 300 микрон (рис. 2).

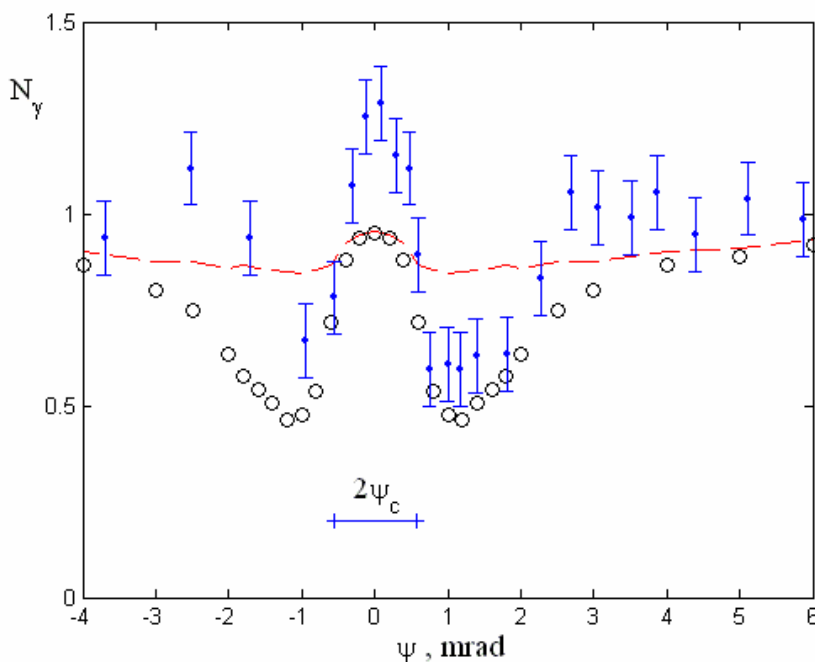


Рис. 2. Выход фотонов с энергией $\hbar\omega = 700$ МэВ в зависимости от угла падения электронов с энергией $\varepsilon = 800$ МэВ по отношению к оси $\langle 110 \rangle$ монокристалла алмаза толщиной 300 микрон [6] (экспериментальные точки) и относительная эффективность некогерентного излучения электронов по результатам моделирования на основе формулы (9) с учетом некогерентного рассеяния электронов на тепловых колебаниях атомов решетки и расходимости пучка электронов (штриховая линия), а также коллимации излучения (кружки). Критический угол аксиального каналирования составляет в данном случае $5,6 \cdot 10^{-4}$ рад, угол коллимации $\theta_{coll} = 1,25 \cdot 10^{-3}$ рад

Таким образом, многократное рассеяние электронов на атомах кристалла при учете коллимации излучения приводит с ростом толщины кристалла к двоякому эффекту. С одной стороны, в результате деканалирования высота пика вблизи $\psi = 0$ уменьшается с ростом толщины кристалла. С другой стороны, рассеяние на большие углы в области $\psi \sim \psi_c$ выбрасывает многие электроны из области коллимации, что приводит к углублению провала вблизи $\psi \sim \psi_c$. Результат совместного действия этих двух процессов можно проследить на рис. 3, где представлены результаты моделиро-

вания жесткого некогерентного излучения на кристаллах разной толщины при прочих равных условиях.

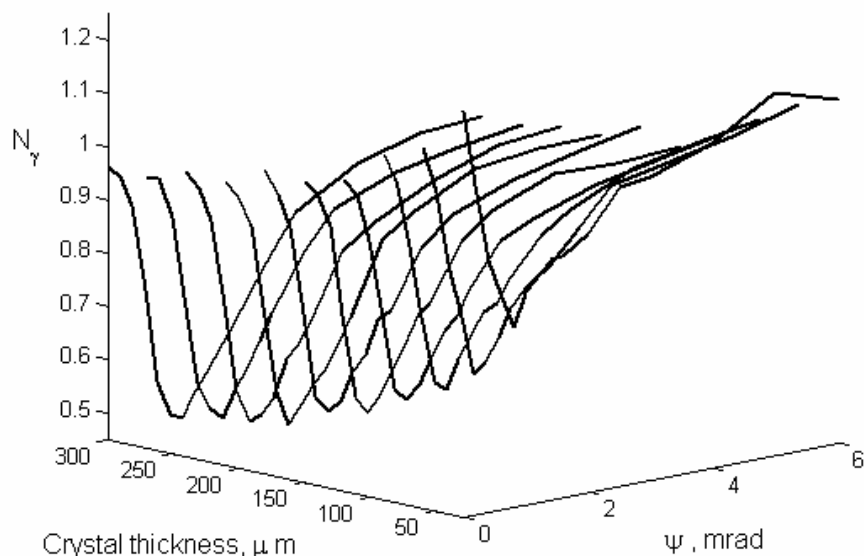


Рис. 3. Результаты моделирования при условиях рис. 2 для кристаллов различной толщины

Заключение

Результаты моделирования показывают существенную зависимость выхода некогерентного тормозного излучения от ориентации кристалла по отношению к пучку падающих частиц при углах падения, близких к критическому углу аксиального каналирования. Эта ориентационная зависимость обусловлена особенностями динамики заряженных частиц в кристалле и приводит к существенной зависимости от условий коллимации излучения. Результаты моделирования некогерентного излучения электронов находятся в хорошем согласии с результатами экспериментов [6], в которых измерялась ориентационная зависимость выхода фотонов с энергией, близкой к энергии излучающих электронов, когда вклад некогерентного механизма излучения является определяющим.

Работа выполнена при поддержке внутриуниверситетского гранта БелГУ.

Литература

1. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц // УФН. 1969. Т. 99, вып. 2. С. 249-296.
2. Gemmell D.S. Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystal // Rev. of Mod. Phys. 1974. V. 46. P. 129-228.
3. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
4. Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф., Трутень В.И., Гриненко А.А., Сыщенко В.В. Динамика заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах // УФН. Т. 165, № 10. С. 1165.
5. Boldyshev V.F., Kasilov V.I., Kovalenko G.D. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1988. V. B 33. P. 30.
6. Sanin V.M., Khvastunov V.M., Boldyshev V.F. and Shul'ga N.F. Orientation effects in intensity and polarization of γ -radiation emitted by 1 GeV electrons in single crystals // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1992. V. B 67. P. 251-255.
7. Uggerhøj U.I. The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields // Rev. Mod. Phys. 2005. V. 77. P. 1131.
8. Shul'ga N.F., Syshchenko V.V. Simulation of incoherent bremsstrahlung of high energy electrons and positrons in a crystal // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. V. 227. P. 125-131.
9. Сыщенко В.В., Тарновский А.И., Шульга Н.Ф. Моделирование некогерентного излучения быстрых частиц в ориентированном кристалле // Поверхность. 2008. № 4. С. 80-86.

10. Тер-Микаелян М.Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван: Изд-во АН Арм.ССР, 1969. 457 с.
11. Шульга Н.Ф., Сыщенко В.В. Метод классических траекторий в теории излучения электронов высоких энергий во внешнем поле // Изв. Академии Наук, Серия Физическая. 2000. Т. 64, № 11. С. 2168-2173.
12. Shul'ga N.F., Truten' V.I., Syshchenko V.V. Coherent radiation of electrons with ultrahigh energies in crystals // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 119. P. 55-58.
13. Сыщенко В.В., Тарновский А.А. Моделирование траектории релятивистского электрона в кристалле // Компьютерное моделирование 2008: Труды международной конференции. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008, с. 238-241.

HARD INCOHERENT RADIATION FROM FAST PARTICLES IN CRYSTALS

V.V. Syshchenko, A.I. Tarnovsky

Belgorod State University, 308007, Belgorod, Studencheskaya St., 14,
e-mail: syshch@bsu.edu.ru

Incoherent bremsstrahlung by high energy electrons in crystal is due to the thermal spread of atoms in relation to their equilibrium positions in the lattice. The simulation procedure for incoherent radiation based on semiclassical formulae of bremsstrahlung theory is developed in the present article. Substantial orientation dependence of hard incoherent radiation intensity is demonstrated under the angles of the electron's incidence onto crystallographic axis densely packed with atoms close to the critical channeling angle. New results concerning to radiation in thick crystals and taking the collimation of the radiation into account are presented in the paper. The results of simulation are in good agreement to the experimental data.

Key words: bremsstrahlung, hard photons, electron, positron, crystal, coherence length, coherent, incoherent, simulation.

ОЦЕНКА СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ С ПОМОЩЬЮ ИЗЛУЧЕНИЯ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Р.А. Шатохин

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая 14, 308007 Белгород, Россия
e-mail: vnukov@bsu.edu.ru

Анализируется зависимость характеристик излучения, возникающего при прохождении через кристалл быстрых электронов, от качества внутренней структуры образца. Предложен способ оценки размеров микроблоков кристаллов по соотношению вкладов параметрического рентгеновского излучения и дифрагированного тормозного и переходного излучений для разных углов наблюдения. Обсуждается возможность оценки размеров микроблоков по соотношению интенсивностей этих механизмов излучения для одного угла наблюдения и разных порядков отражения.

Ключевые слова: мозаичный кристалл, быстрый электрон, излучение, дифракция, микроблок, параметрическое рентгеновское излучение, длина первичной экстинкции, угол наблюдения, порядок отражения.

Введение

Наличие упорядоченности атомов среды приводит к появлению ориентационных и интерференционных эффектов в выходе вторичных процессов, возникающих при прохождении через неё быстрых заряженных частиц. К ним, в частности, относятся процессы рассеяния, выхода ядерных реакций, процессы генерации излучения и т.д. Наличие этой связи позволяет ставить вопрос об анализе структуры мишени по результатам измерений. Например, по выходу обратного резерфордского рассеяния каналированных ионов можно судить о расположении примесей в кристаллической решётке, а по спектрам излучения при каналировании быстрых электронов можно уточнять форму потенциала, плотность электронов и тому подобное, см., например, [1] и цитируемую там литературу.

В этом же ряду стоит и задача анализа качества структуры кристаллических образцов, то есть наличие в образце блоков мозаичности, их распределение по углу разориентации относительно основного направления и размерам по характеристикам жёсткого электромагнитного излучения, генерируемого при прохождении через них быстрых электронов. К достоинствам этого подхода можно отнести высокую проникающую способность жёсткого рентгеновского излучения и наглядность интерпретации. Наиболее удобным, по-видимому, является регистрация и анализ характеристик излучения, испускаемого под большими углами к направлению падения частиц на образец, что существенно уменьшает вклад тормозного излучения не чувствительного к структуре образца.

Этим требованиям удовлетворяют два механизма излучения: параметрическое рентгеновское излучение (ПРИ) [2,3], которое можно рассматривать как когерентное рассеяние собственного электромагнитного поля быстрой частицы на электронных оболочках периодически расположенных атомов мишени, и дифракция свободных фотонов, возникающих при влёте частицы в образец, то есть дифрагированное переходное излучение (ДПИ), или родившихся в нём за счёт процесса тормозного излучения – дифрагированное тормозное излучение (ДТИ). Оценка характерного угла мозаичности образцов σ_m по характеристикам наблюдаемого излучения не представляет собой существенного интереса, поскольку та же самая информация может быть получена с помощью более простых и дешёвых методов рентгеноструктурного анализа. Однако для

анализа микроструктуры образцов, то есть оценки размеров микроблоков и углов относительной разориентации соседних блоков между собой ситуация не столь очевидна. При использовании электронов, варьируя угол наблюдения и тем самым энергию фотонов, можно получить более качественную информацию, чем при использовании рентгеновского излучения с фиксированной длиной волны. Прямое измерение размеров микроблоков с помощью пучков рентгеновского излучения представляет собой сложную экспериментальную задачу и может быть использовано только для анализа поверхностных слоев, см. например [4]. Исходя из выше изложенного, оценка возможности анализа микроструктуры образцов по характеристикам излучения проходящих через них быстрых электронов представляется достаточно важной и актуальной.

1. Постановка задачи

Известно, что характерная ширина углового распределении ПРИ относительно брэгговского направления порядка $\Theta_{ph} = \sqrt{\gamma^{-2} + \omega_p^2 / \omega^2}$, где γ – Лоренц-фактор, ω – энергия фотонов, а ω_p – плазменная частота среды. Как показано в [5] полная интенсивность ПРИ практически не зависит от мозаичности кристалла. Наличие мозаичности приводит к уширению ориентационных зависимостей и угловых распределений ПРИ, а при сопоставимости Θ_{ph} и характерного угла мозаичности, уменьшает выход излучения за счёт переотражения фотонов ПРИ [6,7]. Поэтому чувствительность ПРИ к тонким деталям структуры кристалла незначительна. Однако поскольку для кристаллов с совершенной структурой выход ПРИ значительно больше выхода ДТИ [8] учёт вклада этого механизма в наблюдаемые характеристики излучения необходим.

Дифрагированные реальные фотоны испускаются в брэгговском направлении, а ширина ориентационной зависимости определяется угловым распределением первичного излучения и, в основном, величиной σ_m и углом коллимации излучения ν_c [8]. В эксперименте последняя величина редко бывает меньше нескольких мрад, поэтому с помощью измерений ориентационных зависимостей или угловых распределений выхода дифрагированного излучения (ДТИ или ДПИ) оценка мозаичности кристалла может быть сделана только для достаточно больших значений σ_m , сопоставимых с углом коллимации излучения ν_c . Поэтому определить наличие мозаичности и оценить величину σ_m существенно проще и дешевле с помощью обычных методов рентгеновской дифракции.

Более важен и интересен вопрос, можно ли с помощью измерений ориентационных зависимостей и угловых распределений результирующего излучения быстрых электронов в образце (ПРИ+ДТИ+ДПИ) оценить размеры блоков мозаичности и характерные углы из взаимной разориентации. Пусть на поверхности мозаичного образца или внутри него рождается излучение с спектрально-угловым распределением $I(\omega, \vec{n})$, соответственно переходное и тормозное излучения. При выполнении условий дифракции, на какой либо из плоскостей отдельного блока мозаики для фотонов с энергией ω и единичным вектором в направлении движения фотона \vec{n} удовлетворяющих условию

$$\omega = \frac{|\vec{g}|^2}{2\sqrt{\epsilon_0} |\vec{n}\vec{g}|} = \frac{g}{2 \sin \Theta_B}, \text{ где } \vec{g} \text{ и } \Theta_B \text{ – вектор обратной решётки этой}$$

плоскости и угол между ней и вектором \vec{n} , детектор с угловой апертурой ν_c , расположенный под углом $\Theta_D = 2\Theta_B$, зарегистрирует наличие дифрагированного излучения. Интенсивность этого излучения будет зависеть от отражающей способности образца.

Известно (смотри [9] и цитируемую там литературу), что по степени совершенства кристаллы можно классифицировать по двум факторам: размерам правильных блоков или участков в кристалле, и степени их взаимной разориентации. В соответствии с

первым фактором все кристаллы можно разделить на два класса а и б. В кристаллах класса а отдельные участки достаточно велики, что бы проявилось заметное влияние первичной экстинкции, то есть их линейный размер сопоставим с длиной первичной экстинкции. В кристаллах класса б размер правильных блоков мал, поэтому эффект первичной экстинкции практически не наблюдается. В соответствии со вторым фактором кристаллы также можно разделить на два класса – α и β . В кристаллах класса α блоки почти параллельны друг другу, их взаимная разориентация мала, поэтому вклад вторичной экстинкции велик. В кристаллах класса β блоки распределены нерегулярно, поэтому вклад вторичной экстинкции мал.

Комбинируя эти факторы можно условно классифицировать кристаллы по степени совершенства на четыре группы от а α до б β . Пределом класса а α , когда возможная разориентация микроблоков меньше области полного отражения рентгеновских лучей ("столика" Дарвина), является идеальный совершенный кристалл, а класса б β – идеальный мозаичный кристалл. Следует отметить, что принадлежность к этим классам не является раз и навсегда заданной, поскольку это зависит от длины экстинкции, которая, в свою очередь, зависит от порядка отражения и энергии фотонов [9]. То есть для разных порядков отражения или значимо отличающихся энергий фотонов один и тот же образец может относиться к разным классам.

Как показали эксперименты с узкими пучками монохроматического излучения, выполненные ещё в 30-х годах прошлого века (см. [9] и цитируемую там литературу), отражающая способность рентгеновского излучения кристаллами непосредственным образом связана с совершенством их структуры. Кристаллы класса а α обеспечивают наименее узкую кривую качания (FWHM \sim 20-30 угловых секунд и меньше), хорошо описываемую динамической теорией дифракции рентгеновских лучей в совершенных кристаллах. По этой причине их интегральная отражающая способность невелика. Кристаллы с нарушенной структурой обладают большей интегральной отражающей способностью, причем иногда почти на порядок. Максимальной интегральной отражающей способностью и, соответственно, наиболее широкой кривой качания обладают мозаичные кристаллы класса б β . Их отражающая способность, так же как и кристаллов класса б α , хорошо описывается теорией дифракции рентгеновских лучей в мозаичных кристаллах, однако для кристаллов класса б α необходимо учитывать влияние вторичной экстинкции, которая уменьшает интегральную отражающую способность.

Кристаллы класса а α иногда можно представить в виде набора кристаллитов, то есть совершенных кристаллов малых размеров, каждый из которых отражает рентгеновское излучение в соответствии с динамической теорией дифракции. Отражающая способность такого кристалла как целого близка к отражающей способности совершенного кристалла с такими же размерами, если размеры кристаллита больше длины поглощения излучения. В противном случае, отражающая способность такого кристалла больше, чем у совершенного, поскольку излучение может отразиться от кристаллитов, расположенных в глубине кристалла [9]. Здесь необходимо подчеркнуть, что только в идеальном совершенном и идеальном мозаичном кристаллах интегральная отражающая способность хорошо описывается соответствующими теориями для любых энергий фотонов и порядков отражения. В остальных случаях необходимо точно учитывать размеры блоков и их распределение по углам разориентации относительно основного направления, что, как правило, неизвестно.

При использовании кристаллов для генерации интенсивных пучков рентгеновского излучения на него падает или в нём рождается расходящийся фотонный пучок с непрерывным спектром, часть фотонов которого затем отражается и регистрируется детектором с фиксированным угловым расположением. В такой постановке эксперимента несовершенство структуры приводит к уширению спектра детектируемого излу-

чения и увеличению его интенсивности. То есть для кристалла класса aa регистрируемое излучение наименее интенсивно, а ширина спектра и ориентационной зависимости, в основном, определяется углом коллимации излучения. Для кристалла класса $b\beta$ интенсивность излучения максимальна, так же как и ширина ориентационной зависимости и спектра излучения. Зависимость характеристик регистрируемого излучения от качества структуры кристалла позволяет, в принципе, провести оценку качества структуры реальных кристаллов по характеристикам наблюдаемого излучения.

2. Анализ экспериментальных данных

Известно, что ширина "столика" Дарвина $\Delta\Theta$ и длина первичной экстинкции l_{ex} зависят от порядка отражения и энергии фотонов. Согласно [9] для неполяризованного излучения и отсутствия поглощения можно записать:

$$\Delta\Theta = 2 \cdot \gamma \Delta\theta_0 \quad (1)$$

где $\Delta\theta_0 = 2 \cdot \delta / \sin 2\Theta$ – поправка к углу Брэгга Θ из-за преломления волны в кристалле, $\delta = (\omega_p / \omega)^2 / 2$ – отличие показателя преломления от 1, а $\gamma = \frac{1}{2} \frac{f(\vec{g})}{f(0)} (1 + \cos(2\Theta))$.

Здесь $f(\vec{g})$ – Фурье-компонента пространственного распределения электронов в атоме кристалла атомный фактор рассеяния ($f(0) = z$, где z – число электронов в атоме), а \vec{g} – вектор обратной решетки, соответствующий плоскости, на которой происходит отражение.

Для оценки длины первичной экстинкции, можно использовать выражение [9]:

$$l_{ex} = d / (2\bar{\xi} \sin \Theta), \quad (2)$$

где $\exp(-2\bar{\xi})$ – ослабление интенсивности волны при пролете через одну плоскость:

$$2\bar{\xi} = \frac{\pi d^2 N F}{n} \frac{e^2}{m c^2}, \quad (3)$$

где N – концентрация рассеивающих центров, d – межплоскостное расстояние, F – структурный множитель, n – порядок отражения.

В связи с существованием зависимости $\Delta\Theta$ и l_{ex} от энергии фотонов проанализируем результаты измерений выхода результирующего излучения (ПРИ+ДТИ+ДПИ) для значимо разных энергий фотонов. На рисунке 1 приведены результаты измерения вертикального углового распределения выхода излучения для отражения (220) из кристалла естественного алмаза размерами $6 \times 10 \times 0.35$ мм³ и поверхностной мозаичностью $\sigma_m \approx 0.2$ мрад [11] в эксперименте [10] (точки) для энергии электронов 900 МэВ и угла наблюдения $\Theta_d = 90^\circ$. Кристалл установлен в геометрии Брэгга, а толщина мишени по ходу электронного пучка ~ 0.5 мм.

В качестве детектора использовался пропорциональный счетчик с ксеноновым наполнением БДП-2 с максимальной апертурой 4×16 мм², эффективностью $\sim 80\%$ для энергии фотонов $\omega \sim 7$ кэВ и разрешением $\Delta\omega/\omega \sim 15\%$. Для нахождения центра рефлекса ПРИ и измерения угловых распределений счётчик мог перемещаться в вертикальном и горизонтальном направлениях с шагом 0.25 мм. Счетчик располагался на расстоянии 106 см от кристалла. С целью более точного измерения углового распределения ПРИ перед счётчиком был установлен свинцовый коллиматор диаметром 4 мм. Угол коллимации излучения $\mathcal{G}_c = 1.88$ мрад.

Зависимость 1 на этом рисунке – результаты расчёта по кинематической теории ПРИ [12] в предположении, что кристалл является совершенным. Как показано в работах [6,13], при выполнении условия $\sigma_m \ll \Theta_{ph}$, как в данном случае, мозаичность прак-

тически не сказывается на спектр и угловое распределение ПРИ. Используемая в работе методика расчёта ПРИ в совершенных и мозаичных кристаллах подробно изложена в статьях [6,8]. Как и в цитируемой экспериментальной работе из-за погрешности абсолютизации (~20-30%) результаты измерений нормированы на результаты расчёта в области углов вылета фотонов $\nu_v > 5$ мрад. Из рисунка видно, что расчётная зависимость хорошо описывает результаты эксперимента только для углов $\nu_v > 5-7$ мрад. Для меньших углов экспериментальные точки идут значительно выше расчётной кривой, что свидетельствует о вкладе излучения с более узким угловым распределением, чем ПРИ, то есть вкладе дифракции реальных фотонов. В данном случае $\omega \sim 6.97$ кэВ $\ll \gamma\omega_p \sim 67$ кэВ это дифрагированное переходное излучение

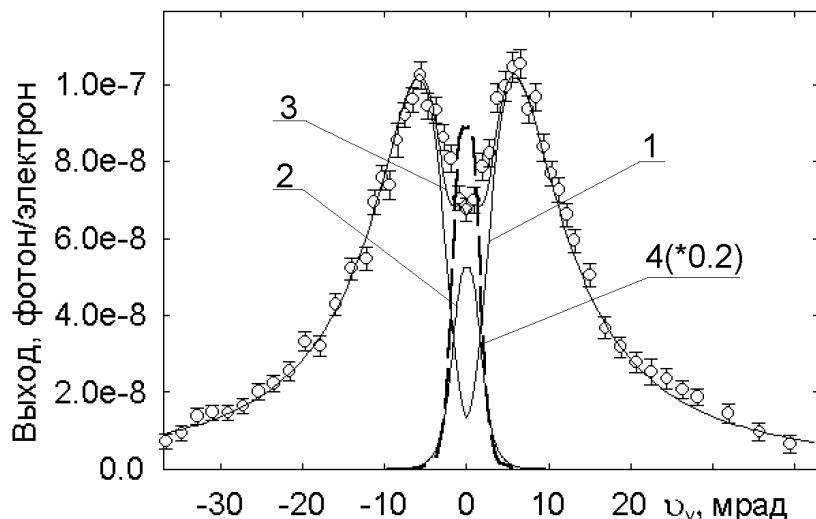


Рис.1. Вертикальное угловое распределение для условий работы [10]

На этом же рисунке (кривая 2) приведены результаты расчёта вертикальной зависимости выхода ДПИ, выполненного в соответствии с методикой работы [14], для совершенного кристалла. В расчёте учтены геометрические размеры детектора и поперечные размеры пучка электронов на кристалле [15]. Методика учета влияния размеров электронного пучка на характеристики наблюдаемого излучения приведена в работе [16]. Кривая 3 – результирующее угловое распределение ПРИ+ДПИ. Как видно из рисунка, расчёт удовлетворительно описывает результаты эксперимента. Тем не менее, в центре углового распределения экспериментальная и расчетная зависимости несколько отличаются, что может быть связано как с неопределённостью ряда параметров, используемых в расчёта (поперечные размеры электронного пучка и его расходимость), так и с мозаичностью кристалла.

Характерный угол мозаичности $\sigma_m \sim 0.2$ мрад сопоставим с шириной области полного отражения для этой энергии фотонов $\Delta\Theta \sim 0.02$ мрад. Поэтому по степени разориентации блоков этот кристалл следует отнести к классу α . Для проверки применимости к этому образцу приближения мозаичного кристалла класса b был проведен расчёт углового распределения ДПИ в рамках этого приближения по методике работы [6,17] (см. рис.1, кривая 4). Из рисунка видно, что угловые распределения ДПИ для совершенного кристалла (кривая 2) и мозаичного класса b (кривая 4) подобны, но отличаются по интенсивности практически на порядок. Примерно такого соотношения и следовало ожидать, поскольку для мозаичных кристаллов класса b отражающая способность $Q \sim N^2 \lambda^2$ [9,18,6], где N – концентрация атомов, а λ – длина волны. То есть для относительно больших длин волн вероятность отражения рентгеновского из-

лучения образцом такой толщины, как и для совершенного кристалла близка к единице, а характерный угол мозаичности примерно на порядок больше ширины "столика" Дарвина.

Зависимость 3 существенно ближе к экспериментальным точкам, чем сумма зависимостей 2 и 4, поэтому кристалл алмаза, использованный в эксперименте [10], следует отнести к классу $a\alpha$, то есть размеры составляющих его кристаллитов больше длины первичной экстинкции $l_{ex} \sim 7$ мкм. Отмеченное выше различие между зависимостью 3 (ПРИ+ДПИ в совершенном кристалле) и результатами измерений обусловлено тем, что для фотонов с $\omega = 6.97$ кэВ длина поглощения излучения $l_a \sim 0.43$ мм $\gg l_{ex}$. Поэтому блоки, расположенные в глубине кристалла и разориентированные относительно блоков на поверхности на угол больше $\Delta\Theta$, дают вклад в выход регистрируемого излучения.

С увеличением энергии фотонов длина первичной экстинкции возрастает, и ситуация меняется. На рисунке 2 точками показана зависимость выхода фотонов первого порядка отражения от угла разориентации плоскости (110) кристалла алмаза толщиной 2 мм относительно направления брэгговского отражения, полученная в эксперименте [19]. Ошибки статистические и не включают погрешность определения числа электронов, прошедших через кристалл ($\sim 10-15\%$).

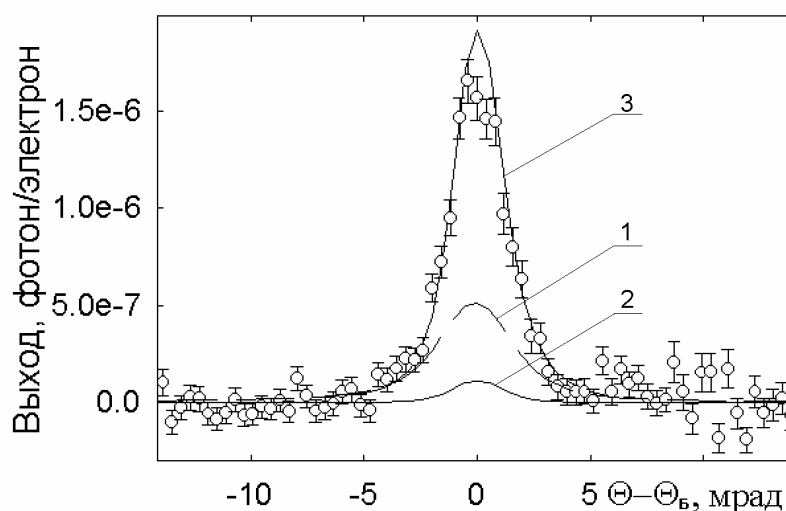


Рис. 2. ОЗ выхода излучения для условий работы [13]

Результаты этого эксперимента уже обсуждались в работах [13,10]. Для удобства сравнения из экспериментальной зависимости вычтена некогерентная подложка, уровень которой не превышал 30% от выхода в максимуме. Эксперимент выполнен в геометрии Лауэ на кристалле естественного алмаза с поверхностной мозаичностью $\sigma_m \sim 0.2$ мрад, ориентацией $\langle 110 \rangle$ и размерами $6 \times 8 \times 2$ мм³, вырезанном из того же образца, что и мишень, использованная в эксперименте [10]. Условия эксперимента: энергия электронов 500 МэВ, угол наблюдения $\Theta_D = 4^\circ$, энергия фотонов первого порядка отражения $\omega \sim 145$ кэВ, угол коллимации $\mathcal{G}_c = 1.9$ мрад.

Здесь же (кривая 1) показана расчётная зависимость, полученная в рамках кинематической теории ПРИ. Основными факторами, определяющими форму ориентационной зависимости выхода излучения (ОЗ), являются угол коллимации излучения и многократное рассеяние частиц в кристалле. Поэтому измеренная и рассчитанная ОЗ достаточно близки по форме, но значительно отличаются по амплитуде. Разница в шири-

нах (FWHM) рассчитанной и измеренной зависимостей $\Delta\Theta_{calc} = 3.97$ мрад и $\Delta\Theta_{exp} = (2.9 \pm 0.2)$ мрад превышает экспериментальную погрешность (шаг измерения ОЗ ≈ 0.4 мрад) и свидетельствует о вкладе излучения с более узким угловым распределением, чем ПРИ. Для экспериментальных условий цитируемой работы $\omega \approx 145$ кэВ $\gg \gamma_{\omega p} \sim 35$ кэВ это дифрагированное тормозное излучение (ДТИ).

Оценка вклада ДТИ по методике работы [8] в предположении, что кристалл является совершенным, (кривая 2) показала, что в этом случае интенсивность ДТИ не превышает 25% от выхода ПРИ и не может объяснить результаты эксперимента. Учёт мозаичности кристалла по методике [6,17] в предположении однородного распределения блоков мозаики с размерами меньше длины первичной экстинкции $l_{ex} \sim 148$ μm по толщине кристалла, то есть его принадлежности к мозаичным кристаллам класса b, показал, что наблюдаемое различие действительно обусловлено мозаичностью кристалла. Результирующая зависимость ПРИ+ДТИ, рассчитанная с учетом мозаичности для обеих компонент, (кривая 3) близка к экспериментальной. Рассчитанные значения выхода $Y^{calc} = 1.94 \cdot 10^{-6}$ фотон/электрон и ширины ориентационной зависимости $\Delta\Theta_{calc} = 2.67$ мрад удовлетворительно согласуются с результатами измерений $Y^{exp} = (1.63 \pm 0.008) \cdot 10^{-6}$ фотон/электрон.

Разница между результатами расчёта и эксперимента может быть обусловлена погрешностью нормировки, предположением об однородности распределения мозаичности по толщине кристалла и использованной оценкой величины σ_m . В зависимости от величины σ_m и соотношения "мозаичной" и "совершенной" компонент кристалла будет меняться выход излучения и ширина ОЗ. Другой причиной этого различия может быть одновременная регистрация нескольких фотонов от разных электронов как один фотон большей энергии (эффект наложений). О возможности этого эффекта свидетельствует тот факт, что положение максимума ориентационной зависимости не совпадает с её центром.

Как уже отмечалось, обе кристаллические мишени вырезаны из одного и того же образца естественного алмаза, поэтому их микроструктура должна быть примерно одинаковой. Измерения для угла наблюдения 90° дают нижнюю оценку характерных размеров блоков $l > l_{ex} \approx 7$ μm , а результаты измерений для угла наблюдения 4° дают верхнюю оценку этой величины $l \ll l_{ex} \approx 148$ μm . Следовательно, характерные размеры микро блоков в образце естественного алмаза из которого вырезаны мишени, использовавшиеся в экспериментах [10] и [19], находятся в пределах 7 $\mu\text{m} < l < 148$ μm .

С увеличением энергии фотонов для любого несовершенного кристалла применимость модели мозаичного кристалла класса b становится более оправданной [9]. Опыт показывает, что теория ПРИ в кинематическом приближении описывает результаты измерений в совершенных кристаллах с погрешностью не хуже 10-15% [20]. Примерно с такой же точностью теория дифракции рентгеновского излучения в мозаичных кристаллах описывает выход дифрагированных реальных фотонов в кристаллах класса b [21]. Следовательно, по результатам измерений ориентационных зависимостей или угловых распределений выхода излучения для нескольких углов наблюдения и сопоставления с результатами расчёта выхода ПРИ и дифрагированных реальных фотонов (ДТИ или ДПИ) для мозаичного и совершенного кристаллов можно определить для какого угла наблюдения начинается переход из одного класса в другой, то есть оценить средний размер блоков, из которых состоит исследуемый образец.

Здесь необходимо подчеркнуть необходимость измерения угловых распределений или ориентационных зависимостей, поскольку при измерении спектра в одной

точке всегда существует вероятность ошибки определения положения кристалла или детектора, что приведет к неточности интерпретации результатов измерений. К тому же типичная погрешность определения выхода излучения в таких экспериментах обычно не превышает 10-15%, что так же приведет к ошибке в интерпретации. Такие же измерения могут быть использованы при выборе кристаллов для получения интенсивных пучков рентгеновского излучения при прохождении быстрых электронов через мозаичные кристаллы класса *b* для прикладных, в том числе и медицинских, применений [7,13].

Измерения для нескольких углов наблюдения требуют больших временных затрат, как на проведение измерений, так и на перестановку детекторов излучения и выбор оптимальных режимов работы ускорителя и экспериментальной аппаратуры. В соответствии с (1)-(3) такое же изменение ширины "столика" Дарвина и длины первичной экстинкции, как и при использовании разных углов наблюдения, происходит с увеличением порядка отражения из-за уменьшения величины F и сомножителя n^{-1} . Поэтому информация о размерах блоков может быть получена и за более короткое время в измерениях угловых распределений или ориентационных зависимостей выхода излучения для одного угла наблюдения, но нескольких порядков отражения. Обычно в зависимости от типа исследуемого кристалла и используемой регистрирующей аппаратуры в эксперименте уверенно регистрируется от 3 до 6-7 порядков отражения, см., например, [10,16,22]. Такие измерения позволят проследить переход из одного описания в другое, как и при использовании одного порядка отражения и нескольких углов наблюдения, и, следовательно, оценить характерные размеры микро блоков. Возникающая в этом случае проблема сильной зависимости выхода излучения от порядка отражения, требующая большего времени измерения для старших порядков отражения по сравнению с первым, может быть решена при помощи поглотителя известной толщины с последующим учетом при обработке результатов измерений.

Заключение и выводы

Результаты проведенных исследований кратко могут быть сформулированы следующим образом:

1) Зависимость интенсивности излучения быстрых электронов в кристалле от несовершенства его структуры позволяет ставить задачу количественной оценки степени несовершенства структуры кристаллических образцов по характеристикам регистрируемого излучения.

2) Слабая зависимость интенсивности ПРИ от несовершенства структуры не позволяет эффективно использовать этот тип излучения для анализа микроструктуры.

3) Регистрация выхода излучения под брэгговскими углами (ДПИ+ПРИ+ДТИ) для разных углов наблюдения (разных порядков отражения) и сопоставление с результатами расчёта для этих экспериментальных условий в рамках разных моделей позволяет получить информацию о характерных размерах блоков, из которых состоит исследуемый образец.

Работа выполнена при частичной поддержке программы внутренних грантов БелГУ.

Литература

1. Рябов В.А. Эффект каналирования. – М.: Энергоатомиздат, 1994 – 240с.
2. Барышевский В.Г., Феранчук И.Д. О переходном излучении гамма-квантов в кристалле. //ЖЭТФ. 1971. Т. 61. С.944-948.
3. Гарибян Г.М., Ян Ши Квантовая макроскопическая теория излучения равномерно движущейся заряженной частицы в кристалле. //ЖЭТФ. 1971. Т. 61. С.930-943.
4. Ohler M., Baruchel J., Moore A.W., Galez Ph., Freund A. Direct observation of mosaic blocks in highly oriented pyrolytic graphite. //Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 1997. V.129. P.257-260.



5. А.М. Афанасьев, М.А. Агинян Излучение ультрарелятивистских частиц при прохождении через идеальные и мозаичные кристаллы.//ЖЭТФ. 1978. Т.74. Вып.2. С.570-579.
6. А.Н. Балдин, И.Е. Внуков, Д.А. Нечаенко, Р.А. Шатохин Влияние мозаичности кристаллов на характеристики параметрического рентгеновского излучения // Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. 2006. Т.744. серия физическая. "Ядра, частицы, поля". вып.3(31). С.51-65.
7. Внуков И.Е., Жандармов Ю.В., Шатохин Р.А. Источник рентгеновского излучения с перестраиваемой энергией для медицинских целей // Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. 2008. т.808. серия физическая. "Ядра, частицы, поля". вып.2(38). С.25-36.
8. Бакланов Д.А., Балдин А.Н., Внуков И.Е., Нечаенко Д.А., Шатохин Р.А. Соотношение вкладов дифрагированного тормозного излучения и параметрического рентгеновского излучения в совершенных кристаллах.// Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. 2007. Т.763. серия физическая. "Ядра, частицы, поля". вып.1(33). С.41-56.
9. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: Изд. Иностран. Лит. 1950. 464 с.
10. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Каратаева Е.А. О вкладе дифракции реальных фотонов в наблюдаемые спектры параметрического рентгеновского излучения электронов в совершенных кристаллах // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2006. вып.4. С.72-85.
11. Розум Е.И. Изготовление, исследование и некоторые применения монокристаллических мишеней для каналирования //Ред. "Журнала Известия Физика" – Томск. 1979. Деп. В ВИНТИ 03.10.79. № 3459
12. Nitta H. Kinematical theory of parametric X-ray radiation //Phys. Lett. 1991. V.A158. P.270-274.
13. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Шатохин Р.А. Использование мозаичных кристаллов для генерации интенсивных пучков рентгеновского излучения //Письма ЖТФ. 2007. Т.33. вып.14.- С.87-94.
14. Adischev Y.N., Arishev S.N., Vnukov I.E., Vukolov A.V., Potylitsyn A.P., Kuznetsov S.I., Zabaev V.N., Kalinin B.N., Kaplin V.V., Uglov S.R., Kubankin A.S., Nasonov N. Angular distribution of X-ray radiation by 500 MeV electrons in a tungsten crystal //Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. -V.201.- P.114-122
15. Адищев Ю.Н., Воробьев С.А., Забаев В.Н., Калинин Б.Н., Курков А.А., Потылицын А.П. Экспериментальное исследование гамма-излучения электронов при каналировании в кристалле алмаза// Ядерная Физика. 1982. т.35. вып. 1. С.108-116.
16. Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Науменко Г.А., Падалко Д.В., Потылицын А.П. Параметрическое рентгеновское излучение электронов в мозаичных кристаллах // Известия ВУЗов "Физика". 2001. Т.44. N.3. С.53-65.
17. Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Кирьяков А.А., Науменко Г.А., Падалко Д.В., Потылицын А.П. Мягкая компонента излучения каналированных электронов в кристалле кремния // Известия ВУЗов "Физика". 2001. Т.44. No.3. С.71-80.
18. Chabot M., Nicolai P., Wohrer K., Rozet J.P., Touati A., Chetioui A., Vernhet D. and Politis M.F. X-ray reflectivities, at low and high order of reflection, of flat highly oriented pyrolytic graphite crystals // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 1991. Vol.61. P.377-384.
19. Chefonov O.V., Kalinin B.N., Naumenko G.A., Padalko D.V., Potylitsin A.P., Vnukov I.E. Radiation from relativistic electron in carbon samples with different structure at large angles ($\gg \gamma^{-1}$) //IV International Symposium "RADIATION from RELATIVISTIC ELECTRONS in PERIODIC STRUCTURES". September 13-16. 1999. Lake Baikal. Russia.
20. Brenzinger K.-H., Limburg B., Backe H., Dambach S., Euteneuer H., Hagenbuck F., Herberg C., Kaiser K.H., Ketting O., Kube G. et al., How narrow is the line width of parametric X-ray radiation. // Phys. Rev. Lett. 1997. V.79. P. 2462-2465.
21. Bogomazova E.A., Kalinin B.N., Naumenko G.A. Padalko D.V., Potylitsyn A.P., Sharafutdinov A.F., Vnukov I.E. Diffraction of real and virtual photons in pyrolytic graphite crystal as source of intensive quasisimonochromatic X-ray beam // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2003. V.201. P.276-291
22. Fiorito R.B., Rule D.W., Maruyama X.K. et al. Observation of higher order parametric x-ray spectra in mosaic graphite and single silicon crystals. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 71. p. 704-707.

ESTIMATION OF CRYSTAL SAMPLE STRUCTURE BY MEANS OF FAST ELECTRONS RADIATION

D.A. Baklanov, I.E. Vnukov, Yu.V. Zhandarmov, R.A. Shatokhin

Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia

Dependence of radiation characteristics emitted under fast electrons penetration across a crystal on the sample internal structure quality is analyzed. Method of micro block size estimation on parametric X-ray radiation and diffracted bremsstrahlung and transition radiation yield ratio for different observation angles is suggested. Possibility of micro block size estimation on yield ratio of emission mechanism for one observation angle and several diffraction orders is discussed.

Key words: mosaic crystal, fast electron, emission, diffraction, micro block, parametric X-ray radiation, primary extinction length, observation angle, diffraction order.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТУРА ПОСТОЯННОЙ СКОРОСТИ ОСНОВАНИЯ ГИДРОТЕХНИЧЕСКОГО СООРУЖЕНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ КРИВОЛИНЕЙНОГО ВОДОУПОРА

Э.Н. Береславский, Л.А. Александрова

Санкт-Петербургский государственный университет гражданской авиации
196210, г. Санкт-Петербург, ул. Пилотов, 36
e-mail: beres@nwgsm.ru

Строится подземный контур заглубленной прямоугольной плотины, углы которой округлены по кривым постоянной величины скорости фильтрации, в случае, когда водопроницаемое основание подстилается криволинейным водоупором, в состав которого входит горизонтальный участок, характеризующимся постоянством скорости обтекания. Решение соответствующей многопараметрической смешанной задачи теории аналитических функций осуществляется с помощью применения принципа симметрии Римана-Шварца и полуобратного варианта способа годографа скорости, впервые предложенного П. Я. Полубариновой-Кочиной и И. Н. Кочиной. Приводятся результаты численных расчетов и дается гидродинамический анализ влияния основных физических параметров модели на форму и размеры подземного контура плотины, горизонтального и криволинейных участков водоупора. Отмечается предельный случай, когда водоупор на всем своем протяжении является горизонтальным (случай П. Я. Полубариновой-Кочиной и И. Н. Кочиной).

Ключевые слова: фильтрация, грунтовые воды, плотина, принцип симметрии Римана-Шварца, полуобратный вариант способа годографа скорости.

Введение. Проблема подбора плавных подземных профилей оснований гидротехнических сооружений впервые была рассмотрена в [1], где фигурировала так называемая обратная краевая задача теории плоской установившейся фильтрации грунтовых вод [2]. Эта работа дала толчок к развитию целого направления – отысканию контуров гидротехнических сооружений по каким-либо заданным на них свойствам, – и принадлежащих главным образом казанской школе математиков и механиков (см., например, [3,4]).

Ниже рассматривается построение не только плавного подземного контура заглубленной прямоугольной плотины, углы которой округлены по кривым постоянной величины скорости фильтрации, но и определяется очертание подстилающего водопроницаемое основание криволинейного водоупора, в состав которого входит горизонтальный участок, характеризующегося постоянством скорости обтекания. Решение соответствующей многопараметрической смешанной задачи теории аналитических функций осуществляется с помощью применения принципа симметрии Римана-Шварца [2,5] и полуобратного варианта способа годографа скорости [6]. Отмечается предельный случай течения, когда водоупор на всем своем протяжении является горизонтальным (случай П. Я. Полубариновой-Кочиной и И. Н. Кочиной [1,2]).

1. Постановка задачи. Рассматривается плоское установившееся течение под водонепроницаемым подземным контуром заглубленной прямоугольной плотины $ABCC_1B_1A_1$ (рис. 1). Пусть контур основания плотины AA_1 состоит из двух вертикальных отрезков AB и A_1B_1 одинаковой длины d_1 , среднего горизонтального отрезка C_1DC длиной $2l_1$ и примыкающих к ним дуг кривых BC и B_1C_1 с постоянной величиной скорости их обтекания $|w| = v_0$. Снизу область течения ограничена водоупором G_1G , состоящим из горизонтального F_1EF и криволинейных G_1F_1 и FG участков, на которых величина скорости фильтрации также постоянна $|w| = u_0$ ($0 \leq u_0 < v_0$). Предполагается,

что границы верхнего и нижнего бьефов горизонтальны, грунт однороден и движение подчиняется закону Дарси с известным коэффициентом фильтрации $\kappa = \text{const}$. Действующий на сооружение напор H , скорость обтекания v_0 , фильтрационный расход Q и глубина T горизонтального участка водоупора F_1EF считаются заданными.

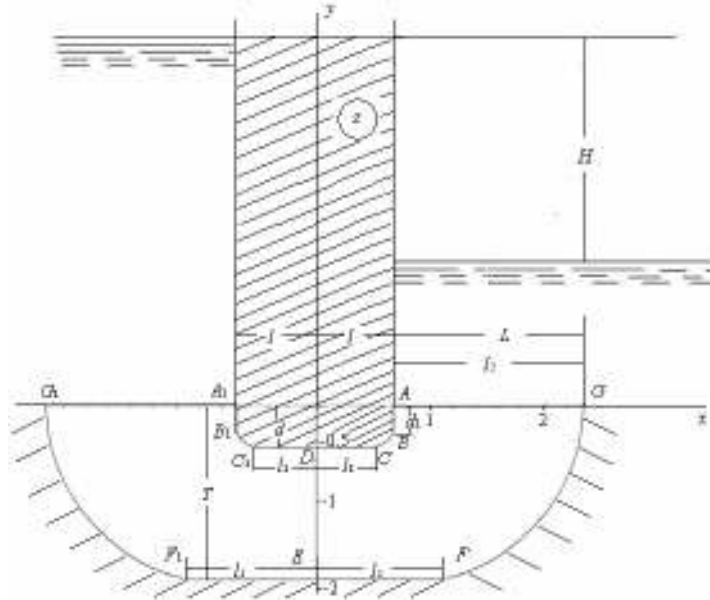


Рис. 1. Профиль гидротехнического сооружения и криволинейного водоупора, рассчитанные при $v_0 = 1$, $H = 2$, $Q = 1.14$, $\Delta l = 0.296$ и $\Delta d = 0.295$

Введем комплексный потенциал движения $\omega = \varphi + i\psi$, где φ – потенциал скорости, ψ – функция тока и комплексную координату $z = x + iy$, отнесенные соответственно к κH и H . Задача состоит в определении положения кривых BC , B_1C_1 , G_1F_1 и GF при следующих краевых условиях:

$$\begin{aligned}
 A_1G_1: y=0, \varphi = -0.5H; & & A_1B_1: x=-1, \psi = Q; \\
 C_1D_1: y=-d, \psi = Q; & & AB: x=1, \psi = Q; \\
 AG: y=0, \varphi = 0.5H; & & F_1E_1: y=-T, \psi = 0; \\
 B_1C_1 \text{ и } BC: |w| = v_0; & & G_1F_1 \text{ и } GF: |w| = u_0.
 \end{aligned}
 \tag{1.1}$$

2. Построение решения. Области комплексного потенциала w и комплексной скорости, которые отвечают краевым условиям (1.1), представляют собой соответственно прямоугольник $-0.5H < \text{Re } w < 0.5H$, $0 < \text{Im } w < Q$ и круговой десятиугольник плоскости w , являющийся правой половиной кольца $0 \leq u_0 < |w| < v_0$, $\text{Re } w > 0$ с двумя разрезами вдоль вещественной оси (рис. 2).

Согласно традиционному подходу ([5], с. 175) подобные многоугольники посредством логарифмической функции преобразуются в прямолинейные с последующим применением формулы Кристоффеля-Шварца. Однако этот путь увеличивает количество неизвестных параметров конформного отображения. К этому дополняются и трудности, связанные с нарушением конформности отображения в критических точках $w = 0$ и $w = \infty$ при этом используемой логарифмической функции.

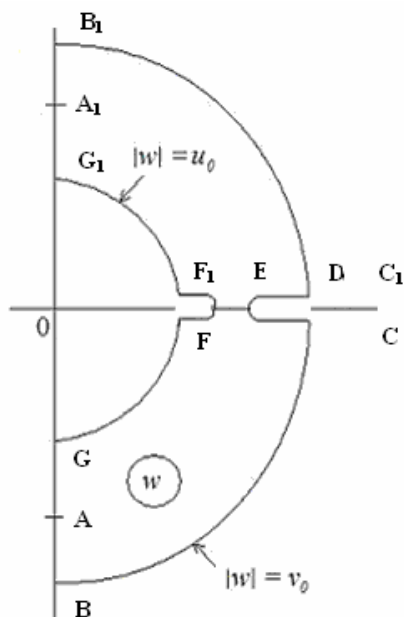


Рис. 2. Область комплексной скорости

Разработана также методика построения отображающих функций на основе решений соответствующих уравнений класса Фукса [7].

В отличие от имеющихся возможностей решения задачи ниже используется принцип симметрии Римана-Шварца [2,5], который приводит к еще более существенному сокращению неизвестных констант. Конформное отображение реализуется при этом непосредственно в замкнутой форме через специальные функции, простой и удобной для последующих практических целей, все искомые параметры отображения определяются попутно в ходе построения решения.

Ввиду полной симметрии на плоскостях z , ω и w ограничимся рассмотрением правой половины области движения $ABCDEF$ (рис. 1) и соответствующих ей одноименных областей на плоскостях ω и w (рис. 2).

Учитывая специфические свойства многоугольников в полярных сетках, связанные с обилием прямых углов, удобно при конформном отображении в качестве канонической области взять прямоугольник

плоскости τ [8] $0 < \text{Re } \tau < 0.5$, $0 < \text{Im } \tau < 0.5\rho$, $\rho(k) = K'/K$, $K' = K(k')$, $k' = \sqrt{1 - k^2}$ где $K(k)$ – полный эллиптический интеграл первого рода при модуле k [9]. Тогда функция, совершающая конформное отображение этого прямоугольника на четверть кольца плоскости комплексной скорости w , выражается как

$$w(\tau) = v_0 \exp(\tau - 0.5)\pi i, \quad (2.1)$$

откуда определяется физический параметр $u_0 = v_0 \exp(-0.5\pi\rho)$.

Для решения задачи используем первый вариант способа годографа скорости ([6], с.250 – 251). Конформно отображая прямоугольник плоскости ω на прямоугольник канонической области τ , принимая во внимание соотношение (2.1) и поступая аналогично [10], приходим к зависимостям

$$\frac{d\omega}{d\tau} = - \frac{M \text{sn}(2K\tau, k) \text{cn}(2K\tau, k) \text{dn}(2K\tau, k)}{\Delta(\tau)},$$

$$\frac{dz}{d\tau} = - \frac{M \text{sn}(2K\tau, k) \text{cn}(2K\tau, k) \text{dn}(2K\tau, k) \exp((0.5 - \tau)\pi i)}{v_0 \Delta(\tau)} \quad (2.2)$$

$$\Delta(\tau) = \sqrt{[1 - \lambda^2 \text{sn}^2(2K\tau, k)] [1 - n^2 \text{sn}^2(2K\tau, k)] [A^2 + (1 - A^2) \text{sn}^2(2K\tau, k)]}.$$

Здесь $M > 0$ – масштабная постоянная моделирования, $\lambda = \sqrt{1 - k^2 B^2}$, $n = \sqrt{1 - k^2 C^2}$, $A = \text{sn}(2K\tau_A, k')$, $B = \text{sn}(2K\tau_D, k')$, $C = \text{sn}(2K\tau_E, k')$, $\text{sn}(\varphi, k)$, $\text{cn}(\varphi, k)$ и $\text{dn}(\varphi, k)$ – эллиптические функции Якоби при модуле k . При этом должно выполняться соотношение

$$\rho(m) = \frac{K'(m)}{K(m)} = \frac{2Q}{H}, \quad m = k \sqrt{\frac{(1 - k'^2 A^2 B^2)(1 - k'^2 C^2)}{(1 - k'^2 B^2)(1 - k'^2 A^2 C^2)}}, \quad (2.3)$$

которое служит для определения модуля k .

Интегрируя (2.2) вдоль контура области τ , получаем выражения для геометрических и фильтрационных характеристик (используются для нахождения неизвестных параметров отображения A , B , C и M)

$$\begin{aligned} \frac{M}{v_0} \int_0^{0.5} X_{BC} dt = \Delta l, & \quad \frac{M}{v_0} \int_0^{0.5} Y_{BC} dt = \Delta d, \\ M \left(\int_0^{0.5\rho} \Phi_{EF} dt + \int_0^{0.5} \Phi_{FG} dt \right) = 0.5H, & \quad \frac{M}{u_0} \int_0^{0.5} Y_{FG} dt = T, \end{aligned} \quad (2.4)$$

координаты точек подземного контура флюتبета $X_{BC}(t), Y_{BC}(t)$, а также координаты криволинейной части водоупора $X_{FG}(t), Y_{FG}(t), 0 \leq t \leq 0.5$.

Здесь $\Delta l = l - l_1, \Delta d = d - d_1, L = l + l_2, X_{BC}, Y_{BC}, \Phi_{EF}, \Phi_{FG}, \Phi_{AG}, X_{FG}$ и Y_{FG} – выражения правых частей (2.2) на соответствующих участках контура плоскости τ . Полагая в уравнениях для координат $t=0.5$, находим искомые размеры подземного контура флюتبета и водоупора

$$l_1 = x_{BC}(0.5), \quad d_1 = y_{BC}(0.5), \quad l_3 = L - x_{FG}(0.5), \quad l_2 = \frac{M}{v_0} \int_a^{0.5\rho} \Phi_{AG} \exp(\pi t) dt. \quad (2.5)$$

3. Случай П. Я. Полубариновой-Кочиной и И. Н. Кочиной. Остановимся на случае [1,2], когда водоупор на всем своем протяжении является горизонтальным. Тогда в плоскости движения z точки G и F сливаются на бесконечности, а прямоугольник плоскости вспомогательной переменной τ превращается в полуполосу $0 < \text{Re } \tau < 0.5, 0 < \text{Im } \tau < \infty$, поскольку модуль $k=0, k'=0, K=0.5\pi, K'=\infty$ и, следовательно, $\rho = \infty$. Из формул (2.5) вытекает, что при этом $l_2 = \infty, l_3 = \infty$, а выражения (2.4) для H и T удастся проинтегрировать в явном виде:

$$H = \frac{2MK(k)}{\pi \sqrt{(1-C^2)(1-A^2B^2)}}, \quad T = \frac{M}{v_0 \sqrt{(1-A^2)(1-B^2)(1-C^2)}}, \quad k = \sqrt{\frac{(1-A^2B^2)(1-C^2)}{(1-B^2)(1-A^2C^2)}}. \quad (3.1)$$

Формулы (3.1) совпадают с соответствующими формулами [2] (стр.191, формулы (7.17) и (7.18)), если учесть, что параметры α и β из [2] связаны с данными следующими соотношениями:

$$\alpha = \frac{B}{kC} \sqrt{\frac{(1-C^2)}{(1-B^2)}}, \quad \beta = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{(1-C^2)}{(1-B^2)}}.$$

4. Схема вычислений и анализ численных результатов. На рис.1 изображена картина течения, рассчитанная при $v_0 = 1, H = 2, Q = 1.14, T = 1.934, \Delta l = 0.308$ и $\Delta d = 0.295$. Результаты расчетов влияния определяющих физических параметров $v_0, H, Q, T, \Delta l$ и Δd на размеры l_1, d_1 (а, следовательно, l и d), l_2 и l_3 приведены в табл. 1–3. В каждом из блоков таблиц (они разделены вертикальными линиями) варьируется (в допустимом диапазоне) один из указанных параметров, а значения остальных фиксируются $v_0 = 1, H = 2, Q = 1.14, T = 1.934, \Delta l = 0.308$ и $\Delta d = 0.295$. Анализ данных таблиц и рисунков позволяет сделать следующие выводы.

Таблица 1

v_0	l_1	d_1	l_2	l_3	H	l_1	d_1	l_2	l_3
0.085	0.838	0.375	2.038	1.835	0.12	0.085	0.076	2.646	0.900
0.090	0.662	0.329	2.035	1.677	0.14	0.170	0.133	2.410	1.028
0.100	0.397	0.161	1.640	1.051	0.16	0.273	0.186	2.228	1.160
0.120	0.359	0.118	1.026	1.018	0.18	0.395	0.230	2.072	1.288

Таблица 2

Q	l_1	d_1	l_2	l_3	T	l_1	d_1	l_2	l_3
0.14	0.571	0.226		2.014	1.1	0.710	0.055	1.265	1.543
0.16	0.587	0.209	2.808		1.3	0.682	0.101	1.454	1.562
0.18	0.597	0.200	3.192	2.846	1.7	0.598	0.202	1.795	1.626
0.20	0.601	0.195	3.579	3.245	1.9	0.553	0.246	2.020	1.668

Таблица 3

Δl	l_1	d_1	l_2	l_3	Δd	l_1	d_1	l_2	l_3
0.30	0.617	0.203	2.294	1.904	0.25	0.374	0.537	2.695	2.128
0.37	0.395	0.349	2.536		0.30	0.586	0.209	2.311	1.901
0.44	0.102	0.649	2.751	2.056	0.35	0.723	0.066	1.992	1.651
0.50	0	0.723	2.759	2.058	0.40	0.738	0	1.974	1.627

Уменьшение скорости обтекания и увеличение действующего на сооружение напора приводят к росту всех размеров плотины, а также величины горизонтального участка водопора. Из табл. 1 следует, что изменение скорости в 1.41 раза увеличивает ширину l_1 и толщину d_1 соответственно на 133 и 218 %. При этом наиболее существенное влияние на ширину плотины и ее глубину оказывает действующий напор: из второго раздела табл. 1 видно, что при возрастании параметра H на 50% величины l_1 и d_1 изменяются в 4.6 и 3 раза соответственно.

Из второго раздела табл. 2 следует, что наряду с параметром H мощность пласта также сильно влияет на глубину d_1 , изменяя последнюю в 4.6 раза.

Разделы табл.3, относящиеся к параметрам Δl и Δd , отражают закономерность, которая является естественной с физической точки зрения: увеличению разности Δl (Δd) сопутствует убывание (рост) ширины плотины l и рост (убывание) ее толщины d . Так, с изменением Δl на 47% ширина l_1 уменьшается в 6.1 раза, толщина d_1 увеличивается в 3.6 раза, а при изменении Δd на 40% ширина плотины l_1 увеличивается на 97%, в то время, как толщина d_1 убывает уже на 714%.

Последняя строка табл.3 соответствует случаям обтекания шпунта (зуба), когда $l_1=0$, $l=\Delta l$, и флютбета с горизонтальной вставкой, где $d_1=0$, $d=\Delta d$.

Литература

1. Кочина И. Н., Полубаринова-Кочина П. Я. О применении плавных контуров основания гидротехнических сооружений// ПММ. – 1952. – Т. 16. – Вып. 1. – С. 57–66.
2. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. – М.: Гостехиздат, 1977. – 664 с.
3. Тумашев Г. Г., Нужин М. Т. Обратные краевые задачи и их приложения. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 1965. – 333с.
4. Аксентьев Л. А., Ильинский Н. Б., Нужин М. Т., Салимов Р.Б., Тумашев Г.Г. Теория обратных краевых задач для аналитических функций и ее приложения// Итоги науки и техники. Мат. анализ. – 1980. – Т. 18. – С. 67–124.
5. Коппенфельс В., Штальман Ф. Практика конформных отображений. – М.: Изд-во иностран. лит., 1963. – 406 с.
6. Аравин В. И., Нумеров С. Н. Теория движения жидкостей и газов в недеформируемой пористой среде. – М. – Л.: ОНТИ, 1936. – 365 с.
7. Береславский Э. Н. О дифференциальных уравнениях класса Фукса, связанных с конформным отображением круговых многоугольников в полярных сетках// Дифференц. уравнения. – 1997. – Т. 33. – № 3. – С. 296–301.
8. Береславский Э. Н. О конформном отображении некоторых круговых многоугольников на прямоугольник// Изв. вузов. Математика. – 1980. – № 5. – С. 3–7.

9. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Наука, 1971. – 1108 с.
10. Береславский Э. Н. Определение подземного контура заглубленного флютбета с участком постоянной скорости при наличии соленых подпорных вод// ПИММ. – 1998. – Т. 62. – Вып. 1. – С. 169–175.

MODELING OF A CONSTANT VELOCITY CONTOUR OF THE DAM WITH EXISTENCE OF THE CURVED WATERSUPPORT

E.N. Bereslavskii, L.A. Aleksandrova

St.-Petersburg State University of Civil Aviation,
38 Pilotov str., St.-Petersburg, 196210 Russia
e-mail: beres@nwgsu.ru

It is built underground keyline of the deep square-wave dam, which comes are rounded on crooked constant value of the velocities to filtration when permeable foundation is laid under curvilinear watersupport, in composition which enters the horizontal length, herewith rest area are characterized by constancy to velocities flows around. The decision corresponding to multivariable mixed problem to theories analytical function is realized by means of using the principle to symmetries Rimann-Schwartz and floorinverse of the variant of the way godograf velocities, for the first time offered by P.YA. Polubarinova-Kochinoy and I.N. Kochinoy. Happen to the results numerical calculation and is given hydrodinamical analysis of the influence main physical parameters to models on the form and sizes of the underground keyline of the dam, horizontal and curvilinear area watersupport. It is marked limiting case, when watersupport on all its length is horizontal (the case P.YA. Polubarinova-Kochinoy and I.N. Kochinoy).

Key words: filtration, ground water, dam, principle to symmetries Rimann-Schwartz and floorinverse of the variant of the way godograf velocities.

О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ РЕШЕНИЯ ЛИНЕАЛИЗОВАННОГО ПО СКОРОСТИ УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА В СФЕРОИДАЛЬНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

Н. В. Малай, А. В. Лиманская

Белгородский государственный университет,
308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
e-mail: malay@bsu.edu.ru; limanskayaanna@mail.ru

Получено решение линеаризованного по скорости уравнения Навье-Стокса в сфероидальной системе координат при малых относительных перепадах температуры в окрестности аэрозольной частицы с помощью обобщенных степенных рядов. Проведенные численные оценки показали хорошее их согласие с известными в литературе результатами.

Ключевые слова: обтекание, сфероид, уравнение Навье-Стокса.

Введение. В последние годы все большее значение приобретают исследования физических и динамических свойств аэродисперсной системы и создание на этой основе математических моделей, позволяющих оценивать ее поведение. Аэродисперсной системой называют однокомпонентную или многокомпонентную газообразную среду, с взвешенными в ней частицами.

Наибольший интерес представляют аэродисперсные смеси, состоящие из двух фаз, одна из которых есть твердые (жидкие) частицы, а вторая – газ. Газы, с взвешенными в нем частицами (твердыми или жидкими), так и находящиеся в плотноупакованном виде (порошки) называют аэрозолями, а сами частицы – аэрозольными. При этом размер частиц дисперсной фазы находится в очень широких пределах: от макроскопических (~ 500 мкм) до молекулярных (~ 10 нм) значений, и варьирует соответственно концентрация частиц – от одной частицы до высококонцентрированных систем ($> 10^{10}$ см⁻³). В настоящее время, с учетом развития нанотехнологий и наноматериалов, большую перспективу представляет применение ультрадисперсных (нано-) материалов в нанoeлектронике и нанотехнологиях в целом.

Для классификации аэрозольных частиц по размерам применяют критерий Кнудсена:

$$Kn = \frac{\lambda}{R},$$

где λ – средняя длина свободного пробега молекул газообразной среды; R – характерный размер аэрозольной частицы.

Частицы называются крупными, если $Kn \leq 0.01$, умеренно крупными при $0.01 \leq Kn \leq 0.3$ и мелкими при $Kn \gg 1$.

Аэрозоли играют большую роль в природе и жизни человека, и находят все более широкое применение в технике, медицине, сельском хозяйстве и быту. Так, атмосферный воздух представляет собой наиболее распространенную естественную аэрозольную систему. В связи с интенсификацией производства, использованием авиационной и ракетной техники с каждым годом увеличивается выброс в атмосферу вместе с промышленными дымами высодисперсных аэрозольных частиц. Аэрозольные загрязнения наиболее динамичны и представляют собой непосредственную угрозу окружающей среде. В промышленности аэрозоли используют в различных технологических процес-

сах (производстве полупроводниковых материалов, покрытие дисперсных и гранулированных материалов, растворения поверхностного слоя дисперсной среды, сушки, осаждения и т.д.). Аэрозольные препараты широко используются в медицине для дезинфекции и ингаляции, в ветеринарии – для обработки животных, в сельском хозяйстве – для защиты посевов от вредителей, обработки складских помещений, поливов угодий. Значительную роль играют аэрозоли и в пищевой промышленности (получении сухого молока, при копчении мясных и рыбных продуктов используют дым, который придает этим продуктам соответствующий вкус и т.д.). Таким образом, важной причиной возрастающего интереса к изучению аэродисперсных систем является разнообразие и фундаментальный характер задач, которые возникают в этой области.

Среднее расстояние между аэрозольными частицами у значительной части встречающихся на практике аэродисперсных систем намного больше характерного размера частиц. В таких системах учет влияния аэрозоля на развитие физического процесса можно проводить, основываясь на знании законов динамики движения и тепло- и массообмена с бесконечной окружающей средой отдельных аэрозольных частиц. Поэтому изучение закономерностей движения отдельных частиц в газообразных как однородных, так и неоднородных средах является важной актуальной задачей, представляющей значительный теоретический и практический интерес.

Следует отметить, что число Кнудсена позволяет разграничить всю область газа, окружающую частицу на – гидродинамическую и газокинетическую. В гидродинамической области решаются обычные уравнения газовой динамики, включающие уравнения гидродинамики (уравнения Навье-Стокса и непрерывности), уравнения тепло- и массопереноса и уравнение состояния. Основная трудность при таком подходе заключается в нахождении решения уравнений гидродинамики. Вследствие общей их нелинейной природе получить точные решения уравнений гидродинамики не представляется возможным. Многочисленные парадоксы гидродинамики указывают на то, что до окончательной теории еще далеко.

Кроме того, следует отметить, что геометрия задачи также накладывает свой отпечаток на поиск решения уравнений газовой динамики. Многие частицы, входящие в состав аэродисперсной системы, имеют форму поверхности отличной от сферической, например, сфероидальную (эллипсоид вращения). В данной работе рассматривается гравитационное движение твердой частицы сфероидальной формы при малых относительных перепадах температуры в ее окрестности. Получено аналитическое решение этого уравнения Навье – Стокса с помощью обобщенных степенных рядов. Проведено сравнение полученных результатов с известными в литературе, которое показало их хорошее согласие.

Гравитационное движение, т.е. движение аэрозольной частицы в поле силы тяжести, происходящее за счет разности удельных весов частицы и окружающей среды, является наиболее распространенным и на этом движении можно показать некоторые особенности решения линеаризованного по скорости уравнения Навье-Стокса.

I. Постановка задачи. Рассмотрим движение аэрозольной частицы, имеющей форму сплюснутого сфероида, при малых числах Рейнольдса и Пекле в газообразной среде заполняющей все пространство под действием гравитационной силы. Под действием приложенной силы и силы вязкого сопротивления среды аэрозольная частица приобретает постоянную скорость. Если перейти в систему координат, связанную с частицей, то задача по существу сводится к задаче обтекания неподвижной аэрозольной частицы, имеющей форму сплюснутого (вытянутого) сфероида, однородным плоскопараллельным потоком газа со скоростью U_∞ ($U_\infty \parallel OZ$), параллельно его оси симметрии (рис. 1).

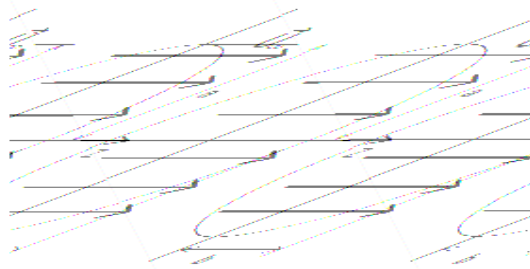


Рис. 1. Обтекание неподвижной аэрозольной частицы, имеющей форму сплюснутого сфероида, однородным плоскопараллельным потоком газа (жидкости)

Обтекание рассматривается при малых относительных перепадах температуры. Под малыми относительными перепадами температуры понимают следующее. Если через T_S обозначить среднюю температуру поверхности сфероида, а через T_∞ – температуру в невозмущенном потоке, то перепад температуры считается малым, если выполняется условие $(T_S - T_\infty)/T_\infty \ll 1$. При выполнении этого условия коэффициенты молекулярного переноса (вязкость, теплопроводность и др.) можно считать постоянными величинами, а газ рассматривать как сплошную среду.

Описание обтекания сфероида проводится в стоксовском приближении в сфероидальной системе координат (ξ, η, φ) . Криволинейные координаты (ξ, η, φ) связаны с декартовыми координатами, следующими соотношениями [1]:

$$x = c \cdot sh\xi \cdot \sin\eta \cdot \cos\varphi, \quad y = c \cdot ch\xi \cdot \sin\eta \cdot \sin\varphi, \quad z = c \cdot ch\xi \cdot \cos\varphi, \quad (1.1)$$

$$x = c \cdot ch\xi \cdot \sin\eta \cdot \cos\varphi, \quad y = c \cdot ch\xi \cdot \sin\eta \cdot \sin\varphi, \quad z = c \cdot sh\xi \cdot \cos\varphi \quad (1.2)$$

Здесь $c = \sqrt{b^2 - a^2}$ – в случае вытянутого сфероида ($a < b$, формула(1.1)) и $c = \sqrt{a^2 - b^2}$ – в случае сплюснутого сфероида ($a > b$, формула (1.2)); a и b – полуоси сфероида. При этом положение декартовой системы координат фиксировано относительно частицы таким образом, чтобы начало координат располагалось в центре сфероида, а ось совпадала с осью симметрии сфероида.

При малых числах Рейнольдса распределение скорости U_e и давления P_e описываются следующими уравнениями:

$$\mu_e \Delta \mathbf{U}_e = \nabla P_e, \quad div \mathbf{U}_e = 0 \quad (1.3)$$

с граничными условиями

$$\xi = \xi_0, \quad \mathbf{U}_e = 0 \quad (U_\xi = 0, U_\eta = 0) \quad (1.4)$$

$$\xi \rightarrow \infty, \quad \mathbf{U}_e \rightarrow U_\infty \cos\eta \cdot \mathbf{e}_\xi - U_\infty \sin\eta \cdot \mathbf{e}_\eta, \quad P_e \rightarrow P_\infty \quad (1.5)$$

Здесь U_ξ и U_η – радиальная и касательная компоненты массовой скорости в сфероидальной системе координат; U_∞ – скорость плоскопараллельного потока жидкости, обтекающего частицу ($U_\infty \parallel OZ$); $U_\infty = |U_\infty|$; \mathbf{e}_ξ и \mathbf{e}_η – единичные векторы сфероидальной системы координат; P_∞ – давление в невозмущенном потоке. Поверхности частицы соответствует координатная поверхность с $\xi = \xi_0$.

В граничных условиях (1.4) на поверхности частицы ($\xi = \xi_0$) учтено условия прилипания для радиальной и касательной компонент массовой скорости. На большом расстоянии $\xi \rightarrow \infty$ справедливы граничные условия (1.5).

Сила, действующая на частицу со стороны потока, определяется по формуле [2]

$$F_z = \oint_{(S)} \left(-P_e \cos \eta + \sigma_{\xi\xi} \cos \eta - \frac{sh\xi}{ch\xi} \sin \eta \cdot \sigma_{\xi\eta} \right) dS \quad (1.6)$$

где $dS = c^2 ch^2 \xi \sin \eta \cdot d\eta \cdot d\varphi$ – дифференциальный элемент поверхности; $\sigma_{\xi\xi}$ и $\sigma_{\xi\eta}$ – компоненты тензора напряжений в сфероидальной системе координат,

$$\sigma_{\xi\xi} = \frac{2}{H_\xi} \frac{\mu_e}{H_\xi} \left(\frac{\partial U_\xi}{\partial \xi} + \frac{1}{H_\eta} U_\eta \frac{\partial H_\xi}{\partial \eta} - \frac{H_\xi}{3} \operatorname{div} U_e \right),$$

$$\sigma_{\xi\eta} = \frac{\mu_e}{H_\xi} \left(\frac{\partial U_\eta}{\partial \xi} + \frac{\partial U_\xi}{\partial \eta} - \frac{1}{H_\xi} U_\eta \frac{\partial H_\xi}{\partial \xi} - \frac{1}{H_\xi} U_\xi \frac{\partial H_\xi}{\partial \eta} \right),$$

H_i – коэффициенты Ламэ, ($i = \xi, \eta, \varphi$).

Определяющими параметрами задачи являются материальные постоянные ρ_e , μ_e и сохраняющиеся в процессе обтекания частицы величины – a , T_∞ , U_∞ . (a – наибольшая полуось сфероида). Из этих параметров можно составить безразмерную комбинацию $\operatorname{Re} = (\rho_e a \cdot U_\infty) / \mu_e$ – число Рейнольдса. При $\operatorname{Re} \ll 1$ набегающий поток оказывает лишь возмущающее влияние и поэтому решение уравнений гидродинамики будем искать в виде

$$V_e = V_e^{(0)} + \varepsilon \cdot V_e^{(1)} + \dots, \quad P_e = P_e^{(0)} + \varepsilon \cdot P_e^{(1)} + \dots \quad (\varepsilon = \operatorname{Re}) \quad (1.7)$$

Здесь $V_e = U_e / U_\infty$ и $P_e = P_e / P_\infty$ – безразмерные скорость и давление.

Вид граничных условий на бесконечности, указывает на то, что поиск решений для компонент массовой скорости в нулевом приближении следует искать в виде

$$V_\xi(\xi, \eta) = \frac{\cos \eta}{c \cdot ch \xi \cdot H_\xi} G(\xi), \quad V_\eta(\xi, \eta) = -\frac{\sin \eta}{c \cdot H_\xi} g(\xi), \quad (1.8)$$

где $H_\xi = c \sqrt{ch^2 \xi - \sin^2 \eta}$ – коэффициент Ламэ [1]; $G(\xi)$ и $g(\xi)$ – произвольные функции, зависящие от радиальной координаты ξ .

II. Вывод выражений для компонент массовой скорости. Выражения для компонент массовой скорости и давления могут быть получены с использованием функции тока [1]. Однако, во многих прикладных задачах использование функции тока затруднительно. Поэтому проведем анализ движения аэрозольной частицы, исходя непосредственно из самого линеаризованного по скорости уравнения Навье – Стокса. Для этого поступим следующим образом. Подставляя (1.8) в уравнение непрерывности, устанавливаем связь между функциями $G(\xi)$ и $g(\xi)$:

$$g(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{dG(\lambda)}{d\lambda},$$

где введено обозначение $\lambda = sh \xi$.

Учитывая полученный выше результат и, исключая из (1.3) давление, после несложных, но громоздких преобразований, получаем в конечном итоге следую-



щее неоднородное дифференциальное уравнению третьего порядка для функции $G(\lambda)$:

$$\left(-1 + \frac{1+\lambda^2}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{1}{\lambda}\right) \frac{d^3 G}{d\lambda^3} - \frac{1}{\lambda} \left(1 + \frac{1-\lambda^2}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{1}{\lambda}\right) \frac{d^2 G}{d\lambda^2} + \frac{2}{1+\lambda^2} \left(1 - \frac{1+\lambda^2}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{1}{\lambda}\right) \frac{dG}{d\lambda} - \frac{2}{\lambda(1+\lambda^2)} \left(\frac{\lambda^2-1}{1+\lambda^2} - \frac{1+\lambda^2}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{1}{\lambda}\right) G = -\frac{D}{(1+\lambda^2)^2}, \quad (2.1)$$

где $D = A_2 D^*$, $D^* = \frac{c \cdot F_z}{\pi \mu_e U_\infty} = \text{const}$, с краевыми условиями

$$G(\lambda)|_{\lambda=\lambda_0} = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{G(\lambda)}{c^2(1+\lambda^2)} \rightarrow 1. \quad (2.2)$$

Будем искать решение уравнения (2.1) в виде обобщенных степенных рядов [5-8].

Случай А: $\lambda_0 > 1$

В уравнении (2.1) вводим новую переменную $\nu = 1/\lambda$, и учитывая, что

$\operatorname{arctg} \nu = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\nu^{2n+1}}{2n+1}$ получаем следующее уравнение

$$\left[\nu^3 + 12 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\nu^{2n+5}}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)} \right] \frac{d^3 G}{d\nu^3} + [8\nu^2 + 6 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n+15)\nu^{2n+4}}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)}] \frac{d^2 G}{d\nu^2} + \left[8\nu + 6 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(6n+19)\nu^{2n+3}}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)} \right] \cdot \frac{dG}{d\nu} + \left[-8 + 24 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(n+2)^2 \nu^{2n+2}}{(2n+3)(2n+5)} \right] G = \frac{3}{2} \frac{D}{\nu(1+\nu^2)} \quad (2.3)$$

Найдем сначала решение однородного уравнения, соответствующего неоднородному уравнению (2.3). Точка $\nu = 0$ для этого уравнения является регулярно особой точкой [5-8]. Поэтому его решение ищем в виде обобщенного степенного ряда

$$G = \nu^\rho \sum_{n=0}^{\infty} C_n \nu^n \quad (C_0 \neq 0),$$

подставляя это выражение в (2.3) получаем следующее определяющее уравнение $(\rho-1)(\rho(\rho-2)+8\rho+8) = 0$, корни которого равны соответственно $\rho_1 = 1$, $\rho_2 = -2$, $\rho_3 = -4$. Большему из корней соответствует решение

$$G_1 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(1)} \nu^{n+1} \quad (2.4)$$

Подставляя (2.4) в однородное уравнение (2.3), воспользовавшись правилом перемножения степенных рядов и методом неопределенных коэффициентов, получаем следующую рекуррентную формулу для нахождения коэффициентов $C_n^{(1)}$ ($n > 0$)

$$C_n^{(1)} = -\frac{6}{n(n+3)(n+5)} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-2}{2} \rfloor} (-1)^k \frac{C_{n-2k-2}^{(1)}}{(2k+1)(2k+3)(2k+5)} \cdot \left[(n-2k-1)[6k+19+(n-2k-2)(2n-2k+9)] + 4(k+2)^2(2k+1) \right], \quad (2.5)$$

Здесь $\left[\frac{n}{2} \right]$ – целая часть числа n , $C_0^{(1)} = 1$

Второе решение однородного уравнения (2.3), соответствующее корню определяющего уравнения $\rho_2 = -2$, ищем в виде

$$G_3 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(3)} v^{n-2} + \omega_1 \ln\left(\frac{v}{v_0}\right) \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(1)} v^{n+1} \quad (2.6)$$

Поступая аналогичным образом, найдем следующую рекуррентную формулу для коэффициентов $C_n^{(3)}$ ($n \geq 4$)

$$C_n^{(3)} = -\frac{6}{n(n+2)(n-3)} \sum_{k=0}^{\left[\frac{n-2}{2} \right]} (-1)^k \frac{C_{n-2k-2}^{(3)}}{(2k+1)(2k+3)(2k+5)} \cdot \left[(n-2k-4)[6k+19+(n-2k-5)(2n-2k+3)] + 4(k+2)^2(2k+1) \right], \quad (2.7)$$

где $C_0^{(3)} = 1, C_1^{(3)} = 0, C_2^{(3)} = 1, C_3^{(3)} = 1, \omega_1 = 0$

Третье решение однородного уравнения (2.3) соответствующее корню определяющего уравнения $\rho_2 = -4$ мы не приводим, т.к. оно не удовлетворяет граничному условию на бесконечности ($\xi \rightarrow \infty$).

Исходя из вида правой части уравнения (2.3) подберем аналитическую при $0 \leq v < 1$ функцию $G_2(v)$ так, чтобы она была частным решением неоднородного уравнения (2.3) ($D = D^* \cdot A_2, D^* = -4$):

$$\tilde{G}_2(v) = A_2 G_2(v), \quad G_2(v) = \frac{1}{v} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(2)} v^n + \omega_2 \ln\left(\frac{v_0}{v}\right) G_1(v), \quad (2.8)$$

где $C_0^{(2)} \neq 0$ и $\omega_2 = const$.

Для нахождения функции G_2 функцию $\frac{1}{1+v^2}$ разложим в ряд

$$\frac{1}{1+v^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n v^{2n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} v^n$$

где $a_{n+2} = -(n+1)(n+2)a_n, a_0 = 1, a_1 = 0$.

Если $\frac{a_n}{n!} = b_n$, то получаем следующее более компактное выражение

$$\frac{1}{1+v^2} = \sum_{n=0}^{\infty} b_n v^n.$$

Подставляя (2.8) в уравнение (2.3) методом неопределенных коэффициентов находим для $C_n^{(2)}$ ($n \geq 3$) следующую рекуррентную формулу:

$$C_n^{(2)} = -\frac{6}{(n+1)(n-2)(n+3)} \left\{ \sum_{k=0}^{\left[\frac{n-2}{2} \right]} (-1)^k \frac{C_{n-2k-2}^{(2)}}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)} \cdot \left[(n-2k-3)[6k+19+(n-2k-4)(2n-2k+5)] + 4(k+2)^2(2k+1) \right] + b_n \right\}, \quad (2.9)$$

Здесь $C_0^{(2)} = 1$, $C_1^{(2)} = 0$, $C_2^{(2)} = 1$, $\omega_2 = 0$, $D = -4$.

Отметим, что для получения рекуррентных соотношений коэффициентов $C_n^{(1)}$ ($n \geq 1$), $C_n^{(2)}$ ($n \geq 3$) и $C_n^{(3)}$ ($n \geq 4$) использовались следующие формулы перемножения степенных рядов:

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n a_k b_{n-k} \right) x^n,$$

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^{2n} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} a_{n-2k} b_k \right) x^n.$$

и выбор постоянных интегрирования $C_0^{(1)}$, $C_0^{(2)}$ и $C_0^{(3)}$ осуществляется таким образом, чтобы выполнялся предельный переход функций $G_1(\nu)$, $G_2(\nu)$, $G_3(\nu)$ к соответствующим функциям для сферы [1].

Следовательно, общее решение уравнения (2.3), удовлетворяющее краевому условию на бесконечности, имеет вид:

$$G(\lambda) = A_1 G_1(\lambda) + \tilde{G}_2(\lambda) + A_3 G_3(\lambda) \quad (2.10)$$

Итак, мы можем сказать следующее, что функция $G(\lambda) = A_1 G_1(\lambda) + \tilde{G}_2(\lambda) + A_3 G_3(\lambda)$ по построению формально удовлетворяет уравнению (2.3), ряды, которыми выражаются функции G_1 , \tilde{G}_2 , G_3 , сходятся при $0 \leq \nu < 1$ и постоянные интегрирования A_1 и A_3 ($A_3 = c^2$) однозначно (в силу линейной независимости решений G_1 и G_3) определяются из граничных условий (2.2).

Функция $g(\lambda)$ определяется из соотношения

$$g(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{dG}{d\lambda},$$

которое получается из уравнения непрерывности.

Поскольку явный вид функции $G(\nu)$ и $g(\nu)$ нам известен, то легко получить выражения для компонент массовой скорости и давления:

$$U_{\xi}(\xi, \eta) = \frac{U_{\infty} \cos \eta}{c \cdot H_{\xi} \operatorname{ch} \xi} (A_1 G_1 + A_2 G_2 + c^2 G_3) \quad (2.11)$$

$$U_{\eta}(\xi, \eta) = -\frac{U_{\infty} \sin \eta}{c \cdot H_{\xi}} (A_1 G_4 + A_2 G_5 + c^2 G_6) \quad (2.12)$$

$$P(x, \lambda) = P_{\infty} + \frac{\mu \cdot U_{\infty}}{c^3} \left\{ \frac{1 + \lambda^2}{2\lambda} \operatorname{arctg} \frac{x}{\lambda} \cdot \frac{d^3 G}{d\lambda^3} - \frac{1}{2\lambda} \left[\frac{1 + \lambda^2}{x^2 + \lambda^2} x + \frac{1 - \lambda^2}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{x}{\lambda} \right] \frac{d^2 G}{d\lambda^2} - \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{x}{\lambda} \cdot \frac{dG}{d\lambda} + \frac{1}{\lambda} \left[\frac{x}{x^2 + \lambda^2} + \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{x}{\lambda} \right] G \right\} \quad (2.13)$$

где $G_1(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n^{(1)}}{\lambda^n}$, $G_2(\lambda) = \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n^{(2)}}{\lambda^n}$, $G_3(\lambda) = \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n^{(3)}}{\lambda^n}$, $x = \cos \eta$,

$$G_4(\lambda) = -\frac{1}{2\lambda^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)C_n^{(1)}}{\lambda^n}, \quad G_5(\lambda) = -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n-1)C_n^{(2)}}{\lambda^n}$$

$$G_6(\lambda) = -\frac{\lambda}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n-2)C_n^{(3)}}{\lambda^n}$$

Постоянные интегрирования A_2 и A_1 определяются из граничных условий на поверхности сфероида и, в частности, для коэффициента A_2 имеем

$$A_2 = -c^2 \frac{G_1(\lambda_0)G_6(\lambda_0) - G_3(\lambda_0)G_4(\lambda_0)}{G_1(\lambda_0)G_5(\lambda_0) - G_2(\lambda_0)G_4(\lambda_0)}$$

и подставляя в (2.4) получаем следующее выражение для силы сопротивления ($\lambda_0 > 1$):

$$F_z = 6\pi R\mu_e U_\infty K_3 \tag{2.14}$$

где

$$K_3 = \frac{2}{3\sqrt{1+\lambda_0^2}} \frac{G_1(\lambda_0)G_6(\lambda_0) - G_3(\lambda_0)G_4(\lambda_0)}{G_1(\lambda_0)G_5(\lambda_0) - G_2(\lambda_0)G_4(\lambda_0)} \tag{2.15}$$

Случай В: $\lambda_0 < 1$

Нас интересуют действительные решения действительного аргумента λ_0 уравнения (2.1). Для действительных значений $\lambda_0 > 0$ имеет место тождество $\text{arctg} \frac{1}{\lambda_0} = \text{arcctg} \lambda_0$ и, используя разложение $\text{arcctg} \lambda_0 = \frac{\pi}{2} - \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda_0^{2n+1}}{2n+1}$ при $\lambda_0^2 < 1$ [8], уравнение (2.1) принимает следующий вид:

$$\left[\frac{\pi}{2} (\lambda_0^3 + 2\lambda_0^5 + \lambda_0^7) - 2\lambda_0^4 - \frac{8}{3} \lambda_0^6 - 8 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda_0^{2n+8}}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)} \right] \frac{d^3 G}{d\lambda_0^3} -$$

$$- \left[\frac{\pi}{2} (\lambda_0^2 - \lambda_0^6) + \frac{4}{3} \lambda_0^5 + 4 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda_0^{2n+7}}{(2n+1)(2n+5)} \right] \frac{d^2 G}{d\lambda_0^2} + \tag{2.16}$$

$$+ \left[-\frac{\pi}{2} 2(\lambda_0^3 + \lambda_0^5) + 4\lambda_0^4 + 4 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda_0^{2n+6}}{(2n+1)(2n+3)} \right] \frac{dG}{d\lambda_0} -$$

$$- \left(-\frac{\pi}{2} 2(\lambda_0^2 + \lambda_0^4) - 2 \sum_{n=0}^{\infty} (b_{n+2} - b_n) \lambda_0^{n+5} + 4 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda_0^{2n+5}}{(2n+1)(2n+3)} \right) G = -D^* \sum_{n=0}^{\infty} b_n \lambda_0^{n+4}$$

Решение однородного уравнения, соответствующего уравнению (2.16) ищем в виде обобщенного степенного ряда

$$G = \lambda^\rho \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n \lambda^n \quad (\Theta_0 \neq 0),$$

подставляя это выражение в (2.16), получаем следующее определяющее уравнение $\rho(\rho-1)(\rho-3) = 0$, корни которого равны соответственно $\rho_1 = 3$, $\rho_2 = 1$, $\rho_3 = 0$.

Большему из корней соответствует решение



$$G_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(1)} \lambda^{n+3} \quad (C_0^{(1)} \neq 0), \quad (2.17)$$

где коэффициенты $\Theta_n^{(1)}$ определяются методом неопределенных коэффициентов при подстановке (2.17) в (2.16) и равны

$$\begin{aligned} \Theta_n^{(1)} = & -\frac{(n-2)((n-1)(n-4)-2)}{n(n+3)(n+2)} \Theta_{n-4}^{(1)} - 2 \frac{n^2-2}{(n+3)(n+2)} \Theta_{n-2}^{(1)} + \frac{4}{\pi n(n+3)(n+2)} \cdot \\ & \cdot \left\{ n \left[(n+2)(n+1) \Theta_{n-1}^{(1)} + \frac{2}{3} (2(n-1)(n-2) + n-4) \Theta_{n-3}^{(1)} \right] + \right. \\ & \left. + 2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-5}{5} \rfloor} (-1)^k \frac{(n-2k-2)[(n-2k-3)(n-1)-(2k+5)] + 2k+5}{(2k+1)(2k+3)(2k+5)} \Theta_{n-2k-5}^{(1)} + \sum_{k=0}^{n-5} (b_{k+2} - b_k) \Theta_{n-k-5}^{(1)} \right\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Второе решение однородного уравнения (2.16) ищем в виде

$$G_3 = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(3)} \lambda^{n+1} + \omega_1 \ln \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right) \sum_{n=0}^{\infty} G_1 \quad (2.19)$$

и поступая аналогичным образом, получаем следующую рекуррентную формулу для коэффициентов $\Theta_n^{(3)}$:

$$\begin{aligned} \Theta_n^{(3)} = & -\frac{(n-4)((n-3)(n-6)-2)}{n(n+1)(n-2)} \Theta_{n-4}^{(3)} - 2 \frac{(n+1)(n-3)-1}{n(n+1)} \Theta_{n-2}^{(3)} + \frac{4}{\pi n(n+1)(n-2)} \cdot \\ & \cdot \left\{ (n-2) \left[n(n-1) \Theta_{n-1}^{(3)} + \frac{2}{3} (2(n-3)(n-4) + n-6) \Theta_{n-3}^{(3)} \right] + \right. \\ & \left. + 2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-5}{5} \rfloor} (-1)^k \frac{(n-2k-4)[(n-2k-5)(n-3)-(2k+5)] + 2k+5}{(2k+1)(2k+3)(2k+5)} \Theta_{n-2k-5}^{(3)} + \sum_{k=0}^{n-5} (b_{k+2} - b_k) \Theta_{n-k-5}^{(3)} \right\} \end{aligned} \quad (2.20)$$

где $\omega_1 = 0$.

Третье решение однородного уравнения (2.16) ищем в виде

$$G_4 = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(4)} \lambda^n + \omega_2 \ln \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right) \sum_{n=0}^{\infty} G_1 \quad (2.21)$$

Коэффициенты $\Theta_n^{(4)}$ определяются по формуле следующей рекуррентной формуле

$$\begin{aligned} \Theta_n^{(4)} = & -\frac{(n-4)((n-4)(n-7)-2)}{n(n-1)(n-3)} \Theta_{n-4}^{(4)} - 2 \frac{(n-2)(n-4)-1}{n(n-1)} \Theta_{n-2}^{(4)} + \frac{4}{\pi n(n-1)(n-3)} \cdot \\ & \cdot \left\{ (n-3) \left[(n-1)(n-2) \Theta_{n-1}^{(4)} + \frac{2}{3} (2(n-4)(n-5) + n-7) \Theta_{n-3}^{(4)} \right] + \right. \\ & \left. + 2 \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n-5}{5} \rfloor} (-1)^k \frac{(n-2k-5)[(n-2k-6)(n-4)-(2k+5)] + 2k+5}{(2k+1)(2k+3)(2k+5)} \Theta_{n-2k-5}^{(4)} + \sum_{k=0}^{n-5} (b_{k+2} - b_k) \Theta_{n-k-5}^{(4)} \right\} \end{aligned} \quad (2.22)$$

де $\omega_2 = 0$.

Исходя из вида правой части уравнения (2.16), частное решение его ищем в виде

$$G_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(2)} \nu^{n+4} + \omega_3 \ln \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right) \sum_{n=0}^{\infty} G_1 \quad (2.23)$$

После подстановки (2.23) в (2.16), методом неопределенных коэффициентов, имеем

$$\begin{aligned} \Theta_n^{(2)} = & -\frac{(n(n-3)-2)}{(n+4)(n+3)} \Theta_{n-4}^{(2)} - 2 \frac{(n+2)n-1}{(n+4)(n+3)} \Theta_{n-2}^{(2)} + \frac{4}{\pi(n+1)(n+3)(n+4)} \cdot \\ & \cdot \left\{ (n+1) \left[(n+3)(n+2) \Theta_{n-1}^{(2)} + \frac{2}{3} (2n(n-1)+n-3) \Theta_{n-3}^{(2)} \right] + \right. \\ & \left. + 2 \sum_{k=0}^{\left[\frac{n-5}{5} \right]} (-1)^k \frac{(n-2k-1) [n(n-2k-2) - (2k+5)] + 2k+5}{(2k+1)(2k+3)(2k+5)} \Theta_{n-2k-5}^{(2)} + \sum_{k=0}^{n-5} (b_{k+2} - b_k) \Theta_{n-k-5}^{(2)} + 2b_n \right\} \quad (2.24) \end{aligned}$$

где $\Theta_0^{(2)} = \frac{2}{3\pi}$, $D^* = -4$, $\omega_3 = 0$

Общее решение уравнения (2.16) имеет вид

$$G(\lambda) = A_1 G_1(\lambda) + \tilde{G}_2(\lambda) + A_3 G_3(\lambda) + A_4 G_4 \quad (2.25)$$

Поскольку функция $G(\lambda)$ нам известна, то получаем следующие выражения для компонент массовой скорости

$$U_\xi(\xi, \eta) = \frac{U_\infty \cos \eta}{c \cdot H_\xi \operatorname{ch} \xi} (A_1 G_1 + A_2 G_2 + A_3 G_3 + A_4 G_4) \quad (2.26)$$

$$U_\eta(\xi, \eta) = -\frac{U_\infty \sin \eta}{c \cdot H_\xi} (A_1 g_1 + A_2 g_2 + A_3 g_3 + A_4 g_4), \quad (2.27)$$

где

$$\begin{aligned} G_1(\lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(1)} \lambda^{n+3}, \quad G_2(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(2)} \lambda^{n+4}, \quad G_3(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(3)} \lambda^{n+1}, \quad G_4(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(4)} \lambda^n, \\ g_1(\lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(1)} (n+3) \lambda^{n+2}, \quad g_2(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(2)} (n+4) \lambda^{n+3}, \quad g_3(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(3)} (n+1) \lambda^n, \\ g_4(\lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n^{(4)} n(n+3) \lambda^{n-1}. \end{aligned}$$

III. Анализ полученных результатов и основные выводы. В работе получено решение линеаризованного по скорости уравнения Навье-Стокса в сфероидальной системе координат при малых относительных перепадах температуры в окрестности аэрозольной частицы. Поиск выражений для компонент массовой скорости в виде

$$U_\varepsilon(\varepsilon, \eta) = \frac{U_\infty}{c \operatorname{ch} \varepsilon H_\varepsilon} G(\varepsilon) \cos \eta, \quad U_\eta(\varepsilon, \eta) = -\frac{U_\infty}{c H_\varepsilon} g(\varepsilon) \sin \eta,$$

позволил разделить переменные и свести в конечном итоге задачу об отыскании решения неоднородного дифференциального уравнения третьего порядка (2.1) с краевыми условиями (2.2). В связи с тем, что в это уравнение входит функция



$\operatorname{arctg} \lambda$, получить аналитическое решение этого уравнения удалось для двух асимптотических случаев – $\lambda > 1$ и $\lambda < 1$.

Таким образом, получено аналитическое решение уравнения (2.1) с краевыми условиями (2.2) в виде обобщенных степенных рядов и тем самым получено аналитическое решение линеаризованного по скорости уравнения Навье-Стокса в сфероидальной системе координат. В случае $\lambda > 1$ решение краевой задачи имеет вид (2.10), а в случае $\lambda < 1$ – (2.25). Вопрос о соотношении полученных в результате решения краевой задачи постоянных интегрирования A_i ($i = 1, 2, 3$) остается в настоящее время открытым и требует дальнейшего исследования

$$K = \frac{4}{3} \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda_0^2} [\lambda_0 + (1 - \lambda_0^2) \operatorname{arctg} \lambda_0]}$$

Таблица 1

Сравнение коэффициентов K и K_3

b/a	λ_0	K	K_3
0.708	1.002531	0.942977	0.942073
0.710	1.008233	0.943355	0.943302
0.750	1.133893	0.950958	0.950958
0.754	1.147860	0.951723	0.951723
0.755	1.151397	0.951915	0.951915
0.765	1.187832	0.953831	0.953831
0.768	1.199157	0.954407	0.954407
0.780	1.246445	0.956715	0.956715
0.800	1.333333	0.960577	0.960577
0.850	1.613568	0.970305	0.970305
0.900	2.064741	0.980128	0.980128
0.950	3.042434	0.990030	0.990030
0.990	7.017923	0.998001	0.998001

Можно также ожидать, что полученное решение при $\lambda > 1$ можно аналитически продолжить [4, 7], и тем самым закрыть всю область изменения переменной λ . Однако, проведенные исследования показали, что это очень громоздкий путь и получить какие-либо ощутимые результаты в этом направлении в настоящее время не удалось.

Представляет интерес сравнения полученных результатов в работе с известными в научной литературе результатами [1]. Для случая $\lambda > 1$ было проведено такое сравнение с [1]. Коэффициент K_3 формулы (2.15) сравнивался с коэффициентом K , полученным с использованием функции тока [1]

Как видно из таблицы 1 совпадение очень хорошее. Это указывает на то, что, во всяком случае, при $\lambda > 1$ полученное решение правильно описывает поле течения аэрозольной частицы сфероидальной формы.

Литература

1. Дж. Хаппель, Г. Бреннер Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. М.: Мир. 1976. 630 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. М.: Наука. 1986. 736 с.
3. Г. Ламб Гидродинамика. М.: ОГИЗ. 1947. 928 с.
4. Смирнов В.И. Курс высшей математики. М.: Наука. 1974. Т. 2, 3
5. Э. Камке. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука. 1961. 703 с.

6. Коддингтон Э.А., Левинсон Н. Теория обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Иностранной литературы. 1958. 474 с.
7. Привалов И.И. Введение в теорию функций комплексного переменного. М.: Наука. 1967. 444 с.
8. Г.Б. Двайт. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М.: Наука. 1978. 222 с.
9. Бретшнайдер Ст. Свойства газов и жидкостей. Инженерные методы расчета. М.: Химия. 1966. 535 с.

ABOUT SOME FEATURES OF EQUATION STOKES DECISION IN SPHEROIDAL SYSTEM OF COORDINATES

N.V. Malay, A.V. Limanskaja

Belgorod State University,
308007, Belgorod, St.. Student's 14,
e-mail: malay@bsu.edu.ru; limanskayaanna@mail.ru

The decision of Stokes equation in spheroidal system of coordinates at small relative temperature drops in aerosol particle vicinity is received with the help of the generalized power series. The carried out numerical estimations have shown their good consent with known estimations in the literature.

Key words: a flow, a spheroid, Stokes equation.

ФОТОФОРЕЗ КРУПНОЙ АЭРОЗОЛЬНОЙ СФЕРОИДАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ С УЧЕТОМ НЕЛИНЕЙНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СРЕДЫ

А.А. Плесканев

Белгородский государственный университет
308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14
pleskanev@bsu.edu.ru

Рассмотрено движение нагретой сплюснутой сфероидальной частицы, возникающее при неоднородном нагреве поверхности частиц внутренними источниками тепла, функция плотности распределения которых считается известной. Движение частицы происходит в вязкой, сжимаемой газообразной среде, коэффициенты молекулярного переноса которой, являются функциями температуры.

Ключевые слова: нагретая сфероидальная частица, функция распределения, коэффициенты переноса.

При взаимодействии электромагнитного излучения с аэрозольной частицей, внутри нее происходит выделение тепловой энергии, что приводит к неоднородному нагреву поверхности частицы. Газ, взаимодействуя с неоднородно нагретой поверхностью, начинает двигаться вдоль поверхности в направлении возрастания температуры (тепловое скольжение). Тепловое скольжение вызывает появление фотофоретической силы, под действием которой аэрозольная частица приходит в движение. Когда величина фотофоретической силы становится равной величине силы вязкого сопротивления среды, частица начинает двигаться с постоянной скоростью – скоростью фотофореза.

Рассмотрим установившееся фотофоретическое движение твердой нагретой аэрозольной частицы, форма поверхности которой представляет собой сплюснутый сфероид. Нагрев поверхности частицы осуществляется внутренними источниками тепла, объемная плотность распределения которых q_p известна. Считается, что газообразная среда занимает все пространство и на бесконечности покоится.

Температура поверхности частицы может намного превышать температуру среды, что приводит к необходимости рассматривать динамическую вязкость μ_g , теплопроводность λ_g и плотность ρ_g как функции температуры. В данной работе, зависимость динамической вязкости и теплопроводности от температуры рассматривалась как степенная:

$$\mu_g = \mu_\infty t_g^\beta, \quad \lambda_g = \lambda_{g\infty} t_g^\alpha \quad \text{и} \quad \lambda_p = \lambda_{p\infty} t_p^\gamma, \quad (1)$$

где $\mu_\infty = \mu_g(T_\infty)$, $\lambda_{g\infty} = \lambda_g(T_\infty)$, $\lambda_{p\infty} = \lambda_p(T_\infty)$. Здесь и далее $t_g = T_g/T_\infty$, $t_p = T_p/T_\infty$ – безразмерные температуры; индекс “g” указывает на газообразную среду, “p” – на частицу, “∞” обозначает параметры газообразной среды вдали от частицы.

Свяжем систему отсчета с центром движущейся частицы, при этом положение декартовой системы координат фиксировано относительно частицы таким образом, чтобы ось z совпадала с осью симметрии сфероида. В этом случае задача сводится к анализу обтекания частицы бесконечным плоскопараллельным потоком газа со скоростью U_∞ ($U_\infty = -U_p$, где U_p – скорость движения частицы). Решение проводится в системе координат сплюснутого сфероида $(\varepsilon, \eta, \phi)$.

Обтекание твердого сфероида будет описываться линеаризованной системой уравнений:

$$\frac{\partial P}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu_g \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial U_j}{\partial x_j} \right] \right), \quad (i, k, j = 1, 2, 3), \quad (2)$$

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{U}_g) = 0, \quad (3)$$

$$\operatorname{div}(\lambda_g \nabla T_g) = 0, \quad \operatorname{div}(\lambda_p \nabla T_p) = -q_p, \quad (4)$$

с граничными условиями

$$\varepsilon = \varepsilon_0 : U_\varepsilon = 0, \quad U_\eta = K_{ts} \frac{v_g}{T_g} (\nabla T_g \cdot \mathbf{e}_\eta),$$

$$T_g = T_p; \quad \lambda_g (\nabla T_g \cdot \mathbf{e}_\varepsilon) = \lambda_p (\nabla T_p \cdot \mathbf{e}_\varepsilon) + \sigma_0 \sigma_1 (T_g^4 - T_\infty^4), \quad (5)$$

$$\varepsilon \rightarrow \infty : \mathbf{U}_g \rightarrow U_\infty \cos \eta \mathbf{e}_\varepsilon - U_\infty \sin \eta \mathbf{e}_\eta, \quad P_g \rightarrow P_\infty, \quad T_g \rightarrow T_\infty, \quad (6)$$

$$\varepsilon \rightarrow 0 : T_p \neq \infty. \quad (7)$$

Здесь T_g, T_p – температура газообразной среды и частицы соответственно; U_ε и U_η – радиальная и тангенциальная компоненты массовой скорости \mathbf{U}_g в сфероидальной системе координат; U_∞ – величина скорости набегающего потока; K_{ts} – коэффициент теплового скольжения; σ_0 – интегральная степень черноты; σ_1 – постоянная Стефана-Больцмана; \mathbf{e}_ε и \mathbf{e}_η – единичные векторы сфероидальной системы координат.

В граничных условиях на поверхности частицы (5) учтено условие прилипания для нормальной и условие скольжения для тангенциальной компоненты массовой скорости, а также, равенство температур и непрерывность потоков тепла. В качестве граничных условий на бесконечности приняты условия (6). Конечность физических величин отражена в граничном условии (7).

Для нахождения силы, действующей на нагретую твердую аэрозольную частицу, и скорости ее движения, необходимо знать поле температуры, как вне частицы, так и внутри нее.

Поскольку при решении задачи предполагается малость числа Рейнольдса ($\operatorname{Re}_\infty \ll 1$), то можно считать, что набегающий поток оказывает лишь возмущающее воздействие. В связи с этим, решение системы уравнений теплопереноса будем искать в виде разложения по малому параметру ξ :

$$t_g = t_{g0} + \xi t_{g1} + \dots, \quad t_p = t_{p0} + \xi t_{p1} + \dots,$$

где $\xi = \operatorname{Re}_\infty = \rho_\infty U_\infty a / \mu_\infty$, $t_g = T_g / T_\infty$, $t_p = T_p / T_\infty$.

При решении задачи мы ограничимся поправками первого порядка малости по ξ . С учетом степенной зависимости коэффициентов теплопроводности (1) уравнения (4) можно записать в виде:

$$\Delta t_g^{1+\alpha} = 0, \quad \Delta t_p^{1+\gamma} = -\frac{1+\gamma}{\lambda_{p\infty} T_\infty} q_p, \quad (8)$$

с граничными условиями:

для нулевых приближений

$$t_{g0} = t_{p0}, \quad \lambda_{g\infty} t_{g0}^\alpha \frac{\partial t_{g0}}{\partial \lambda} = \lambda_{p\infty} t_{p0}^\gamma \frac{\partial t_{p0}}{\partial \lambda} + \sigma_0 \sigma_1 h_0 T_\infty^3 (t_{p0}^4 - 1), \quad (9)$$

для первых приближений



$$t_{g1} = t_{p1}, \lambda_{g\infty} t_{g0}^\alpha \left(\frac{\partial t_{g1}}{\partial \lambda} + \alpha \frac{t_{g1}}{t_{g0}} \frac{\partial t_{g0}}{\partial \lambda} \right) = \lambda_{p\infty} t_{p0}^\gamma \left(\frac{\partial t_{p1}}{\partial \lambda} + \gamma \frac{t_{p1}}{t_{p0}} \frac{\partial t_{p0}}{\partial \lambda} \right) + 4\sigma_0 \sigma_1 h_0 T_\infty^3 t_{p0}^3 t_{p1}. \quad (10)$$

Общее решение уравнений (8) с учетом конечности физических величин (7) имеет вид:

$$t_g = t_{g0} + \xi t_{g1}, \quad t_p = t_{p0} + \xi t_{p1}, \quad (11)$$

где нулевые приближения по ξ :

$$t_{g0} = (H_0 + \Gamma_0 \operatorname{arctg} \lambda)^{\frac{1}{1+\alpha}}, \quad (12)$$

$$t_{p0} = \left(B_0 + I_0 \operatorname{arctg} \lambda + \int_{\lambda_0}^{\lambda} \operatorname{arctg} \lambda f_0 d\lambda - \operatorname{arctg} \lambda \int_{\lambda_0}^{\lambda} f_0 d\lambda \right)^{\frac{1}{1+\gamma}}; \quad (13)$$

и первые приближения по ξ :

$$t_{g1} = \frac{\cos \eta}{(1+\alpha)t_{g0}^\alpha} \{H_1 \lambda + \Gamma_1 (\lambda \operatorname{arctg} \lambda - 1)\}, \quad (14)$$

$$t_{p1} = \frac{\cos \eta}{(1+\gamma)t_{p0}^\gamma} \left[B_1 \lambda - I_1 (\lambda \operatorname{arctg} \lambda - 1) - \lambda \int_{\lambda_0}^{\lambda} (\lambda \operatorname{arctg} \lambda - 1) f_1 d\lambda + \right. \\ \left. + (\lambda \operatorname{arctg} \lambda - 1) \int_{\lambda_0}^{\lambda} \lambda f_1 d\lambda \right]. \quad (15)$$

$$\text{Здесь } I_0 = \frac{1+\gamma}{4\pi c \lambda_{p\infty} T_\infty} \int q_p dV, I_1 = \frac{3(1+\gamma)}{4\pi c^2 \lambda_{p\infty} T_\infty} \int q_p z dV, f_0 = -\frac{1+\gamma}{2\lambda_{p\infty} T_\infty} \int c^2 (\lambda^2 + x^2) q_p dx,$$

$$f_1 = -\frac{3(1+\gamma)}{2\lambda_{p\infty} T_\infty} \int c^2 (\lambda^2 + x^2) q_p x dx, \quad h_0 = \frac{c}{2} \left(1 + \frac{\lambda_0^2}{2\sqrt{1+\lambda_0^2}} \ln \frac{\sqrt{1+\lambda_0^2} + 1}{\sqrt{1+\lambda_0^2} - 1} \right),$$

$z = c\lambda x$, $x = \cos \eta$, $\lambda = \operatorname{sh} \varepsilon$, значение $\lambda = \lambda_0$ соответствует поверхности сфероида.

Постоянные интегрирования B_0 , B_1 , Γ_0 , Γ_1 и H_1 , входящие в (12) – (15), определяются из граничных условий (3) – (4). В частности:

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 0,$$

$$B_1 = \frac{(1+\gamma)t_{p0}^\gamma}{(1+\alpha)t_{g0}^\alpha} \Gamma_1 \left(\operatorname{arctg} \lambda_0 - \frac{1}{\lambda_0} \right) + I_1 \left(\operatorname{arctg} \lambda_0 - \frac{1}{\lambda_0} \right),$$

$$\Gamma_1 = \frac{1+\alpha}{1+\gamma} \frac{t_{g0}^\alpha}{t_{p0}^\gamma} \frac{I_1}{\lambda_0 (1+\lambda_0^2) \Delta},$$

где

$$\Delta = (1-\delta) \operatorname{arctg} \lambda_0 + \delta \frac{\lambda_0}{1+\lambda_0^2} - \frac{1}{\lambda_0} + \frac{4\sigma_0 \sigma_1 h_0 T_\infty^3 t_{p0}^3}{\lambda_{p\infty} t_{p0}^\gamma} (\lambda_0 \operatorname{arctg} \lambda_0 - 1),$$

$$\delta = \frac{\lambda_{g\infty} t_{g0}^\alpha}{\lambda_{p\infty} t_{p0}^\gamma} = \frac{\lambda_{gs}}{\lambda_{ps}}.$$

Зная, поля температуры вне и внутри неравномерно нагретого сфероида можно найти фотофоретическую силу и скорость.

В [2] показано, что распределение скоростей имеет вид:

$$U_\varepsilon(\varepsilon, \eta) = \frac{U_\infty}{c \operatorname{ch} \varepsilon H_\varepsilon} [A_1 G_1(\lambda) + A_2 G_2(\lambda) + c^2 G_3(\lambda)] \cos \eta,$$

$$U_\eta(\varepsilon, \eta) = -\frac{U_\infty}{2c H_\varepsilon} [A_1 G_4(\lambda) + A_2 G_5(\lambda) + c^2 G_6(\lambda)] \sin \eta.$$

Вид функций G_i приведен в [2]. Сила, действующая на сфероид, определяемая интегрированием тензора напряжений по поверхности частицы [1]:

$$\mathbf{F} = -4\pi \frac{\mu_g U_\infty}{c} A_2 \mathbf{n}_z$$

Определяя A_2 из граничных условий на поверхности частицы находим, что полная сила F , действующей на сфероидальную частицу, нагреваемой внутренними источниками тепла q_p , аддитивно складывается из силы вязкого сопротивления среды F_μ и фотофоретической силы F_{ph} :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\mu + \xi \mathbf{F}_{ph}, \quad (16)$$

где

$$\mathbf{F}_\mu = 4\pi \mu_\infty U_\infty c \frac{G'_1 G_3 - G_1 G'_3}{G'_1 G_2 - G_1 G'_2} \mathbf{n}_z, \quad (17)$$

$$\mathbf{F}_{ph} = 6\mu_\infty K_{ts} \frac{v_g}{t_{g0}} \frac{G_1}{G'_1 G_2 - G_1 G'_2} \frac{(\lambda_0 \operatorname{arccctg} \lambda_0 - 1)}{c^2 \lambda_{ps} T_\infty \lambda_0 (1 + \lambda_0^2) \Delta_V} \int_V q_p z dV \cdot \mathbf{n}_z. \quad (18)$$

Приравнявая полную силу (16) к нулю, получаем следующее выражение для фотофоретической скорости твердой нагретой сфероидальной частицы в вязкой газообразной среде:

$$\mathbf{U}_{ph} = \xi K_{ts} \frac{v_g}{t_{g0}} \frac{2G_1}{G_3 G'_1 - G_1 G'_3} \frac{3(\lambda_0 \operatorname{arccctg} \lambda_0 - 1)}{4\pi c^3 \lambda_{ps} T_\infty \lambda_0 (1 + \lambda_0^2) \Delta_V} \int_V q_p z dV \mathbf{n}_z, \quad (19)$$

Значения функции $G_1 - G_3$, входящих в выражения (17) – (19) берутся при средней температуре поверхности частицы t_s , которая связана с распределением плотности тепловых источников q_p соотношением

$$\frac{t_s^{1+\alpha} - 1}{\operatorname{arccctg} \lambda_0} - (t_s^4 - 1) \frac{1+\alpha}{\lambda_{ps}} (1 + \lambda_0^2) h_0 \sigma_0 \sigma_1 T_\infty^3 = \frac{1+\alpha}{4\pi c \lambda_{gs} T_\infty} \int_V q_p dV.$$

Численные расчеты показали, что нагрев поверхности оказывает существенное влияние на силу и скорость фотофореза, при этом роль формы частицы (отношения полуосей сфероида) становится ощутимой лишь, когда она значительно отличается от сферической. На рис. 1 приведены кривые, построенные для случая, когда частица поглощает электромагнитное излучение интенсивностью I как абсолютно черное тело.

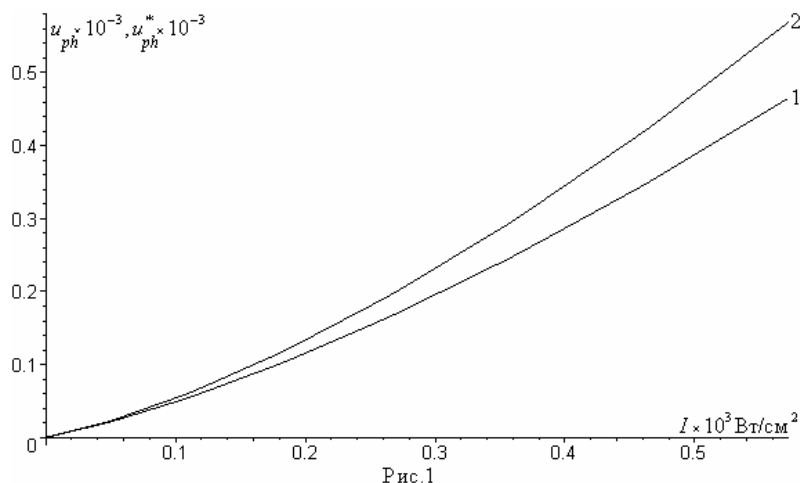


Рис. 1. Зависимость u_{ph} (кривая 1) и u_{ph}^* (кривая 2) от интенсивности падающего излучения для медной частицы в воздухе ($b/a = 0,75$)

В этом случае

$$q_p(\varepsilon, \eta) = \begin{cases} -\frac{\text{ch } \varepsilon \cos \eta}{c(\text{ch}^2 \varepsilon - \sin^2 \eta) \delta \varepsilon} I, & \pi/2 \leq \eta \leq \pi, \quad \varepsilon_0 - \delta \varepsilon \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0; \\ 0 & 0 \leq \eta \leq \pi/2. \end{cases}$$

$$\int_V q_p dV = \pi a^2 I \quad \text{и} \quad \int_V q_p z dV = -\frac{2}{3} \pi I a^2 b$$

Кривая 2 соответствует оценке величины u_{ph} по формуле, полученной для случая малых относительных перепадов температуры, в которой значения коэффициентов молекулярного переноса брались при средней температуре поверхности сфероида. Как видно из рисунка она дает завышенный результат. При сравнительно малой интенсивности падающего излучения нагрев поверхности частицы незначителен и кривые u_{ph} и u_{ph}^* совпадают.

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука. 1986. – 736 с.
2. Малай Н.В., Плесканев А.А. Применение обобщенных степенных рядов для получения точного решения линеаризованного уравнения Навье-Стокса с учетом сжимаемости газообразной среды и зависимости коэффициентов молекулярного переноса от температуры// Деп. в ВИНТИ. 2006. № 1053-В2006.

PHOTOPHORESIS OF LARGE AEROSOL SPHEROIDAL PARTICLE TAKING INTO ACCOUNT NONLINEAR MEDIUM CHARACTERISTICS

A.A. Pleskanev

Belgorod State University,
Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia
pleskanev@bsu.edu.ru

The nascent motion of large spheroidal particle in the presence of inhomogeneous heating internal heat sources of particle surface is considered. Assume that, heat sources distribution function is known. The gaseous medium is viscous and molecular transport coefficients are functions of temperature.

Key words: heating spheroidal particle, distribution function, transport coefficients.

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ КОНА-ШЕМА ДЛЯ МОЛЕКУЛЫ МЕТОДОМ ОПОРНОЙ ФУНКЦИИ

А.Г. Шкловский¹⁾, М.А. Шкловская²⁾

¹⁾ Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14

²⁾ Московский Государственный Технический университет им. Н.Э. Баумана,
105005, г. Москва, ул. Вторая Бауманская, 5, e-mail: taural@mail.ru

В данной работе предлагается обобщение предложенной ранее аппроксимации обменно-корреляционной энергии в теории функционала электронной плотности. Это обобщение используется для нахождения обменно-корреляционного потенциала двухатомной молекулы. Предложен новый алгоритм решения уравнения Кона-Шема в молекуле – метод опорной функции. Для апробации метода проведен расчет энергии диссоциации иона молекулы водорода.

Ключевые слова: функционал электронной плотности, обменно-корреляционный потенциал, уравнение Кона-Шема, метод опорной функции.

Введение

В работе [1] описывается метод, разработанный для того, чтобы оптимальным образом аппроксимировать обменно-корреляционную энергию в атоме. Этот метод будет использован в настоящей работе для аппроксимации обменно-корреляционной энергии и обменно-корреляционного потенциала в молекуле.

Предлагается новый алгоритм решения уравнения Кона-Шема в молекуле -метод опорной функции. Явный вид опорных функций $\psi_{\alpha}^j(\vec{r})$ выбирается в зависимости от конкретной молекулы так, чтобы она была известна с высокой точностью, нормирована и мало отличалась от молекулярной волновой функции. Обычно удобно брать в качестве опорной функции собственные функции соответствующих сжатых сферических атомов в молекуле.

Для проверки точности метода опорной функции была рассмотрена тестовая задача, имеющая точное решение. Энергия диссоциации иона молекулы водорода известна и есть независимые методы решения уравнения Шредингера для электрона в поле двух протонов, находящихся на заданном расстоянии R_m . Поэтому предложенный новый алгоритм применяется к вычислению энергии диссоциации иона молекулы водорода.

Далее будет использоваться атомная система единиц $\hbar = e^2 = m_e = 1$.

1. Обменно-корреляционный потенциал для молекулы

В работе [2] приведена формула для вычисления полной энергии в рамках теории функционала электронной плотности:

$$E = T_e[n] + E_{har}[n] + E_{xc}[n] + \int V_e(r) \cdot n(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1.1)$$

где $T_e[n]$ – функционал кинетической энергии, $E_{har}[n]$ – функционал Хартри:

$$E_{har}[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}_1)n(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (1.2)$$

$V_e(\vec{r})$ – кулоновский потенциал взаимодействия электрона с ядрами, а обменно-



корреляционная энергия $E_{xc}[n]$ дается выражением:

$$E_{xc}[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}_1) \bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) n(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (1.3)$$

Здесь

$$\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int_0^1 d\lambda (g_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - 1), \quad (1.4)$$

где $g_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – парная корреляционная функция для системы с электрон – электронным взаимодействием, измененным в λ раз, где λ пробегает значения от 0 (для не взаимодействующей системы электронов) до 1 (электрон – электронное взаимодействие включено полностью).

Формулы (1.1 – 1.4) точные, но функция $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ не известна. В приближении локального потенциала (ПЛП) вводится обменно-корреляционная энергия, приходящаяся на одну частицу $\varepsilon_{xc}(n(\vec{r}))$, и полная обменно-корреляционная энергия (1.3) записывается в виде:

$$E_{xc}[n] = \int \varepsilon_{xc}(n(\vec{r}), \vec{r}) \cdot n(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (1.5)$$

В работе [1] предложена аппроксимация функции $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ в выражении (1.3) и приведен вывод уравнения Кона – Шема для атома в приближении аппроксимированного локального потенциала (ПАЛП). Для молекулы минимум функционала (1.1) ищется при условии

$$\int n(\vec{r}) d\vec{r} = N_{em}, \quad n(\vec{r}) = \sum_{\alpha=1}^{N_{em}} |\Phi_\alpha(\vec{r})|^2. \quad (1.6)$$

Здесь $n(\vec{r})$ – плотность электронов в молекуле, N_{em} – число электронов в молекуле, а функция $\Phi_\alpha(\vec{r})$ является решением уравнения Кона – Шема:

$$[-(1/2)\Delta + V_{mol}(\vec{r})] \cdot \Phi_\alpha(\vec{r}) = E_\alpha \Phi_\alpha(\vec{r}). \quad (1.7)$$

Как обычно, считается, что уравнение Кона – Шема описывает систему невзаимодействующих квазичастиц с энергией E_α , находящихся во внешнем потенциале:

$$V_{mol}(\vec{r}) = v_{mxc}(\vec{r}) + v_{mhar}(\vec{r}) - \frac{Z_1}{|\vec{r} - \vec{R}_m/2|} - \frac{Z_2}{|\vec{r} + \vec{R}_m/2|}. \quad (1.8)$$

Здесь для потенциала Хартри используется точное выражение:

$$v_{mhar}(\vec{r}) = \int d\vec{r}_2 \frac{n(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|}. \quad (1.9)$$

Электронная плотность квазичастиц совпадает с молекулярной плотностью $n(\vec{r})$ и может быть представлена в виде:

$$n(\vec{r}) = n_1(|\vec{r} - \vec{R}_m/2|) + n_2(|\vec{r} + \vec{R}_m/2|) + \delta n(\vec{r}). \quad (1.10)$$

Здесь \vec{R}_m – вектор, идущий от ядра первого атома до ядра второго атома, а $\delta n(\vec{r})$ показывает отличие молекулярной плотности $n(\vec{r})$ от суммы плотностей сферических сжатых атомов в молекуле $n_1(|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|)$ и $n_2(|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|)$ и находится самосогласованным образом.

Чтобы найти электронную плотность молекулы по формуле (1.6) необходимо вычислить волновую функцию $\Phi_\alpha(\vec{r})$:

$$\Phi_\alpha(\vec{r}) = \psi_\alpha^j(\vec{r}) + \delta\psi_\alpha(\vec{r}). \quad (1.11)$$

Здесь $\delta\psi_\alpha(\vec{r})$ описывает отличие молекулярной волновой функции $\Phi_\alpha(\vec{r})$ от опорной функции $\psi_\alpha^j(\vec{r})$. Эти опорные функции используются для построения плотностей $n_1(r)$ и $n_2(r)$. Также как и для электронной плотности, поправку к опорной функции необходимо находить самосогласованным образом.

Подставляя выражение (1.10) в формулу (1.9), получим потенциал Хартри в молекуле в виде:

$$v_{mhar}(\vec{r}) = \int d\vec{r}_2 \frac{\delta n(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} + v_{1har}(|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|) + v_{2har}(|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|). \quad (1.12)$$

Здесь введены обозначения для потенциалов Хартри сферических атомов 1 и 2:

$$v_{1har}(r) = \frac{N_{e1}}{r}(1 - U_1(r)), \quad U_1(r) = \frac{4\pi}{N_{e1}} \cdot \int_r^{R_1} x^2 n_1(x) \left(1 - \frac{r}{x}\right) dx. \quad (1.13)$$

$$v_{2har}(r) = \frac{N_{e2}}{r}(1 - U_2(r)), \quad U_2(r) = \frac{4\pi}{N_{e2}} \cdot \int_r^{R_2} x^2 n_2(x) \left(1 - \frac{r}{x}\right) dx. \quad (1.14)$$

Обменно-корреляционный потенциал молекулы $v_{mxc}(\vec{r})$ точно не известен. Для молекулы, также как и для атома берётся выражение:

$$v_{mxc}(\vec{r}) = \int d\vec{r}_2 \frac{n(\vec{r}_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|}. \quad (1.15)$$

Для электронной плотности $n(\vec{r})$ используется формула (1.10).

При аппроксимации функции $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ для молекулы учтем, что она должна быть симметрична

$$\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \bar{h}(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad (1.16)$$

на больших расстояниях от ядер должна обращаться в ноль

$$\lim_{|\vec{r}_1|, |\vec{r}_2| \rightarrow \infty} \bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \quad (1.17)$$

и для \vec{r} , лежащих внутри молекулы, удовлетворять правилу сумм [2]:

$$\int d\vec{r}_2 n(\vec{r}_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) = -1. \quad (1.18)$$

В методе опорной функции для нахождения электронной плотности $\delta n(\vec{r})$ в молекуле удобно пользоваться цилиндрической системой координат. Рассмотрим сначала



ла опорную функцию $\psi_{\alpha}^j(\vec{r})$, взятую из решения уравнения Кона – Шема для сферически-симметричного первого атома. Для краткости будем называть их решениями первого типа. В случае решения первого типа вместо условия (1.18) будем использовать:

$$\begin{aligned} \int d\vec{r}_2 n_1(r_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) &= -1, \\ \int d\vec{r}_2 n_2(r_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) &= 0, \\ \int d\vec{r}_2 \delta n(\vec{r}_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) &= 0. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Воспользуемся формулой (1.10) для электронной плотности $n(\vec{r})$ и перепишем выражение (1.15) в виде суммы вкладов от отдельных интегралов:

$$\begin{aligned} v_{mxc}(\vec{r}) &= \int d\vec{r}_2 \frac{n_1(r_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} + \\ & \int d\vec{r}_2 \frac{n_2(r_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} + \int d\vec{r}_2 \frac{\delta n(\vec{r}_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

В первом интеграле, который берётся по шару с центром в ядре первого атома, аппроксимация функции $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ очевидна:

$$\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(-\frac{1}{N_{e1}} + \eta_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \cdot \Theta(R_1 - |\vec{r}_1|) \cdot \Theta(R_1 - |\vec{r}_2|). \quad (1.21)$$

Здесь N_{e1} – число электронов в первом атоме, R_l – радиус этого атома, $\Theta(x) = \begin{cases} 1, x > 0, \\ 0, x < 0 \end{cases}$ – функция, обеспечивающая наличие обмена и корреляции только внутри атома, а $\eta(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – функция, описывающая перераспределение плотности заряда за счёт процессов обмена и корреляции. Закон сохранения перераспределённого заряда (1.19) имеет вид:

$$\int d\vec{r}_2 n_1(\vec{r}_2) \eta_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0. \quad (1.22)$$

В [1] для сферически симметричного атома $n_1(\vec{r}) = n_1(r)$ и функция $\eta_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ выбирается в виде:

$$\eta_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -(N_{e1} - 1) \cdot F_1(r_1) \cdot F_1(r_2), \quad (1.23)$$

где аппроксимирующая функция $F_l(r)$ зависит только от модуля r и не зависит от углов. Универсальная аппроксимирующая функция $F(r)$, описывающая перераспределение плотности заряда за счёт процессов обмена и корреляции в ПАЛП, имеет вид:

$$F(x) = x \cdot \ln(\gamma x) \cdot \exp(-\beta x^2). \quad (1.24)$$

Здесь введены две константы. Константа γ определяет точку, в которой натуральный логарифм, а, следовательно, и функция $F(r)$, меняет знак. Равенство (1.23) гарантирует выполнение свойства (1.16). При любом положительном β выполняется свойство (1.17). Множитель $(N_{e1} - 1)$ в (1.23) связан с тем, что учитывается средний вклад в перераспределение зарядовой плотности от каждого электрона, участвующего

в процессах обмена и корреляции. Закон сохранения перераспределенного заряда (1.22) требует, чтобы функция $F(r)$ удовлетворяла условию

$$\int_0^{R_1} r^2 F_1(r) n_1(r) dr = 0, \quad (1.25)$$

что легко реализуется для заданного γ подбором константы β при самосогласованном решении уравнения Кона – Шема для первого атома.

Во втором интеграле, который берётся по шару с центром в ядре второго атома, аппроксимация функции $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ также очевидна. Из второго интеграла в (1.19) следует, что $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -N_{e2} \cdot F_2(r_1) \cdot F_2(r_2)$, где $F_2(r)$ берётся для для второго атома. Поправка $\delta n(\vec{r})$ в формулах (1.20), (1.19) достаточно мала в тех областях интегрирования, где величины $n_c(|\vec{r} - \vec{r}_c|)$ и $n_o(|\vec{r} - \vec{r}_o|)$ являются основными. Так как заряд, связанный с величиной $\delta n(\vec{r})$, равен нулю и третий интеграл в (1.19) тоже равен нулю, то в третьем интеграле в (1.20) заменим функцию $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ на её среднее значение по молекуле, равное $1/N_{em}$. Это соответствует исключению из потенциала Хартри усреднённого самодействия.

Решения уравнения Кона – Шема с опорной функцией, взятой из решения для второго атома, будем называть решениями второго типа. В случае решений второго типа вместо условий (1.19) будем полагать:

$$\begin{aligned} \int d\vec{r}_2 n_1(r_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) &= 0, \\ \int d\vec{r}_2 n_2(r_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) &= -1, \\ \int d\vec{r}_2 \delta n(\vec{r}_2) \cdot \bar{h}(\vec{r}, \vec{r}_2) &= 0. \end{aligned} \quad (1.26)$$

В этом случае в первом интеграле в (1.20), который берётся по шару с центром вокруг первого атома, аппроксимация функции $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ с учётом (1.26) очевидна. Из первого интеграла в (1.26) следует, что $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -N_{e1} \cdot F_1(r_1) \cdot F_1(r_2)$, где $F_1(r)$ берётся для первого атома. Во втором интеграле, который берётся по шару с центром вокруг второго атома, аппроксимация функции $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ также очевидна. Она даётся формулами (1.21), (1.23) и (1.24) с константами γ, β и N_{e2} для второго атома. Поправка $\delta n(\vec{r})$ в формулах (1.20), (1.26) достаточно мала в тех областях интегрирования, где величины $n_1(|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|)$ и $n_2(|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|)$ являются основными. Так как заряд, связанный с величиной $\delta n(\vec{r})$, равен нулю и третий интеграл в (1.26) тоже равен нулю, то в третьем интеграле в (1.20) заменим функцию $\bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ на её среднее значение по молекуле равное $1/N_{em}$. Это опять соответствует исключению из потенциала Хартри усреднённого самодействия.

Теперь можно переписать приближенный молекулярный потенциал для уравнения Кона – Шема первого типа в виде:

$$V_{mol}(\vec{r}) = v_{at1}(|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|) + v_{at2}(|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|) + \frac{(N_{em} - 1)}{N_{em}} \int d\vec{r}_2 \frac{\delta n(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|}. \quad (1.27)$$



Здесь введены обозначения:

$$v_{at1}(r) = \frac{(N_{e1} - 1) \cdot (1 - U_1(r) + v_{xcp1}(r)) - Z_1}{r}, \quad (1.28)$$

$$v_{xcp1}(r) = 4\pi F_1(r) \int_r^{R_1} x^2 F_1(x) \cdot n_1(x) \cdot \left(1 - \frac{r}{x}\right) dx, \quad (1.29)$$

$$v_{at2}(r) = \frac{N_{e2} \cdot (1 - U_2(r) + v_{xcp2}(r)) - Z_2}{r}, \quad (1.30)$$

$$v_{xcp2}(r) = 4\pi F_2(r) \int_r^{R_2} x^2 F_2(x) \cdot n_2(x) \cdot \left(1 - \frac{r}{x}\right) dx. \quad (1.31)$$

Аналогично можно переписать аппроксимированный молекулярный потенциал для уравнения Кона – Шема второго типа в виде (1.27), в котором введены обозначения:

$$v_{at1}(r) = \frac{N_{e1} \cdot (1 - U_1(r) + v_{xcp1}(r)) - Z_1}{r}, \quad (1.32)$$

$$v_{at2}(r) = \frac{(N_{e2} - 1) \cdot (1 - U_2(r) + v_{xcp2}(r)) - Z_2}{r}. \quad (1.33)$$

2. Решение уравнения Кона-Шема для молекулы методом опорной функции

Используя метод опорной функции, следует переписать уравнение Кона-Шема для $\delta\psi_\alpha(\vec{r})$, выделив $\psi_\alpha^j(\vec{r})$ первого типа:

$$\begin{aligned} & [-(1/2)\Delta + V_{mol}(\vec{r})] \cdot \delta\Psi_\alpha(\vec{r}) = E_\alpha \cdot \delta\Psi_\alpha(\vec{r}) + \\ & (E_\alpha - \varepsilon_j^1 - v_{at2}(|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|) - \delta V(\vec{r})) \cdot \psi_\alpha^j(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь введено обозначение:

$$\delta V(\vec{r}) = \frac{(N_{em} - 1)}{N_{em}} \int d\vec{r}_2 \frac{\delta n(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|}, \quad (2.2)$$

а ε_j^1 – собственное значение, соответствующее опорной функции $\psi_\alpha^j(\vec{r})$ первого типа, полученной при оптимальном решении задачи о первом сферическом сжатом атоме в молекуле.

Аналогично получим уравнение Кона-Шема для $\delta\psi_\alpha(\vec{r})$, выделив опорную функцию $\psi_\alpha^j(\vec{r})$ второго типа:

$$\begin{aligned} & [-(1/2)\Delta + V_{mol}(\vec{r})] \cdot \delta\Psi_\alpha(\vec{r}) = E_\alpha \cdot \delta\Psi_\alpha(\vec{r}) + \\ & (E_\alpha - \varepsilon_j^2 - v_{at1}(|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|) - \delta V(\vec{r})) \cdot \psi_\alpha^j(\vec{r}) \end{aligned}, \quad (2.3)$$

где ε_j^2 – собственное значение, соответствующее опорной функции $\psi_\alpha^j(\vec{r})$ второго типа, полученной при оптимальном решении задачи о втором сферическом сжатом атоме в молекуле.

Если получено решение уравнений (2.1) и (2.3) для всех α , то можно вычислить поправку к молекулярной электронной плотности $\delta n(\vec{r})$:

$$\delta n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \cdot \delta \Psi_{\alpha}(\vec{r}) \cdot (\delta \Psi_{\alpha}(\vec{r}) + 2 \cdot \Psi_{\alpha}^j(\vec{r})) . \quad (2.4)$$

Как было указано выше, поправка (2.4) находится самосогласованным образом. Сначала полагаем ее равной нулю. В этом случае из формулы (2.2) следует, что $\delta V(\vec{r})$ тоже равно нулю. Решая приближенные уравнения (2.1) и (2.3) для всех α , вычисляем поправку к молекулярной электронной плотности $\delta n(\vec{r})$. Подставляя полученную поправку в формулу (2.2) получаем новое приближение для $\delta n(\vec{r})$. Процедуру продолжаем до тех пор, пока начальное и конечное $\delta n(\vec{r})$ не совпадут с заданной точностью.

В уравнениях (2.1) и (2.3) удобно перейти в цилиндрическую систему координат с осью z направленной вдоль линии, соединяющей ядра атомов в молекуле. Тогда потенциалы (1.27)–(1.33) не зависят от угла φ . Для уравнения (2.1) удобно ввести обозначение для функции $\delta \psi_{\alpha}(\vec{r})$, не зависящей от угла φ :

$$\delta \psi_{\alpha}(\vec{r}) = y_{\alpha}(r, z) / \sqrt{r} , \quad (2.5)$$

и переписать уравнение (2.1) в виде:

$$\frac{\partial^2 y_{\alpha}(r, z)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 y_{\alpha}(r, z)}{\partial z^2} + \left(0.25/r^2 - 2 \cdot [V_{\text{мол}}(\vec{r}) - E_{\alpha}] \right) \cdot y_{\alpha}(r, z) = -F1_{\alpha}(r, z) . \quad (2.6)$$

Здесь введено обозначение:

$$F1_{\alpha}(r, z) = 2 \cdot \sqrt{r} \cdot (E_{\alpha} - \varepsilon_j - v_{at2}(|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|) - \delta V(r, z)) \cdot \Psi_{\alpha}^j(r, z) . \quad (2.7)$$

Уравнение (2.3) также можно записать аналогично (2.6), если ввести вместо $F1_{\alpha}(r, z)$ обозначение:

$$F2_{\alpha}(r, z) = 2 \cdot \sqrt{r} \cdot (E_{\alpha} - \varepsilon_j - v_{at1}(|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|) - \delta V(r, z)) \cdot \Psi_{\alpha}^j(r, z) . \quad (2.8)$$

Для опорных функций, являющихся решениями задачи для сферического атома с сферическими гармониками, зависящими от угла φ , следует вместо (2.5) ввести $\delta \psi_{\alpha}(\vec{r})$ с такой же зависимостью от угла φ . Например, для p состояния можно ввести $\delta \psi_{\alpha}(\vec{r})$ в виде:

$$\delta \psi_{\alpha}(\vec{r}) = y_{\alpha}(r, z) \cdot \cos \varphi / \sqrt{r} , \quad (2.9)$$

или

$$\delta \psi_{\alpha}(\vec{r}) = y_{\alpha}(r, z) \cdot \sin \varphi / \sqrt{r} . \quad (2.10)$$

Подставляя (2.9) или (2.10) в уравнение (2.3), вместо (2.6) получим уравнение:

$$\frac{\partial^2 y_{\alpha}(r, z)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 y_{\alpha}(r, z)}{\partial z^2} - \left((m^2 - 0.25) / r^2 + 2 \cdot [V_{\text{мол}}(\vec{r}) - E_{\alpha}] \right) \cdot y_{\alpha}(r, z) = -F1_{\alpha}(r, z) . \quad (2.11)$$



Под величиной $\Psi_\alpha^j(r, z)$ в (2.7) в этом случае следует понимать часть атомной функции, не зависящую от угла φ .

Очевидно, что подстановка (2.10) или (2.9) в уравнение второго типа снова приведет к уравнению (2.11) с функцией $F2_\alpha(r, z)$, где под величиной $\Psi_\alpha^j(r, z)$ в (2.8) опять следует понимать часть атомной функции, не зависящую от угла φ . Следовательно, для опорной функции r типа решение $y_\alpha(r, z)$ соответствует дважды вырожденной энергии. Аналогично, для числа m , не равного нулю, возникнет двукратное вырождение из-за зависимости от угла φ для каждой опорной функции.

Рассмотрим решение уравнений (2.6) и (2.11). Это уравнения одного типа. Все они удовлетворяют нулевым граничным условиям:

$$y_\alpha(r, z_{\max}) = y_\alpha(r, -z_{\max}) = y_\alpha(r_{\max}, z) = y_\alpha(0, z) = 0. \quad (2.12)$$

Поэтому метод решения для них один и тот же.

Будем решать методом последовательных приближений. Перейдем от дифференциальных уравнений к разностным. Введем одинаковый шаг по осям r и z :

$$h = \frac{r_{\max}}{L1}, z = -z_{\max} + h \cdot n2, r = h \cdot n1, \quad (2.13)$$

$$n1 = 1, 2, \dots, L1, n2 = 1, 2, \dots, L2$$

Тогда, с точностью до второго порядка по h уравнение (2.6) примет вид:

$$y_{n1+1, n2}^\alpha + y_{n1-1, n2}^\alpha + y_{n1, n2+1}^\alpha + y_{n1, n2-1}^\alpha - 4 \cdot y_{n1, n2}^\alpha + (0.25/n1^2 - 2 \cdot [(V_{\text{мол}})_{n1, n2} - E_\alpha] \cdot h^2) \cdot y_{n1, n2}^\alpha = -(F1_\alpha)_{n1, n2} \cdot h^2 \quad (2.14)$$

Так как сама величина $y_{n1, n2}^\alpha$ мала по сравнению с $\Psi_\alpha^j(\vec{r})$, то такая точность приемлема. Введем обозначение:

$$D_{n1, n2} = 4 - (0.25/n1^2 - 2 \cdot [(V_{\text{мол}})_{n1, n2} - E_\alpha] \cdot h^2). \quad (2.15)$$

Теперь уравнение (3.41) можно переписать в виде:

$$y_{n1, n2}^\alpha = \frac{(y_{n1, n2+1}^\alpha + y_{n1, n2-1}^\alpha + y_{n1+1, n2}^\alpha + y_{n1-1, n2}^\alpha) + h^2 \cdot (F1_\alpha)_{n1, n2}}{D_{n1, n2}}. \quad (2.16)$$

Вид (2.16) удобен для применения итерационного метода решения. В (2.15) входит неизвестная энергия E_α . Так как используется метод последовательных приближений, то при нахождении первоначального приближения полагаем $\delta V(\vec{r}) = 0$ и

$$E_\alpha - \varepsilon_j = \int \Psi_\alpha^j(\vec{r}) \cdot v_{at2} \left(\left| \vec{r} + \vec{R}_m \right| \right) \cdot \Psi_\alpha^j(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (2.17)$$

Это соответствует применению первого порядка теории возмущений к потенциалу $v_{at2} \left(\left| \vec{r} + \vec{R}_m \right| \right)$ для уравнения (2.6). При решении уравнения второго типа среднее значение по невозмущенным функциям берется от потенциала $v_{at1} \left(\left| \vec{r} - \vec{R}_m \right| \right)$. Остальные изменения в (2.16) при переходе от (2.6) к (2.11) или к аналогичному уравнению второго типа очевидны.

Рассмотрим формулу (2.4) для добавочной молекулярной плотности $\delta n(r, z)$. Перепишем её с учетом обозначений (2.5):

$$\delta n(r, z) = \frac{\mu(r, z)}{r},$$

$$\mu(r, z) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \cdot y_{\alpha}(r, z) \cdot (y_{\alpha}(r, z) + \chi_{\alpha}(r, z) \sqrt{r} \cdot A_{\alpha}(r, z)). \quad (2.18)$$

Здесь использованы обозначения $A_{\alpha}(r, z)$ для не зависящей от ϕ части сферической функции, деленной на $\sqrt{r^2 + z^2}$, и $\chi_{\alpha}(r, z)$ для нормированной радиальной атомной волновой функции. Как уже отмечалось выше при вычислении электронной плотности молекулы зависимость от ϕ , даже если она есть в волновой функции, исчезает. Функция $\mu(r, z)$ может быть табулирована в массив, если будут вычислены все функции $y_{\alpha}(r, z)$.

Вычисление функций $y_{\alpha}(r, z)$ проводится самосогласованным образом. На первом этапе полагается $\delta V(\vec{r}) = 0$. После вычисления функций $y_{\alpha}(r, z)$ в первом приближении, по формуле (2.18) вычисляется добавочная молекулярная электронная плотность $\delta n(r, z)$ в первом приближении. После этого по формуле (2.2) вычисляется $\delta V(\vec{r})$ тоже в первом приближении.

Когда задан массив $\delta V(r, z)$, то описанным выше методом могут быть найдены массивы $y_{\alpha}(r, z)$ в следующем приближении. Самосогласование будет производиться до тех пор, пока массивы $y_{\alpha}(r, z)$ не совпадут с заданной точностью. Трехмерный интеграл (2.2), определяющий массив $\delta V(r, z)$, является несобственным интегралом, поэтому обычные алгоритмы для его вычисления нельзя использовать. Поэтому будем вычислять несобственный интеграл (2.2) только для границ: $r=0$, $r=r_{\max}$, $z=z_{\max}$, $z=-z_{\max}$. Так как на каждой границе число узлов не велико, то общее вычисление значений интеграла во всех узлах не займет много времени. Когда граничные значения вычислены, можно легко определить значения потенциала внутри области $-z_m < z < z_m$, $0 < r < r_m$. Для этого достаточно в цилиндрических координатах решить двумерное уравнение Пуассона:

$$\frac{\partial^2 v_d(r, z)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_d(r, z)}{\partial z^2} + \frac{0.25}{r^2} \cdot v_d(r, z) = -4\pi \cdot \mu(r, z) / \sqrt{r}. \quad (2.19)$$

Здесь введено обозначение:

$$v_d(r, z) = \delta V(r, z) \cdot \sqrt{r}. \quad (2.20)$$

Алгоритм решения уравнения (2.19) аналогичен тому, который был использован при решении уравнения (2.6).

3. Вычисление энергии связи молекулы

В первом разделе данной статьи обсуждалась аппроксимация обменно-корреляционной энергии и потенциала в молекуле. Будем использовать следующее определение для энергии связи:

$$E_{cs} = E - E_2 - E_1, \quad (3.1)$$

где E_1 и E_2 – полные энергии атомов, составляющих молекулу.

В рамках метода функционала электронной плотности для полной энергии молекулы E вместо (1.1) имеем следующее выражение:



$$E = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \cdot E_{\alpha} - \int V_{\text{мол}}(\vec{r}) \cdot n(\vec{r}) d\vec{r} + E_{\text{har}}[n] + E_{\text{xc}}[n] + \int V_e(\vec{r}) \cdot n(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{Z_1 \cdot Z_2}{R_m} \quad (3.2)$$

В первом разделе данной статьи была введена аппроксимация обменно-корреляционного потенциала в молекуле. В рамках этой аппроксимации можно записать сумму энергии Хартри (1.2) и обменно-корреляционной энергии (1.3) в виде:

$$E_{\text{har}}[n] + E_{\text{xc}}[n] = \frac{1}{2} \int d\vec{r}_2 \int d\vec{r}_1 \frac{n(\vec{r}_2) \cdot (1 + \bar{h}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)) n(\vec{r}_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{2} \int d\vec{r}_2 n(\vec{r}_2) \cdot (v_{\text{mhar}}(\vec{r}_2) + v_{\text{mxc}}(\vec{r}_2)) \quad (3.3)$$

Здесь использованы обозначения $v_{\text{mxc}}(\vec{r})$ и $v_{\text{mhar}}(\vec{r})$ для обменно-корреляционного потенциала (1.20) и потенциала Хартри в молекуле (1.12). Как и ранее, для электронной плотности $n(\vec{r}_2)$ используется выражение (1.10). Если воспользоваться явным видом потенциалов $V_{\text{мол}}(\vec{r})$ и $V_e(\vec{r})$ и привести подобные члены, то формулу (3.2) можно преобразовать к виду:

$$E = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \cdot E_{\alpha} - \frac{1}{2} \int d\vec{r}_2 n(\vec{r}_2) \cdot (v_{\text{mhar}}(\vec{r}_2) + v_{\text{mxc}}(\vec{r}_2)) + \frac{Z_1 \cdot Z_2}{R_m} \quad (3.4)$$

В результате подстановки электронной плотности (1.10) в формулу (3.4) возникают три интеграла. Первый интеграл берется по объёму первого сферического атома, второй интеграл берется по объёму второго сферического атома, а третий – от малой добавки электронной плотности, по всему объёму молекулы. Поэтому в первом интеграле для обменно-корреляционного потенциала (1.20) и потенциала Хартри в молекуле (1.12) используем ту аппроксимацию, которая была применена при решении уравнения Кона – Шема для волновых функций первого типа. Во втором интеграле для обменно-корреляционного потенциала (1.20) и потенциала Хартри в молекуле (1.12) используем ту аппроксимацию, которая была применена при решении уравнения Кона – Шема для волновых функций второго типа. В третьем интеграле для обменно-корреляционного потенциала используем простейшую аппроксимацию для компенсации усредненного самодействия в потенциале Хартри.

В результате подстановки всех необходимых выражений и приведения подобных членов в формуле (3.4), имеем:

$$E = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \cdot E_{\alpha} + \frac{Z_1 \cdot Z_2}{R_m} - \frac{N_{e1} \cdot N_{e2}}{R_m} - \sum_j n_j \cdot \varepsilon_j^1 - \sum_j n_j \cdot \varepsilon_j^2 + E_1^{\text{at}} + E_2^{\text{at}} + E_{\text{неп}} - E_{\mu} \quad (3.5)$$

Здесь введены обозначения:

$$E_{\mu} = \frac{(N_{em} - 1)}{N_{em}} \cdot \int_{-z_m}^{z_m} dz_2 \int_0^{r_m} dr_2 \cdot \mu(r_2, z_2) \cdot \left(v_{1har} \left(\sqrt{r_2^2 + (z_2 + R_m/2)^2} \right) + v_{2har} \left(\sqrt{r_2^2 + (z_2 - R_m/2)^2} \right) + v_d(r_2, z_2) / (2\sqrt{r_2}) \right), \quad (3.6)$$

E_1^{at} и E_2^{at} – полные энергии сферических сжатых атомов в молекуле с опорными функциями $\psi_{\alpha}^j(\vec{r})$ первого и, соответственно, второго типа, полученными для оптимального решения задачи Кона-Шема, и E_{nep} – энергия перекрытия, которая задается выражением:

$$E_{nep} = \frac{1}{2} \left(\frac{N_{e1} \cdot N_{e2}}{R_m} \cdot (U_2(R_m) + U_1(R_m)) + N_{e1} \int d\vec{r}_1 \frac{n_2(r_1) \cdot \left(U_1(|\vec{r}_1 + \vec{R}_m|) - v_{1xcp}(|\vec{r}_1 + \vec{R}_m|) \right)}{(|\vec{r}_1 + \vec{R}_m|)} + N_{e2} \int d\vec{r}_1 \frac{n_1(r_1) \cdot \left(U_2(|\vec{r}_1 - \vec{R}_m|) - v_{2xcp}(|\vec{r}_1 - \vec{R}_m|) \right)}{(|\vec{r}_1 - \vec{R}_m|)} \right). \quad (3.7)$$

Подставляя E из (3.5) в формулу (3.1), получим для энергии связи окончательное выражение:

$$E_{cv} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \cdot E_{\alpha} + \frac{Z_1 \cdot Z_2}{R_m} - \frac{N_{e1} \cdot N_{e2}}{R_m} - \sum_j n_j \cdot \varepsilon_j^1 - \sum_j n_j \cdot \varepsilon_j^2 + dE_1^{at} + dE_2^{at} + E_{nep} - E_{\mu}. \quad (3.8)$$

Здесь введены обозначения $dE_2^{at} = E_2^{at} - E_2$ и $dE_1^{at} = E_1^{at} - E_1$ для разности полных энергий сферических сжатых атомов в молекуле и соответствующих свободных атомов.

Отдельные компоненты, входящие в (3.8) зависят от выбранного радиуса сжатого атома. Для того, чтобы определить, какие радиусы R_1 и R_2 являются оптимальными для численных расчетов энергии связи следует провести расчеты энергии связи по формуле (3.8) для разных R_1 и R_2 и посмотреть как от этого будет зависеть результат.

4. Энергия связи иона молекулы водорода

Для проверки точности метода опорной функции была рассмотрена тестовая задача, имеющая точное решение. Энергия диссоциации иона молекулы водорода известна и есть независимые методы решения уравнения Шредингера для электрона в поле двух протонов, находящихся на заданном расстоянии R_m . Поэтому можно применить описанную выше теорию к вычислению этой энергии. Для энергии диссоциации E_d воспользуемся формулой:



$$E_d = E_{cv} + \omega_k / 2. \quad (4.1)$$

Здесь ω_k – частота колебаний протонов в ионе молекулы водорода, которая вычисляется в приближении Борна-Оппенгеймера. Так как в ионе молекулы водорода только один электрон, то гамильтониан молекулы H_{mol} имеет вид:

$$H_{mol} = -(1/2)\Delta + V_{mol}(\vec{r}) \quad (4.2)$$

и уравнение Шредингера совпадает с уравнением Кона-Шема:

$$[-(1/2)\Delta + V_{mol}(\vec{r})] \cdot \Phi_1(\vec{r}) = E_1 \Phi_1(\vec{r}), \quad (4.3)$$

где

$$V_{mol}(\vec{r}) = -\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_m / 2|} - \frac{1}{|\vec{r} + \vec{R}_m / 2|}. \quad (4.4)$$

Для полной энергии имеем простое выражение:

$$E = \frac{1}{R_m} + E_1. \quad (4.5)$$

В работе [3] предложено удобное приближение для волновой функции иона молекулы водорода:

$$\Psi_1^1(\vec{r}) = \frac{\xi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi(1+S)}} \left(\exp(-\xi \cdot r_a) + \exp(-\xi \cdot r_b) \right). \quad (4.6)$$

Здесь использованы обозначения:

$$r_a = |\vec{r} - \vec{R}_m / 2|, \quad r_b = |\vec{r} + \vec{R}_m / 2|, \quad \rho = \xi \cdot R_m, \quad (4.7)$$

$$S = (1 + \rho + \rho^2 / 3) \exp(-\rho).$$

Будем ее использовать в качестве опорной функции $\Psi_1^1(\vec{r})$.

Для начала итерационного процесса необходимо задать хорошее приближение для величины E_1 . Для этого воспользуемся диагональным матричным элементом гамильтониана по опорной функции:

$$\varepsilon_1 = \int \Psi_1^1(\vec{r}) H \Psi_1^1(\vec{r}) d\vec{r} = -\xi^2 / 2 + \left(\xi(\xi - 1) - \xi \cdot \zeta + \xi(\xi - 2) \cdot \tau \right) / (1 + S), \quad (4.8)$$

где

$$\zeta = 1/\rho (1 - (1 + \rho) \exp(-2\rho)), \quad (4.9)$$

$$\tau = (1 + \rho) \exp(-\rho).$$

Как и ранее во втором разделе данной статьи будем искать решение уравнения (4.3) с потенциалом (4.4) в виде:

$$\Phi_1(\vec{r}) = \Psi_1^1(\vec{r}) + y_1(r, z) / \sqrt{r}. \quad (4.10)$$

Была составлена программа для нахождения функции $y_1(r, z)$ с учетом вида опорной функции (4.6) и действия на нее гамильтониана H_{mol} (4.2). Результаты расчетов приведены на рис. 1.

Расстояние между протонами измеряется в радиусах Бора. Видно, что минимум достигается при $R_m = 1.9975 \pm 0.1057 \text{ н.м.}$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением [4].

На рис. 1 по рассчитанным точкам построена парабола:

$$E_1 = -0.600137 + 0.050586(R_m - 1.9975)^2 \quad (4.11)$$

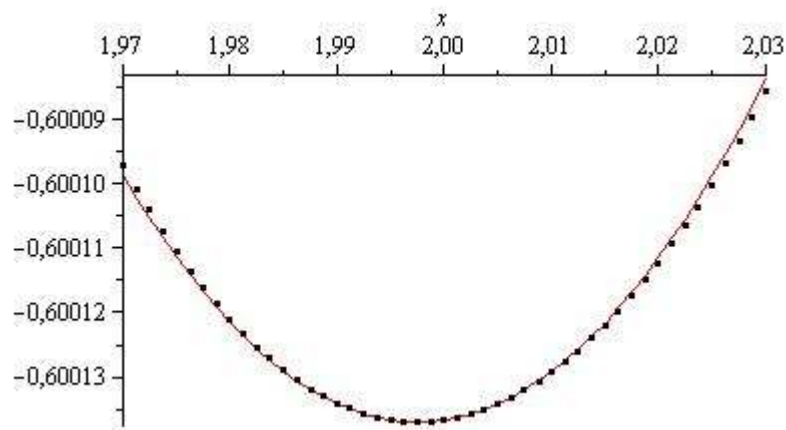


Рис.1. График зависимости полной энергии иона молекулы водорода E от расстояния между протонами R_m .

Если считать, что потенциальная энергия колеблющихся протонов в ионе молекулы водорода описывается этой параболой, то нулевая энергия колебаний протонов

$$\omega_k/2 = 13.6058 \cdot \sqrt{\frac{0.050586 \cdot 2}{918.075}} = 0.143 \text{ eV.}$$

С учетом этой поправки энергия связи иона молекулы водорода получается равной -2.582 eV . Экспериментальное значение энергии связи равно -2.65 eV . Разница составляет около -0.068 eV . Эта разница связана с тем, что при решении использовался шаг равный 0.03 радиуса Бора.

Заключение

В настоящей работе предложено обобщение приближения аппроксимированного локального потенциала на случай молекул. Для решения уравнения Кона-Шема разработан новый алгоритм – метод опорной функции. Этот метод опробован на тестовой задаче: вычисление энергии диссоциации иона молекулы водорода.

Для шага 0.03 радиуса Бора точность вычисления энергии диссоциации составила $0,07 \text{ eV}$. Если учесть, что на самом деле вычисляется не энергия диссоциации, а полная энергия молекулы, которая составляет -16.37 eV , то относительная точность расчета оказывается лучше 0.4% . Возможно, что уменьшение шага и увеличение числа итераций позволило бы еще лучше согласовать теоретическое и экспериментальное значения энергии связи. Все же следует признать, что и для такого грубого шага метод опорной функции оказывается достаточно точным.

Литература

1. Шкловский А.Г. Аппроксимация обменно-корреляционного потенциала в методе функционала электронной плотности// Научные ведомости БелГУ. Серия Физико-математические науки, 2007. – №6(37). – Вып. 13. – С. 150-155.



2. Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча, – М.: Мир, 1987. – 400 с.
3. Флюгге Э. Задачи по квантовой механике. Т. 1, – М.: Мир, 1974. – 341 с.
4. Madsen M.M., Peak I.M. Eigenparameters for the Lowest Twenty Electronics States of the Hydrogen Molecule Ion. – «Atomic Data», 1971, v.2(3), p.171.

SOLVING KOHN-SHAM EQUATION FOR MOLECULE WITH METHOD OF SUPPORT FUNCTION

A.G. Shklovskij¹⁾, M.A. Shklovskaya²⁾

¹⁾Belgorod State University, Studencheskaja street, 14, Belgorod, 308007, Russia

²⁾Moscow State Technical University named after N.A. Bauman,
Vtoraja Baumanskaja street, 5, Moscow, 105005,
e-mail: taural@mail.ru

The generalization of approximation of exchange-correlation energy in the density functional theory was described in this article. This generalization was used for finding exchange-correlation potential of diatomic molecule. New algorithm of solving Kohn-Sham equation for molecule, method of support function, was given. Calculation of dissociation energy of hydrogen ion in molecule was applied for testing this method.

Key words: density functional theory, exchange-correlation potential, Kohn-Sham equation, method of support function.

ТЕРМОДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ ТЕПЛООВОГО КАНАЛА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЁНКАХ

Н.В. Андреева, Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14,
e-mail: N_Andreeva@bsu.edu.ru, virch@bsu.edu.ru

Развивается термодинамическая теория теплового пробоя тонких полупроводниковых плёнок, являющихся функциональными элементами электрической цепи с постоянной ЭДС. На её основе получены общие формулы для радиуса проплавленных каналов и для пороговой температуры возникновения теплового пробоя. Эффективность этих общих формул демонстрируется на примере плёнок аморфных полупроводниковых материалов.

Ключевые слова: тепловой пробой, микроплазменные каналы, теплопроводность, электропроводность, тепловая неустойчивость.

Введение

В настоящей работе развивается элементарная теория теплового пробоя, основанная на представлении о возникновении набора тепловых каналов в полупроводниковой плёнке – малых пространственных областей приближённо цилиндрической формы, которые пронизывают плёнку в направлении, перпендикулярном к её плоскостям. Эти каналы обладают существенно повышенной, по сравнению с окружающей их основной массой плёнки, температурой. Часто, они называются *микроплазменными каналами*. Похожие представления были использованы ранее в известной элементарной теории теплового пробоя диэлектриков [1], [2]. Тепловые каналы зарождаются на статических, связанных с нарушениями внутренней структуры материала, всплесках температуры [3]. В рамках таких представлений, развиваемой теории, каждый из каналов рассматривается в качестве элемента термодинамической системы. Она состоит, таким образом, из набора тепловых каналов, пронизывающих плёнку и обменивающихся теплом с окружающим их термостатом, роль которого выполняет среда плёнки, находящаяся вне этих каналов. Целью нашей работы является получение формулы для размера проплавленных каналов на основе условий теплового равновесия такой термодинамической системы. Впервые, такой подход к исследованию условия возникновения теплового пробоя в плёнке полупроводникового материала, был предложен в [4], однако, в этой работе были использованы температурные зависимости, не привязанные к экспериментальным данным конкретных полупроводниковых материалов. Однако эффективность этого подхода была продемонстрирована при анализе условий стабилизации динамического режима, приводящего к тепловому пробояю [5]. В следующем разделе, обосновывается возможность построения теории теплового пробоя, в рамках макроскопического подхода на основе понятия распределения температуры $T(\mathbf{x}, t)$ по пространству плёнки в каждый момент времени t , не используя микроскопических представлений физической кинетики.

Макроскопическое описание теплового пробоя

Обсудим, с микроскопической точки зрения, возможность макроскопического описания эффекта теплового пробоя полупроводниковых материалов. С этой целью, приведём доводы, основанные на известных экспериментальных данных, в пользу того, что описание динамики пробоя возможно в терминах распределения температуры по объёму образца материала. Кроме того, приведём доводы в пользу того, что адекватные количественные предсказания наблюдаемых характеристик теплового пробоя могут быть сделаны на основе экспериментально определяемых значений макроскопи-



ческих параметров состояния материала таких, как средний пространственный размер всплесков температуры в её равновесном распределении, средняя амплитуда этих всплесков и их плотность в образце материала.

Из экспериментов известно, что тепловой пробой развивается за времена порядка $10^{-8} \sim 10^{-6}$ с, которые, с точки зрения статистической физики, существенно превосходят кинетическое время релаксации $\sim 10^{-12}$ с к локальному равновесию в системе электронов и ионов кристаллической решётки материала, находящихся в области с линейными размерами порядка 10^{-5} см. Так как эти размеры существенно превосходят межатомные расстояния $\sim 10^{-8}$ см, то система частиц, в каждой из таких областей в пространстве полупроводниковой плёнки, допускает термодинамическое описание, ввиду малости флуктуаций относящихся к ним локальных термодинамических величин. Такой тип эволюции системы многих частиц связан с обменом теплом (и, возможно, частицами) между физически малыми областями с размерами $\sim 10^{-5}$ см и, поэтому, эволюция может быть описана в терминах, зависящих от времени локальных термодинамических величин, относящихся к каждой из этих областей. Локальное равновесие в системе электронов и ионов решётки характеризуется, в общем случае, в каждый момент времени t , температурой $T^i(\mathbf{x}, t)$ решёточной подсистемы и температурой $T^e(\mathbf{x}, t)$ электронной подсистемы в этой области, отмеченной радиус-вектором \mathbf{x} , а также плотностями $n^e(\mathbf{x}, t)$ и $n^i(\mathbf{x}, t)$ находящихся в ней электронов и дырок, соответственно. Таким образом, распределённые по образцу материала величины являются макроскопическими характеристиками состояния плёнки, усреднёнными по физически малой области. Описание динамики теплового пробоя в терминах таких усреднённых величин возможно, так как в объёме с указанными линейными размерами содержится $(10^{-5} \text{ см } 10^{-8} \text{ см})^3 = 10^9$ частиц и, следовательно, относительные статистические флуктуации этих величин имеют порядок $\sim 10^{-9/2}$. Заметим, что размеры проплавленных, в результате пробоя, каналов имеют порядок 10^{-3} см, а средний линейный размер области в образце, в которой проявляется существенные неоднородности температуры, связанные с возникновением тепловой неустойчивости, имеет порядок 10^{-4} см, т.е. совпадает, по порядку величины, с поперечным размером наблюдаемого микроплазменного канала. В области с такими линейными размерами содержится уже 10^{12} частиц и относительные флуктуации имеют порядок $\sim 10^{-12/2} = 10^{-6}$. Всё это позволяет надеяться на то, что динамику теплового пробоя можно описать в терминах функций $T^i(\mathbf{x}, t)$, $T^e(\mathbf{x}, t)$, $n^e(\mathbf{x}, t)$, $n^i(\mathbf{x}, t)$, составив для них систему эволюционных уравнений. Указанный выше характерный размер существенной температурной неоднородности с амплитудой ~ 10 град, получается из среднего размера r_0 дислокаций, на которых, согласно существующим представлениям, возникают всплески температуры. Например, для линейных дислокаций этот размер имеет порядок $r_0 \approx 10^{-4} \div 10^{-3}$ см. При этом, если чистота приготовления материала такова, что плотность λ дислокаций (линейных) имеет порядок 10^4 см^{-2} , то их объёмная доля $\lambda \cdot r_0^2 = 10^4 \cdot (10^{-4})^2 \div 10^4 \cdot (10^{-3})^2 = 10^{-4} \div 10^{-2} \ll 1$, а среднее расстояние между ними имеет порядок 10^{-2} см. Тогда, обмен теплом между всплесками температуры, сосредоточенными на дислокациях, осуществляется за времена порядка $c \cdot \rho \cdot r_0^2 / \kappa = 10^{-7} \div 10^{-5}$ с (c – теплоёмкость материала, ρ – его плотность), что превосходит, по крайней мере, на порядок указанные выше времена развития пробоя. Отсюда можно сделать следующие выводы: во-первых, характерные тепловые неоднородности в образце, которые порождают

тепловую неустойчивость при зарождении теплового пробоя, можно также описывать в терминах усредненного по физически малой области $\sim 10^{-5}$ см распределения температуры, во-вторых, флуктуации температуры в начальном положении можно считать с большой точностью статистически независимыми, и обменом теплом между ними, в процессе развития пробоя, можно пренебречь. Выше, для описания эволюции полупроводникового материала в макроскопическом приближении введены различные температуры: $T^i(\mathbf{x}, t)$ – для кристаллической решётки (фононной подсистемы) и $T^e(\mathbf{x}, t)$ – для носителей (т.н. двухкомпонентное приближение). Однако, в рассматриваемом случае, при описании теплового пробоя, можно пренебречь различием между ними и оперировать распределением единой "макроскопической" температуры $T(\mathbf{x}, t) = T^e(\mathbf{x}, t) = T^i(\mathbf{x}, t)$. Это связано с тем, что характерное время выравнивания температур между подсистемами имеет порядок 10^{-11} с, что существенно меньше характерного времени развития теплового пробоя. Наконец, если не интересоваться динамикой плотности тока, т.е. не описывать эффект *файламентации тока* в плоскости плёнки при описании теплового пробоя, то можно попытаться составить замкнутое динамическое уравнение, описывающее эволюцию распределения температуры $T(\mathbf{x}, t)$, не прибегая к использованию функций $n^e(\mathbf{x}, t)$ и $n^i(\mathbf{x}, t)$. В частности, при этом не имеет смысла разделять результирующий электрический ток на две составляющих – ток электронов и ток дырок. Тогда, можно ожидать, что характеристики теплового пробоя будут зависеть только от суммарной средней плотности носителей, а зависимость от этого параметра содержится в электропроводности материала. Итак, можно сделать вывод: макроскопическое описание эффекта теплового пробоя, которое будет развито в настоящей работе, должно строиться на основе уравнения для переноса тепла в терминах распределения $T(\mathbf{x}, t)$ температуры в плёнке материала. Тепловой пробой плёнок полупроводниковых материалов связан с локализацией тепла в малых пространственных областях плёнки. Поэтому, основной проблемой развиваемого макроскопического подхода в теории теплового пробоя является объяснение такой локализации и её последовательное описание в терминах распределения температуры $T(\mathbf{x}, t)$. Последовательная теория эффекта пробоя, таким образом, должна дать описание процесса формирования тепловых каналов. Попытка построения теории, основанной на описанных представлениях была предпринята в работах [7], [8], однако, она столкнулась с серьёзными математическими трудностями. В настоящей работе построим теорию, основанную на термодинамических соображениях, которая позволяет получить значения экспериментально наблюдаемых величин, не используя сложных математических средств. Появление тепловых каналов, по нашему мнению, является следствием неравномерного нагревания плёнки, связанного с положительной обратной связью между локальным ростом температуры и ростом плотности электрического тока. Появление положительной обратной связи обязано наличию возрастающей зависимости электропроводности материала от температуры. При этом выделяющееся тепло не успевает компенсироваться посредством процесса теплопроводности, в результате которого оно от более нагретых областей переносится к менее нагретым. Таким образом, стартовой причиной появления теплового пробоя является наличие всплесков в распределении температуры в плёнке с характерным пространственным размером и характерной амплитудой. Появление же теплового пробоя является следствием согласованного действия двух факторов: роста проводимости и намного более медленного изменения теплопроводности. Первый фактор усиливает неравномерность нагревания различных участков материала, причём эта неравномерность тем более резкая, чем

выше температура участка. Второй фактор препятствует теплообмену между различными областями в материале, что обеспечивает локализацию тепла в некоторых областях при слабом изменении средней температуры. Дополнительно к этому, в условиях неравномерного нагревания различных физически малых участков на плоскости плёнке, с течением времени возникает перераспределение между ними подводимой мощности от источника питания. Такое перераспределение вызвано ограничением суммарной величины электрического тока в связи с постоянством электродвижущей силы. Этот механизм, в конце концов, приводит к филаментации тока на плоскости плёнки [6].

Наконец, выскажем предположения относительно того, которые находят своё подтверждение в результатах настоящей работы, каким образом реализуется пороговый характер возникновения теплового пробоя. По мнению авторов, этот эффект является следствием соотношения между двумя величинами – отношения теплопроводности $k(T)$ в данной фиксированной области на плёнке к крутизне роста по температуре мощности, выделяемой на нагрев этого участка (которая пропорциональна крутизне роста $\sigma'(T)$ электропроводности материала в этой области) и средней амплитуды θ_0 всплесков в распределении температуры по плоскости плёнки. Как только эта средняя амплитуда превысит указанное отношение, то в наиболее высоких всплесках температуры, превышающих его, запускается механизм положительной обратной связи, который приводит к развитию режима пробоя. Так как отношение теплопроводности к крутизне электропроводности является функцией температуры, то та температура T_* (если величина напряжения, падающего на плёнку, фиксирована), при которой это отношение превысит имеющийся уровень средней амплитуды температурных всплесков, который зависит от чистоты приготовления материала (от плотности дислокаций λ , как раз и является той пороговой температурой, при которой возникает пробой. При медленном нагреве плёнки джоулевым теплом, когда температура теплового фона T_0 подходит снизу к T_0 , некоторые из всплесков случайно превысят величину $T_* + \theta_0$, и именно эти всплески температуры являются зародышами теплового пробоя. Так как такое превышение может произойти одновременно, как правило, только лишь в небольшом числе областей на плоскости плёнки, то число мест расположения таких тепловых неоднородностей, в которых развивается тепловой пробой, не должно быть очень большим. Новые зародыши теплового пробоя не успевают появиться, так как после проплавления плёнки в каком-либо месте, электрический ток, протекающий через плёнку, резко фокусируется, устремляясь в образованные проплавленные каналы, вследствие чего новые проплавления не образуются. Кроме зависимости от температуры, указанное отношение зависит квадратичным образом от приложенного к плёнке напряжения. Это обуславливает зависимость момента возникновения теплового пробоя от напряжения, т.е., наряду с пороговой температурой T_* имеется пороговое напряжение, которое находится с ней в функциональной связи.

Термодинамика системы теплового канала и фона

Используя построения, известные в теории теплового пробоя диэлектриков (см., например, [2]), для анализа этого эффекта в плёнках полупроводниковых материалов без учёта эффекта стабилизации режима пробоя внешним активным электрическим сопротивлением. Положим, что в исследуемой полупроводниковой плёнке, к плоскостям которой приложено электрическое напряжение, возникли тепловые каналы. Эти каналы будем мысленно нумеровать индексом $i = 1, \dots, N$, где N – полное число каналов. Каждый i – й канал, будем характеризовать двумя параметрами – температурой T_i и радиусом r_i , $i = 1, \dots, N$. Обозначим T_0 температуру теплового фона и введём, для каж-

дого из каналов, отклонение $\Theta_i = T_i - T_0$, $i = 1, \dots, N$ его температуры от температуры теплового фона. На данной работе будем рассматривать каналы невзаимодействующими, т.е. не будем принимать во внимание наличие конкуренции между ними в перераспределении мощности, прикладываемой к плёнке. Такого рода взаимодействие рассмотрено при исследовании статистики образовавшихся микроплазменных каналов в других работах. Если считать, что тепловой пробой возникает вследствие достижения температуры плавления тем j -м каналом, из всей их совокупности, у которого температура T_j наибольшая, то, далее, нам достаточно изучить термодинамику системы, состоящей из одного канала и термостата. Исследуем условие зарождения теплового пробоя посредством одного фиксированного теплового канала на основе первого начала термодинамики, трактуя этот эффект как нарушение теплового равновесия между каналом и термостатом. Положим температуру этого выделенного канала равной T . Обозначим $W_1(T)$ – количество джоулевого тепла, выделяющегося при этой температуре в объёме канала в единицу времени. Пусть плотность тока j в канале, согласно закону Ома, определяется величиной $j = E \sigma(T)$, где E – напряжённость однородного электрического поля в плёнке, $\sigma(T)$ – зависящая от температуры электропроводность материала плёнки. Тогда, количество джоулевого тепла, выделяемое в единицу объёма канала равно $j^2 / \sigma(T)$. Следовательно, величина $W_1(T)$ определяется формулой

$$W_1(T) = V_* \cdot E^2 \sigma(T), \quad (1)$$

где V_* – объём канала в термодинамическом равновесии его с термостатом. Обозначим $P(T)$ – поток тепла через единицу площади боковой поверхности канала наружу в термостат при данной температуре T . Этот поток зависит от разности температур $T - T_0$ канала и фона и обращается в нуль, при обращении в нуль этой разности. В общем виде, этот поток можно представить в следующей "градиентной" форме

$$P(T) = \delta^{-1} \int_{T_0}^T \kappa(\tau) d\tau, \quad (2)$$

где $\kappa(T)$ – зависящий от температуры канала коэффициент теплопроводности материала, δ – ширина условного приграничного слоя канала, разделяющего основную его массу от теплового фона. Полный поток тепла из канала в термостат равен

$$W_2(T) = S_* \cdot P(T), \quad (3)$$

где S_* – площадь боковой поверхности канала. При протекании электрического тока через плёнку, джоулево тепло производится в каждый момент времени как в канале, так и в термостате, причём величина тепла, производимая в единицу объёма термостата, равна $E^2 \sigma(T_0)$. Тогда $W_1(T_0) = V_* E^2 \sigma(T_0)$ – количество тепла, выделяемого в единицу времени в объёме V_* термостата, равного объёму канала. В теплообмене же между каналом и термостатом принимает участие только та часть тепла, выделившаяся в объёме канала, которая является избыточной, по сравнению с величиной всего производимого в объёме этого канала тепла, в том случае, если бы его не существовало вообще, т.е. температура в этом объёме была бы равна температуре T_0 теплового фона. Это избыточное количество тепла равно, таким образом, $W_1(T) - W_1(T_0)$. Тепловое равновесие имеет место тогда, когда это избыточное тепло выносится за ту же единицу времени наружу в термостат. Поэтому, условие теплового равновесия записывается в виде

$$W_1(T) - W_1(T_0) = W_2(T), \quad (4)$$



Примем, что канал имеет форму цилиндра с равновесной величиной радиуса r_* .

Тогда, имеем $V_* = \pi r_*^2 d$, где d – толщина плёнки, и $S_* = 2\pi r_*^2 d$. Если параметры r_* и T таковы, что $W_1(T) > W_2(T)$, то внутри канала производится больше тепла, чем выводится из него наружу и, поэтому, с одной стороны, повышается его температура, а с другой, прогреванием приграничных с каналом участков плёнки, он расширяется, т.е. r_* увеличивается настолько, чтобы установилось равновесие. Наоборот, если $W_1(T) < W_2(T)$, то внутри канала производится тепла меньше, чем выводится наружу и, поэтому, температура канала понижается настолько, чтобы имело место равенство (4). Из уравнений (1) – (4), находим общее уравнение теплового равновесия

$$r_*^2 \cdot E^2 (\sigma(T) - \sigma(T_0)) = 2\delta^{-1} \int_{T_0}^T \kappa(\tau) d\tau. \quad (5)$$

Так как введенное понятие теплового канала обладает определённой долей условности и, в связи с этим, условными являются понятия температуры канала T и ширины его приграничного слоя δ , то положим, что T – это температура в центре температурного всплеска, который называем каналом и, в этом случае, необходимо положить δ равным $\zeta \cdot r_*$, где ζ – множитель порядка 1. При таких предположениях, уравнение (5) принимает вид

$$\frac{\zeta}{2} (r_* E)^2 (\sigma(T) - \sigma(T_0)) = \int_{T_0}^T \kappa(\tau) d\tau. \quad (6)$$

Заметим, что всегда существует тривиальное решение этого уравнения $\Theta = 0$, $T = T_0$. Если такое решение единственно, то, в случае, когда $W_2(T) > W_1(T) - W_1(T_0)$ при $T > T_0$, это означает, что выход тепла из канала превышает приход и, поэтому, в точке T_0 дальнейший нагрев канала невозможен – всякая температурная неоднородность с малым превышением Θ над окружающим фоном, с течением времени исчезает, и она не превращается в тепловой канал, который является объектом нашего изучения. В случае же, когда выполняется обратное неравенство $W_2(T) < W_1(T) - W_1(T_0)$ при $T > T_0$, тривиальное равновесное решение $\Theta = 0$ неустойчиво, и это означает, что равновесие невозможно, по причине того, что приход тепла в канал превышает его выход наружу и, с течением времени, температура в канале возрастает вплоть до температуры плавления, либо до точки эвтектики составного полупроводника. Рассмотрим случай существования, по крайней мере, двух решений уравнения (6), причём второе решение $\Theta_* = T_* - T_0$ – дополнительное к решению $\Theta = 0$ – находится, справа от температуры T_0 . Такое положение возможно, так как зависимость электропроводности от температуры имеет участок монотонного возрастания, более быстрого, чем рост теплопроводности. Рассмотрим случай, когда пространственно однородное распределение температуры устойчиво, т.е. устойчивым является решение $\Theta = 0$ и $W_2(T) > W_1(T) - W_1(T_0)$ при малых Θ . Тогда ближайшее справа к точке T_0 решение T_* уравнения (6) обязательно неустойчиво, т.е. правее этого решения имеет место обратное неравенство, $W_2(T) < W_1(T) - W_1(T_0)$. Эта неустойчивость как раз и соответствует возникновению теплового пробоя. А именно, если амплитуда затравочного температурного всплеска, который моделируем посредством теплового канала, переходит величину Θ_* , то тепловое равновесие между каналом и термостатом нарушается и этот канал инициирует тепловой пробой. Поэтому, тепловой пробой становится возможным, если сред-

няя амплитуда теплового всплеска θ_0 сравнивается с решением Θ_* , $\Theta_* \approx \theta_0$. Пусть теперь решение Θ_0 неустойчиво, т.е. $W_2(T) < W_1(T) - W_1(T_0)$ при малых значениях $\Theta > 0$. Тогда в рассматриваемой температурной точке T_0 пространственно однородное распределение температуры неустойчиво. При этом наименьшее решение $T_* > T_0$ уравнения (6) должно быть устойчивым, так как правее него выполняется неравенство $W_2(T) > W_1(T) - W_1(T_0)$. В этом случае равновесным состоянием рассматриваемой термодинамической системы является тепловой канал (или система каналов) с температурой T_* и радиусом r_* , находящийся в окружении теплового фона при температуре T_0 . В этом случае, такие каналы естественно интерпретировать как наблюдаемые на эксперименте *микроплазменные каналы*, возникающие в условиях стабилизации режима теплового пробоя. Особое значение имеет случай, когда решения T_0 и T_* совпадают, т.е. $\Theta = 0$ является двукратным решением уравнения (6) так, что в точке T_0 происходит касание графиков функций $[W_1(T) - W_1(T_0)]$ и $W_2(T)$. В этом случае, в температурной точке $T_0 = T_*$, происходит срыв в режим теплового пробоя при сколь угодно малой амплитуде тепловых всплесков (т.е. в сколь угодно чисто выращенной плёнке). При этом, наряду с уравнением (6), выполняется также условие

$$\left(\frac{dW_1(T)}{dT} \right)_{T_0} = \left(\frac{dW_2(T)}{dT} \right)_{T_0}, \quad (7)$$

что, с учётом уравнения (6), приводит к дополнительному уравнению

$$\frac{\zeta}{2} (r_* E)^2 (d\sigma(T)/dT)_{T_0} = \kappa(T_0). \quad (8)$$

Это уравнение определяет следующую связь критических значений величин r_* и T_* , соответствующие сценарию спонтанного возникновения теплового пробоя,

$$r_* = E^{-1} \left(\frac{\zeta}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{\kappa(T_*)}{\sigma'(T_*)} \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Критический радиус зависит, таким образом, обратно пропорционально от приложенного к плёнке электрического напряжения $U = E \cdot d$. Исключая, с помощью (9), критический радиус r_* из уравнения (6), находим соотношение между текущими значениями теплопроводности и электропроводности

$$\left(\int_{T_0}^{T_*} \kappa(\tau) d\tau \right)^{-1} \kappa(T_*) = (\sigma(T_*) - \sigma(T_0))^{-1} \left(\frac{d\sigma(T)}{dT} \right)_{T_*}. \quad (10)$$

Это уравнение определяет, на основе характеристик материала $\kappa(T)$, $\sigma(T)$, критическую температуру T_* , при которой тепловой пробой возникает спонтанно. Тогда, согласно формуле (9), толщина проплавленных в результате пробоя каналов также полностью определяется этими характеристиками полупроводникового материала, т.е. универсальна. Эта универсальность заключается в том, что толщина, с большой точностью, одинакова для всех пробойных каналов при фиксированной величине приложенного напряжения $E \cdot d$. Заметим, что, согласно формулам (9), (10), тепловой пробой может возникнуть при любом напряжении Ed , если средняя температура плёнки достигла

величины T_* . Рассмотрим, в качестве примера, важный частный случай. Пусть $\sigma(T) = \sigma_0 e^{\gamma T}$ [9] и

$$\kappa(T) = \kappa_0 + \kappa_1 \Theta. \quad (11)$$

Здесь используем возрастающий тип зависимости для теплопроводности $\kappa(T)$ материала. Он характерен для аморфных полупроводников [10], [11]. В частности, для аморфных соединений селена такого типа зависимости наблюдались экспериментально в [12], [13]. Найдём ненулевое решение уравнения (10) в этом случае. Так как функции, стоящие в обеих частях уравнения обращаются в нуль при $\Theta = 0$ и имеют в этой точке равные производные, а функция в левой части стремится к постоянной при $\Theta \rightarrow \infty$, то, для существования положительного решения, необходимо и достаточно, чтобы её вторая производная при $\Theta = 0$ была меньше второй производной функции в правой части. Отсюда находим условие $\gamma < \kappa_1 / \kappa_0$ существования решения. Подстановка указанных выражений для $\sigma(T)$ и $\kappa(T)$ в (10) приводит к уравнению

$$\gamma^{-1}(1 - e^{-\gamma\Theta}) = \Theta \frac{\kappa_0 + \kappa_1 \Theta / 2}{\kappa_0 + \kappa_1 \Theta},$$

где $\Theta = T_* - T_0$. Если температура T_0 меньше температуры T_* и мало от неё отличается, то необходимо найти малое решение $\Theta > 0$ этого уравнения. Раскладывая вплоть до членов Θ^2 обе части уравнения, находим

$$1 - \frac{\gamma}{2}\Theta + \frac{\gamma^2}{6}\Theta^2 = \left(1 + \frac{\kappa_1}{2\kappa_0}\Theta\right) \left(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_0}\Theta + \frac{\kappa_1^2}{\kappa_0^2}\Theta^2 - \dots\right),$$

$$\Theta = 3 \left(\frac{\kappa_1}{\kappa_0} - \gamma\right) \left(3 \frac{\kappa_1}{\kappa_0} - \gamma^2\right)^{-1}.$$

Приравнявая это решение средней величине θ_0 тепловых всплесков, найдём выражение для этой величины в том случае, когда возникает пробой. Получим теперь, из условия существования решения уравнения (10), соотношение, справедливое в общем положении при зарождении пробоя. В этом случае, достаточно ограничиться квадратичной нелинейной зависимостью $\sigma(T)$. Для нахождения этого условия, разложим обе части уравнения (10) в окрестности точки T_0 вплоть до членов квадратичных по $\Theta = T_* - T_0$, используя разложение (11) для $\kappa(T)$ и разложение

$$\sigma(T) = \sigma_0 + \sigma_1 \Theta + \frac{1}{2} \sigma_2 \Theta^2. \quad (12)$$

В результате, уравнение (10) принимает следующий вид

$$\frac{\sigma_1 + \sigma_2 \Theta / 2}{\sigma_1 + \sigma_2 \Theta} = \frac{\kappa_0 + \kappa_1 \Theta / 2}{\kappa_0 + \kappa_1 \Theta}. \quad (13)$$

Из этого соотношения вытекает условие

$$\frac{\kappa_0}{\kappa_1} = \frac{\sigma_1}{\sigma_2}, \quad (14)$$

которое можно рассматривать как уравнение для определения критической температуры T_* . С учётом этого условия, выражение (9) для критического радиуса r_* принимает вид

$$r_* = E^{-1} \left(\frac{2}{\zeta} \right)^{1/2} \left(\frac{\kappa'(T_*)}{\sigma''(T_*)} \right)^{1/2}. \quad (15)$$

Литература

1. K.W. Wagner Trans. American Inst. Electr. Engin. – 1922. – V.41. – С.288.
2. С.М. Брагин, А.К. Вальтер, Н.Н. Семёнов Теория и практика диэлектрического пробоя. – М.: Госиздат, 1929. – 280 с.
3. И.В. Грехов, Ю.Н. Серёжкин Лавинный пробой р-п-перехода в полупроводниках. – Л.: Энергия. Ленингр. отделение, 1980. – 152 с.
4. Н.В. Андреева, Ю.П. Вирченко Качественный анализ возможности эффекта теплового пробоя плёнок полупроводниковых материалов на основе теории бифуркаций// Математические модели в образовании, науке и промышленности. Международная Академия наук высшей школы. Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербург. – 2003. – С.15-17.
5. Н.В. Андреева, Ю.П. Вирченко Статистика образования мезоплазменных каналов в тонких полупроводниковых плёнках при стабилизации теплового пробоя// Письма в ЖТФ. – 2006. – Т.32. – Вып.5. – С.8-12.
6. Э.Ф. Бурцев, И.В. Грехов, Н.Н. Крюкова Локализация тока в кремниевых диодах при большой плотности прямого тока// Физика и Техника Полупроводников. – 1970. – Т.4. – Вып.10. – С.1955-1962.
7. Yu.P. Virchenko, A.A. Vodyanitskii Heat localization and formation of heat breakdown structure in semiconductor materials. I. Nonlinear model// Functional Materials. – 2001. – V.8. – № 3. – С.428-434.
8. Yu.P. Virchenko, A.A. Vodyanitskii Heat localization and formation of heat breakdown structure in semiconductor materials. II. Mathematical analysis of the model// Functional Materials. – 2002. – V.9. – № 4. – С.601-607.
9. Дж. Дирнлей, А. Стоунхем, Д. Морган Электрические явления в аморфных плёнках окислов// Успехи физических наук. – 1974. – Т.112. – Вып.1. – С.83-128.
10. Н.А. Абдуллаев, М.А. Алджанов, Э.М. Керимова Теплопроводность слоистых полупроводников GaS и GaSe// ФТТ. – 2002. – Т.44.- Вып.2. – С.213-214.
11. В.С. Оскотский, И.А. Смирнов Дефекты в кристаллах и теплопроводность. – М.: Наука, Ленинград. отделение. Л. 1972. – 160 с.
12. L. Štourač, A. Vaško, J.Srb, C.Musil, F. Štrba // Czech.J.Phys. – 1968. – B18. – P.1067.
13. L. Štourač, B. T. Kolomic, V. P. L. Šilo// Czech.J.Phys. – 1968. – B18. – P.92.

THE FORMATION OF THE HEAT CHANNELS IN SEMICONDUCTOR FILMS

Andreyeva N.V., Virchenko Yu.P.

Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia,
e-mail: N_Andreeva@bsu.edu.ru, virch@bsu.edu.ru

The simple thermodynamic theory of the thermal breakdown of thin semiconductor films that are some functional elements in the electrical circuit with constant strength is developed. On the bases of this theory, the formula of the melted channel radius and the formula of the threshold temperature of the thermal breakdown are obtained. The efficiency of these formulas is demonstrated on the example of amorphous semiconductor films.

Key words: thermal breakdown, microplasma channels, thermal conductivity, electrical conductivity, thermal instability

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ КАТИОНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ СЕЛЕКТИВНОГО СОРБЕНТА С УЧЁТОМ ВОЗМОЖНОСТИ ИХ ДЕСОРБЦИИ

Е.Р. Щукин, З.Л. Шулиманова, Н.В. Малай, Л.И. Трахтенберг

Белгородский государственный университет,
308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
127412, Москва, ИВТ РАН
e-mail: malay@bsu.edu.ru; evgrom@yandex.ru

Проведено математическое моделирование, протекающего в кинетическом режиме, процесса сорбции нескольких видов катионов из разбавленного неподвижного жидкого раствора на поверхности плоского сорбента.

Получены формулы, позволяющие оценивать зависимость поверхностной концентрации основных адсорбированных катионов от времени с учётом заполнения поверхности сорбента основными и примесными катионами и десорбции с поверхности сорбента, содержащих и не содержащих катионы адсорбционных центров.

Ключевые слова: адсорбция, десорбция

Селективные сорбенты получают, закрепляя на поверхности подложек специфические адсорбционные центры в виде сложных молекул, например, молекулы краун-эфиров, образующих стабильные комплексы с рассматриваемыми видами катионов [1,2]. Такие сорбенты имеют большое практическое значение и используются, в частности, для извлечения из водных растворов катионов радиоактивных тяжелых металлов. Поэтому исследование процессов адсорбции катионов на сорбентах с различными адсорбционными центрами и разработка модели этих процессов является важной и актуальной задачей.

Моделирование диффузионно-кинетического процесса адсорбции катионов из разбавленного неподвижного жидкого раствора на поверхности плоского сорбента было проведено в работах [2-4].

Формулы работы [2] позволяют оценивать зависимость от времени поверхностной концентрации $n_i^{(s)}$ адсорбированных катионов при концентрациях $n_i^{(s)}$ значительно меньших поверхностной концентрации N свободных адсорбированных центров. При выводе формул был учтён диффузионно-кинетический механизм адсорбции катионов. Проведённый в [2] анализ показал, что скорость сорбции существенно зависит как от характера взаимодействия катионов с поверхностью сорбента, так и от концентрации катионов в объёме раствора.

В работе [3] получены формулы, позволяющие оценивать зависимость концентрации катионов на поверхности сорбента от времени уже с учётом десорбции. При этом показано, что десорбция может привести к заметному уменьшению поверхностной концентрации катионов $n_i^{(s)}$. С помощью найденных в [3] формул показано, что, в случае малой объёмной концентрации катионов, процесс сорбции катионов из неподвижных растворов можно значительно ускорить, искусственно перемещение катионов в направлении поверхности сорбента.

Вывод формул в работе [3], как и в работе [2], был проведен при условии $n_i^{(s)} \ll N$, когда (с точностью до малых членов, пропорциональных $n_i^{(s)} / N$) оценку значений $n_i^{(s)}$ можно проводить, не учитывая влияния уже заполненных адсорбцион-

ных центров на скорость сорбции катионов на оставшейся свободной от катионов части поверхности сорбента. В связи с этим в работе [4] проведено моделирование диффузионно-кинетического процесса адсорбции двух видов катионов на поверхности сорбента с учётом влияния на скорость сорбции уже заполненных адсорбционных центров. Полученные в [4] формулы позволяют оценивать зависимость поверхностной концентрации катионов от времени с учётом заполнения поверхности сорбента катионами. При выводе формул возможность десорбции свободных адсорбционных центров и центров с катионами не учитывалась. Проведённый в [4] анализ, в частности, показал, что процесс сорбции катионов на поверхности сорбента в чисто кинетическом режиме протекает при временах t , удовлетворяющих условию $\sqrt{z_i} \ll 1$, где $z_i = h_i t / D_i$, $h_i = K_i N_0$, K_i – константа скорости образования комплекса i -го вида катиона с адсорбционным центром, N_0 – концентрация свободных адсорбционных центров на поверхности сорбента в начальный момент времени $t = 0$, D_i – коэффициент диффузии катионов. При $\sqrt{z_i} \ll 1$ значение объемной концентрации катионов $n_i^{(v)}$ у поверхности сорбента с точностью до малых членов, пропорциональных $\sqrt{z_i}$, можно считать равной концентрации катионов $n_{i0}^{(v)}$ в объёме раствора. В случае чисто кинетического режима сорбции все свободные адсорбционные центры на поверхности сорбента заполняются при $K_i n_{i0}^{(v)} t \geq 3$ ($K_i n_{i0}^{(v)} t \equiv n_{i0}^{(v)} D_i z_i / N_0 h_i$). Проведённое в [4] сравнение теоретических и экспериментальных результатов показало, что адсорбция катионов на поверхности плёнки, содержащей краун-эфир, протекает в кинетическом режиме.

На практике [3] сорбцию катионов на поверхности сорбента могут одновременно сопровождать десорбция с поверхности сорбента как адсорбционных центров с рассматриваемыми видами катионов, так и свободных адсорбционных центров. Это обстоятельство желательно учитывать при моделировании процесса сорбции.

В данной работе рассматривается модель, протекающей в чисто кинетическом режиме, адсорбции n видов катионов из неподвижного раствора на поверхности плоской пластины сорбента, содержащей адсорбционные центры одного типа. Вывод формул проводится с учётом влияния на интенсивность сорбции процесса заполнения адсорбционных центров катионами. Учтена также возможность десорбции с поверхности сорбента как свободных, так и содержащих катионы адсорбционных центров. При этом предполагается, что концентрация ионов мала настолько, что можно пренебречь взаимодействием катионов друг с другом как в растворе, так и на поверхности сорбента. Таким образом, отрицательное влияние двойного слоя на процесс адсорбции не учитывается.

Сорбция катионов протекает при $\sqrt{z_i} \ll 1$, что позволяет считать объёмную концентрацию катионов $n_i^{(v)}$ у поверхности сорбента равной концентрации катионов в растворе $n_{i0}^{(v)}$, где индекс i обозначает вид катиона (в данном случае $i = 1, 2, \dots, n$).

Скорость поглощения катионов i -го вида адсорбционными центрами на поверхности сорбента пропорциональна произведению концентрации $n_{i0}^{(v)}$ этих катионов у активной поверхности сорбента на поверхностную концентрацию $N(t)$ свободных адсорбционных центров. При этом плотность потока катионов $q_i^{(+)}$, оседающих на поверхности сорбента, можно приближенно оценивать по следующей формуле:



$$q_i^{(+)} = K_i N(t) n_{i0}^{(v)}. \quad (1)$$

Уменьшение со временем t поверхностной концентрации свободных адсорбционных центров может происходить в результате их заполнения катионами, а также отрыва от поверхности сорбента. Плотность потока свободных адсорбционных центров ξ_N , уходящих с поверхности сорбента в результате отрыва, будем считать равной

$$\xi_N = -p^{(s)} N. \quad (2)$$

При этом зависимость N от времени t описывается следующим кинетическим уравнением:

$$\frac{dN}{dt} = \xi_N - \sum_{i=1}^n q_i^{(+)}, N|_{t=0} = N_o, \quad (3)$$

где N_o – концентрация свободных адсорбционных центров на поверхности сорбента в начальный момент времени $t=0$.

Решение задачи Коши (3), проведённое с учётом выражений (1) и (2) имеет вид:

$$N = N_o \exp(-\lambda t), \quad (4)$$

где $\lambda = p^{(s)} + \sum_{i=1}^n \Delta_i$, $\Delta_i = K_i n_{i0}^{(v)}$.

На поверхности сорбента, наряду с адсорбцией катионов металла, может происходить и их десорбция. Десорбция катионов металла, что было отмечено выше, происходит главным образом в результате отрыва от поверхности сорбента сложных молекулярных комплексов, содержащих катионы. Зависимость концентрации катионов металла $n_i^{(s)}$ на поверхности сорбента от времени t найдём при плотности потока $q_i^{(-)}$ катионов металла, уходящих с поверхности сорбента за счёт десорбции, равной

$$q_i^{(-)} = -p_i n_i^{(s)}, \quad (5)$$

где p_i – кинетический коэффициент, характеризующий интенсивность десорбции.

При этом кинетика процесса сорбции катионов i -го вида описывается кинетическим уравнением:

$$\frac{dn_i^{(s)}}{dt} = q_i^{(-)} + q_i^{(+)}, n_i^{(s)}|_{t=0} = 0. \quad (6)$$

Интегрирование (6), проведённое с учётом формул (1), (4) и (5), приводит к следующим выражениям для $n_i^{(s)}$ и $n^{(s)} = \sum_{i=1}^n n_i^{(s)}$:

$$n_i^{(s)}(t) = \frac{\Delta_i}{\lambda - p_i} [\exp(-p_i t) - \exp(-\lambda t)] N_o, \quad (7)$$

$$n^{(s)}(t) = N_o \sum_{i=1}^n \frac{\Delta_i}{\lambda - p_i} [\exp(-p_i t) - \exp(-\lambda t)] \quad (8)$$

При $p^{(s)} = p_i$, получаем

$$n_i^{(s)}(t) = \left(\frac{\Delta_i}{\sum_{i=1}^n \Delta_i} \right) \left[1 - \exp\left(-t \sum_{i=1}^n \Delta_i\right) \right] N_o \exp(-p^{(s)} t), \quad (9)$$

$$n^{(s)}(t) = \left[1 - \exp\left(-t \sum_{i=1}^n \Delta_i\right) \right] N_o \exp(-p^{(s)} t). \quad (10)$$

Если $p^{(s)} = p_i = 0$, то

$$n_i^{(s)}(t) = \left(\Delta_i / \sum_{i=1}^n \Delta_i \right) \left[1 - \exp \left(-t \sum_{i=1}^n \Delta_i \right) \right] N_o, \tag{11}$$

$$n^{(s)}(t) = \left[1 - \exp \left(-t \sum_{i=1}^n \Delta_i \right) \right] N_o. \tag{12}$$

При $n = 2$ формула (11) переходит в формулу (20) работы [4].

В случае $n = 1$ формулы (7), (9), (11) принимают следующий вид:

$$n_1^{(s)} = \frac{\Delta_1}{(\lambda - p_1)} [\exp(-p_1 t) - \exp(-\lambda t)] N_o \tag{13}$$

$$n_1^{(s)} = [1 - \exp(-\Delta_1 t)] N_o \exp(-p^{(s)} t), \tag{14}$$

$$n_1^{(s)} = [1 - \exp(-\Delta_1 t)] N_o. \tag{15}$$

Если не учитывается влияние процесса заполнения адсорбционных центров на кинетику сорбции, то оценку зависимости $n_i^{(s)}$ от времени можно проводить по формуле (16):

$$n_1^{(s)} = \frac{h_i n_{io}^{(v)}}{p_i} [1 - \exp(-p_i t)], \tag{16}$$

где $h_i = K_i N_o$. При $p_i \rightarrow 0$ (отсутствие десорбции) формула (16) переходит в (17):

$$n_1^{(s)} = h_i n_{io}^{(v)} t. \tag{17}$$

Результаты экспериментов по осаждению катионов меди и свинца из водных растворов на поверхностях сорбентов, содержащих прочно закреплённые (радиационно-химический способ) и слабо закреплённые (физическая иммобилизация) молекулы краун-эфира, были проведены в работе [2]. Осаждение катионов меди Cu^{2+} в [2] происходило из водного раствора с $n_{Cu^{2+}O}^{(v)} = 5 \cdot 10^{-4}$ моль/л ($n_{Cu^{2+}O}^{(v)} = 3 \cdot 10^{17}$ см⁻³) на поверхности полимерной матрицы, с закреплёнными на ней молекулами краун-эфира 15-краун-5. Удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных результатов работы [2] по осаждению катионов Cu^{2+} в случае прочно закреплённых молекул краун-эфира было получено при $\Delta_1 = 2,06 \cdot 10^{-3}$ с⁻¹, $p_1 = p^{(s)} = 0$ и в случае слабо закреплённых при $\Delta_1 = 2,06 \cdot 10^{-3}$ с⁻¹, $p_1 = p^{(s)} = 0,07$ мин⁻¹ (см. табл.1).

В табл. 1 приведены экспериментальные и теоретические результаты по зависимости относительной концентрации $(\tilde{n}_1^{(s)}(t) = n_1^{(s)}(t) / n_1^{(s)}(t)|_{t=3\text{мин}})$ от времени t .

Таблица 1

Сравнение теоретических и экспериментальных [2] результатов по зависимости отношения $(\tilde{n}_{Cu^{2+}} = n_{Cu^{2+}}(t) / n_{Cu^{2+}}(t)|_{t=3\text{мин}})$ от времени t

	t, мин	$\tilde{n}_{Cu^{2+}}^{(s)экс.}$	$\tilde{n}_{Cu^{2+}}^{(s)теор.}$
Молекулы краун-эфира химически связаны с поверхностью сорбента, $p = 0$	3	1	1
	9	2,12	2,17
	27	3,23	3,12
Иммобилизованные молекулы краун-эфира, $p_1 = p^{(s)} = 0,07$	3	1	1
	10	1,32	1,40
	21	0,95	0,85

Оценки были проведены по формуле (14). Параметру $\Delta_1 = 2,06 \cdot 10^{-3}$ с⁻¹ соответствует значение кинетической константы $K_1 = 7 \cdot 10^{-21}$ см³ / с. Более полные эксперименты



по осаждению катионов свинца Pb^{++} из водных растворов с $\rho_{Pb^{2+}}^{(v)} = 5 \cdot 10^{-4}$ моль/л ($n_{i0}^{(v)} = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) на сшитых полиакриламидных плёнках, содержащих в качестве адсорбционных центров молекулы циклического краун-эфира 18- краун-6 были проведены в работе [4]. Концентрация краун-эфира, равномерно распределённого в объёме плёнки, составляла $5 \cdot 10^{-5} \text{ моль/см}^3$. Согласно предложенной модели катионы поглощаются только молекулами краун-эфира на поверхности плёнки. Можно предположить, что такими «поглотителями» катионов являются молекулы краун-эфира, содержащиеся в поверхностном мономолекулярном слое с толщиной $5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Это означает, что величина N_0 в нашем случае составляет в первом приближении $2 \cdot 10^{-12} \text{ моль/см}^2$ ($N_0 = 1,2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$).

Достаточно хорошее согласие экспериментальных [4] и теоретических результатов было получено при коэффициенте $\Delta_1 = 6 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, $p_1 = p^{(s)} = 0$ (см. табл. 2). Найденному параметру $\Delta_1 = 6 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ соответствуют кинетические константы $K_1 = 2 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3 / \text{с}$, $h_i = 3 \cdot 10^{-9} \text{ см/с}$ и при $t = 90 \text{ мин}$ значение переменной $\sqrt{z_1} = 6 \cdot 10^{-5}$.

Таблица 2

Сравнение теоретических и экспериментальных [4] результатов по зависимости $(\tilde{n}_{Pb^{2+}} = n_{Pb^{2+}}(t) / n_{Pb^{2+}}(t)|_{t=10 \text{ мин}})$ от времени t

t, мин	$\tilde{n}_{Pb^{2+}}^{\text{экс.}}$	$\tilde{n}_{Pb^{2+}}^{\text{теор.}} (15)$	$\tilde{n}_{Pb^{2+}}^{\text{теор.}} (17)$
10	1	1	1
30	2,07	2,18	3
90	3,28	3,18	9

Численные оценки показали, что заполнение поверхности сорбента катионами может оказать заметное влияние на скорость их адсорбции уже при отношении $n_1^{(s)} / N_0 = 0,3$ (см. табл. 3). Расчёты были проведены по формулам (15) и (17) при $\Delta_1 = 6 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$.

Таблица 3

Зависимость отношения $n_{Pb^{++}}^{(s)} / N_0$ от времени t

t, мин	$n_1^{(s)} / N_0$ формула (15)	$n_1^{(s)} / N_0$ Формула (17)
0	0	0
10	0,3023	0,36
25	0,5934	0,9
60	0,8847	
90	0,9603	
150	0,9955	

Присутствие посторонних катионов, способных занимать вакантные места на поверхности сорбента, может значительно снизить поверхностную концентрацию рассматриваемых видов катионов. Это достаточно хорошо показывают данные табл. 4, в

которой приведены зависимости отношения $n_1^{(s)}/N_o$ основных катионов с $\Delta_1 = 6 \cdot 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ от времени, адсорбируемых из раствора содержащего примесные катионы второго сорта. Оценки проведены по формуле (11) при $\Delta_2^{(1)} = 0$, $\Delta_2^{(2)} = 6 \cdot 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ и $\Delta_2^{(3)} = 1,2 \cdot 10^{-3} \text{ c}^{-1}$.

Таблица 4

**Зависимости отношения $n_1^{(s)}/N_o$ от времени t
в растворе с двумя видами катионов**

t , мин	$n_1^{(s)}/N_o$ $\Delta_2^{(1)}$	$n_1^{(s)}/N_o$ $\Delta_2^{(2)}$	$n_1^{(s)}/N_o$ $\Delta_2^{(3)}$
0	0	0	0
10	0,3023	0,2566	0,2201
25	0,5934	0,4174	0,3109
60	0,8847	0,4936	0,3328
90	0,9603	0,4992	0,3333
150	0,9955	0,4999	0,3333

Таким образом, разработана математическая модель, протекающей в кинетическом режиме на поверхности селективного сорбента, сорбции нескольких видов катионов с учётом влияния, оказываемого на процесс осаждения, заполнения поверхности сорбента катионами, а также десорбции как содержащих, так и свободных от катионов адсорбционных центров. Получены формулы, позволяющие с учётом рассмотренных механизмов, оценивать зависимость поверхностной концентрации катионов от времени. Проведенный теоретический анализ показал, что заполнение поверхности сорбента катионами может существенно снизить скорость адсорбции. Присутствие посторонних катионов может привести к существенному уменьшению концентрации основных катионов на поверхности сорбента. Результаты расчётов хорошо согласуются с экспериментом.

Литература

1. Григорьева Г.А., Волков В.И. и др. Ионный обмен. М.: Наука, 1981. С.91.
2. Трахтенберг Л.И., Герасимова Г.Н., Громов В.Ф. и др. // ЖФК. 2004. Т.78. С.696.
3. Трахтенберг Л.И., Щукин Е.Р., Герасимов Г.Н. и др. // Химическая физика. 2006.Т. 25. С.50-54.
4. Герасимов Г.Н., Щукин Е.Р., Громов В.Ф., Кожушнер М.А., Трахтенберг Л.И. // Жур. физ. химии. 2006. Т. 80. С. 1819-1824.

FEATURES OF CATIONS' KINETIC ADSORPTION ON THE SURFACE OF THE SELECTIVE SORBENT IN VIEW OF THEIR DESORPTION OPPORTUNITY

E.R. Shchukin, Z.L. Shulimanova, N.V. Malaj, L.I. Trahtenberg

Belgorod Sate University, 308007, Belgorod, St.. Student's 14,
Institute of High Temperatures, Moscow 127412
e-mail: malay@bsu.edu.ru; evgrom@yandex.ru

The mathematical modeling process of several kinds of cat ions sorption proceeding in a kinetic mode is studied. Cat ions are from the diluted motionless liquid solution on a surface of a flat sorbent.

Received formulas allow to estimate dependence of superficial concentration of the basic adsorbed cat ions on time in view of filling a surface of a sorbent by the basic as well as impurity cat ions and desorption from a sorbent surface containing and not containing of adsorption centers cat ions.

Key words: adsorption, desorption.

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПЕРЕНОСА ТЕПЛООВОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПОЛУПРОЗРАЧНОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

М.А. Сапрыкин

Белгородский государственный университет,
308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14

Исследуется процесс радиационно-кондуктивного теплообмена в полупрозрачном диэлектрике, разогретом настолько, что на перенос тепла в такой твердотельной среде оказывает существенное влияние собственное излучение среды, связанное с переходами тепловых фононов в фотоны. Строится полуфеноменологическая теория, описывающая этот процесс, основанная на уравнениях Максвелла со стохастическими источниками излучения. Корреляционная функция случайного распределения этих источников в среде предполагается зависящей от температуры феноменологическим образом. Получено самосогласованное эволюционное уравнение, описывающее эволюцию тензора энергии-импульса распространяющегося в среде теплового электромагнитного излучения.

Ключевые слова: уравнения Максвелла, перенос тепла, стохастические процессы, корреляционная функция, тензор энергии-импульса.

Введение

В технологических процессах выращивания монокристаллов методом Чохральского, возникает физическая ситуация, при которой в образце оптически полупрозрачной, диэлектрической твердотельной среды, разогретой до очень высоких температур ($\sim 1000 - 2000 \text{ K}$) возникают значительные градиенты температуры ($\sim 40 - 50 \text{ K/cm}$) [1], [2]. В этих условиях, на перенос тепла от более нагретых участков среды к менее нагретым оказывает существенное влияние радиационно-кондуктивный теплообмен, так как в типичной ситуации, материалы, на основе которых выращиваются монокристаллы, являются оптически полупрозрачными, как в видимом диапазоне света, так и в инфракрасной области спектра, то есть они обладают, в этой области спектра электромагнитного излучения, большой длиной поглощения. В связи с этим, для проведения расчётов устойчивых режимов выращивания монокристаллов, при которых в среде кристалла не возникает критических градиентов температуры, важно разработать количественную теорию, которая бы наиболее адекватно описывала возникающую физическую ситуацию [3]. При описании эволюции распределения температуры в описанной физической ситуации, в уравнение теплопроводности должен быть включён источник, который представляет собой дивергенцию потока энергии электромагнитного поля, переносящего тепло [4],[5]. В свою очередь, этот поток энергии должен вычисляться на основе распределения электромагнитного поля в среде, которое излучается самой средой. Поток энергии определяется квадратичной функцией от значений поля и, поэтому, фазовое состояние поля, вообще говоря, не играет роли в распространении его энергии. В связи с этим, возникает идея сформулировать эволюционное уравнение только для компонент тензора энергии-импульса, которое по своей математической природе должно быть волновым (гиперболическим). Этой задаче посвящена настоящая работа. Искомое уравнение должно содержать распределенные в среде источники излучения энергии. Их физический смысл состоит в том, что они описывают переход тепловой энергии в каждом физически малом объёме среды в электромагнитную энергию. По своей математической природе, они должны быть стохастическими, для того,

чтобы адекватно описывать связь излучаемой электромагнитной энергии с тепловым шумом. В следующем разделе мы даём математическое описание таких стохастических источников, а, далее, даётся вывод самого эволюционного уравнения для тензора энергии-импульса электромагнитного поля при наличии стохастических источников излучения.

Уравнения стохастического электромагнитного поля

Пусть в диэлектрической среде имеются источники стохастического электромагнитного поля. Физически, роль таких источников могут выполнять, например, атомы среды, которые постоянно излучают и поглощают фотоны с частотами, составляющими *спектр излучения* этих атомов. Квантовая природа этого излучения наделяет его стохастичностью. Более важным примером, который имеет непосредственное отношение к механизму радиационно-кондуктивного теплообмена в твердом теле, является излучение фотонов колебаниями ионного остова твёрдого тела, и частности, кристаллической решётки. В этом случае, стохастическое электромагнитное поле порождается стохастическими стационарными во времени источниками, в среднем равномерно распределёнными по пространству с характерным, присущем этому набору источников спектром излучения. Интенсивность этого излучения, физически, зависит от локальной температуры в каждом малом объёме твердотельной среды. Спектр излучения фотонов зависит от спектра колебаний остова. В частности, фотоны с длиной волны, превосходящей среднерешёточное расстояние, имеют пренебрежимо малую вероятность излучения, так как этого расстояния не превосходит длина волны тепловых фононов.

Будем характеризовать величину электрической индукции в каждом физически малом объёме среды диэлектрической проницаемостью ε , которая зависит от внутренней энергии системы атомов в этом объёме и, тем самым, она также зависит от величины температуры в нём. Поэтому, диэлектрическая проницаемость, вообще говоря, не остаётся неизменной при переходе от одной пространственной точки к другой, из-за этой температурной зависимости. Однако, мы, по-прежнему, будем пренебрегать этой пространственной зависимостью диэлектрической проницаемости ε и считать её постоянной величиной. Поэтому, далее электромагнитное поле описывается на основе комплекснозначного векторного поля

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \varepsilon^{\frac{1}{2}} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + i\mu^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1)$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{x}, t)$ – соответственно, электрическое и магнитное поля в точке \mathbf{x} в момент времени t . Поле $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ подчиняется системе уравнений

$$\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -i c_s [\nabla, \mathbf{F}](\mathbf{x}, t), \quad (2)$$

$$(\nabla, \mathbf{F})(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (3)$$

где $c_s = c / \sqrt{\varepsilon\mu}$ – групповая скорость света в рассматриваемой среде, ε и μ – диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, соответственно. На основе этих уравнений построим уравнения для изменения стохастического электромагнитного поля с источниками посредством добавления в уравнение (2) распределённых стохастических источников, которые описывают процессы излучения колебаниями твердотельной структуры. Кроме того, для возникновения стационарного режима, необходимо добавить в

это уравнение слагаемое, описывающее поглощение излучения этой структурой. Что касается поглощения, то простейший способ для описания его вклада в динамику поля состоит в добавлении в правую часть уравнения (2) слагаемого $-\gamma\mathbf{F}$, $\gamma > 0$. Такое слагаемое соответствует поглощению энергии в каждом физически малом объёме в единицу времени, равном $1/\gamma$. Указанный выбор слагаемого является простейшим из возможных. В этом случае, мы не учитываем зависимости процессов поглощения от температуры. Кроме того, при таком выборе, мы считаем, что электрическая и магнитная составляющие поглощаются с одинаковой интенсивностью. Это может обосновываться тем, что поглощаются фотоны, которые в равной степени имеют как электрическую так и магнитную составляющие. Хотя, мыслимы физические ситуации, когда такое положение не имеет места. Наконец, различные поляризации поля могут поглощаться по-разному и, поэтому, величина γ должна быть заменена на симметричную положительную матрицу γ_{jk} .

Для описания стохастического излучения, в правую часть уравнения (2), должно быть добавлено комплекснозначное случайное векторное поле, которое описывает излучаемое средой в единицу времени электромагнитное поле. Вид этого слагаемого должен обеспечивать сохранение продольности излучаемого электромагнитного поля, то есть не должен противоречить уравнению (3). Это возможно только в том случае, когда этот источник имеет следующую форму $[\nabla, \mathbf{G}](\mathbf{x}, t)$ со случайным полем $\mathbf{G}(\mathbf{x}, t)$. При этом тождественно имеет место $(\nabla, [\nabla, \mathbf{G}])(\mathbf{x}, t) = 0$ и, поэтому, решения уравнения (2) с начальными условиями, удовлетворяющими (3), также удовлетворяют этому уравнению. Для простоты, можно считать это поле вещественным, подразумевая, что вектор $\mathbf{G}(\mathbf{x}, t)$ пропорционален некоторому эффективному электрическому току и тем самым служит источником только для реальной электрической части поля $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$. Таким образом, мы приходим к следующему уравнению, описывающему эволюцию стохастического электромагнитного поля

$$\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \gamma \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -ic_s [\nabla, \mathbf{F}](\mathbf{x}, t) + [\nabla, \mathbf{G}](\mathbf{x}, t). \quad (4)$$

Тепловые источники поля

Охарактеризуем случайное поле $\mathbf{G}(\mathbf{x}, t)$. Мы будем предполагать его гауссовским с нулевой средней величиной. Следовательно, таким же свойством обладает случайное поле, $[\nabla, \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)]$ ввиду линейности указанного преобразования. Будем считать, что ковариационная матрица, полностью характеризующая поле $\mathbf{G}(\mathbf{x}, t)$, имеет следующий вид

$$\langle G_j(\mathbf{x}, t) G_k^*(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{jk} \delta(t - t') g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t).$$

Так как случайное поле $\mathbf{G}(\mathbf{x}, t)$ должно, по самому смыслу наших построений, зависеть от распределения температуры $T(\mathbf{x}, t)$ в образце среды, то это поле не является стохастически трансляционно инвариантным и стационарным во времени. Поэтому, $\langle G_j(\mathbf{x}, t) G_k^*(\mathbf{x}', t') \rangle$ – ковариационная матрица поля не зависит от разностей $(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ и $(t - t')$. Символ Кронекера δ_{jk} в приведенной формуле означает изотропию излучённого поля – равновероятность поляризаций. Конкретизируем вид ковариационной матрицы, выделив зависимость от распределения температуры. Положим,

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, t) = v(T(\mathbf{x}, t)) \mathbf{K}(\mathbf{x}, t), \quad (5)$$

где $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ – комплекснозначное (вещественное), однородное в пространстве и стационарное во времени гауссовское поле с нулевым средним,

$$\langle K_i(\mathbf{x}, t) K_j^*(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t') g(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

и, поэтому,

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = v(T(\mathbf{x}, t))v(T(\mathbf{x}', t))g(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (6)$$

Функция $v(T)$ характеризует амплитуду излучённого электромагнитного поля, которая зависит от температуры. Поле $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ будем считать изотропным. Это означает, что его корреляционная функция зависит только от модуля вектора $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = g(|\mathbf{x}|)$. Для ковариационной матрицы случайного поля $[\nabla, \mathbf{K}](\mathbf{x}, t)$ имеем следующее выражение

$$\begin{aligned} \langle [\nabla, \mathbf{K}]_i(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{K}^*]_j(\mathbf{x}', t') \rangle &= \epsilon_{ikl} \nabla_k \epsilon_{jmn} \nabla'_m \langle K_l(\mathbf{x}, t) K_n^*(\mathbf{x}', t') \rangle = \\ &= \delta(t - t') \epsilon_{ikl} \epsilon_{jml} \nabla_k \nabla'_m g(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \end{aligned}$$

где оператор ∇' обозначает оператор Гамильтона в пространстве векторов \mathbf{x}' . Используя тождество для символов ϵ и равенство $\nabla' = -\nabla$, справедливое при действии на функцию, зависящую от разности $(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, получаем

$$\langle [\nabla, \mathbf{K}]_i(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{K}^*]_j(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta(t - t') (-\delta_{ij} \Delta + \nabla_i \nabla_j) g(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (7)$$

При этом мы считаем, что поле $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ обладает почти всюду гладкими реализациями и, поэтому, корреляционная функция дважды дифференцируема. В этом случае, так как корреляционная функция $\langle [\nabla, \mathbf{K}]_j(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{K}^*]_j(\mathbf{x}', t') \rangle$ стохастически трансляционно-инвариантного случайного поля достигает максимума модуля при $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$, то $\nabla_j g(\mathbf{0}) = 0$.

Теперь мы можем подсчитать парную корреляционную функцию стохастического источника – поля $[\nabla, \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)]$,

$$\begin{aligned} \langle [\nabla, \mathbf{G}]_i(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{G}^*]_j(\mathbf{x}', t') \rangle &= \\ &= \delta(t - t') \{ v(T(\mathbf{x}, t)) v(T(\mathbf{x}', t')) [\delta_{ij} (\nabla, \nabla') - \nabla_i \nabla'_j] g(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \\ &\quad + g(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [\delta_{ij} (\nabla_k v(T(\mathbf{x}, t)), \nabla'_k v(T(\mathbf{x}', t')) - \\ &\quad - (\nabla_i v(T(\mathbf{x}, t))) (\nabla'_j v(T(\mathbf{x}', t')))] \} \equiv \delta(t - t') g_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t). \quad (8) \end{aligned}$$

Эта функция, в нашей теории, играет роль источника в эволюционном уравнении для парной корреляционной функции стохастического электромагнитного поля.

Значение корреляционной функции поля $[\nabla, \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)]$ в совпадающих точках при $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ имеет вид

$$\begin{aligned} \langle [\nabla, \mathbf{G}]_i(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{G}^*]_j(\mathbf{x}, t') \rangle &= \\ &= \delta(t - t') \{ v^2(T(\mathbf{x}, t)) (-\delta_{ij} \Delta + \nabla_i \nabla_j) g(\mathbf{0}) + \\ &\quad + \left(\delta_{ij} (\nabla_k v(T(\mathbf{x}, t)))^2 - (\nabla_i v(T(\mathbf{x}, t))) (\nabla'_j v(T(\mathbf{x}, t))) \right) g(\mathbf{0}) \}. \end{aligned}$$

В рассматриваемом нами случае изотропного поля $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$, для корреляционной функции $g(\mathbf{x})$, имеет место соотношение

$$\nabla_i \nabla_j g(\mathbf{0}) = \frac{1}{3} \Delta g(\mathbf{0}) \delta_{ij}.$$

Тогда,

$$\langle [\nabla, \mathbf{K}]_i(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{K}^*]_j(\mathbf{x}, t') \rangle = -\frac{2}{3} \delta_{ij} \delta(t - t') \Delta g(\mathbf{0})$$



и, поэтому, корреляционная функция поля имеет вид

$$\begin{aligned} & \langle [\nabla, \mathbf{G}]_i(\mathbf{x}, t) [\nabla, \mathbf{G}^*]_j(\mathbf{x}, t') \rangle = \\ & = \delta(t - t') \left\{ \delta_{ij} \left[\left(\nabla_k v(T(\mathbf{x}, t)) \right)^2 g(0) - \frac{2}{3} v^2(T(\mathbf{x}, t)) \Delta g(0) \right] - \right. \\ & \quad \left. - \left(\nabla_i v(T(\mathbf{x}, t)) \right) \left(\nabla_j v(T(\mathbf{x}', t')) \right) g(0) \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Далее, для получения замкнутой системы эволюционных уравнений для плотности тензора энергии-импульса, важно следующее предположение. Будем считать, что интенсивность затравочного источника стохастического электромагнитного поля, характеризующая максимумом корреляционной функцией – параметром $g(0)$ – очень мала, в то время как корреляционная функция этого поля обладает чрезвычайно малым радиусом корреляций. Эту корреляционную длину можно считать равной, по порядку величины, среднему межатомному расстоянию в твёрдотельной среде, в которой распространяется излучение. Малость корреляционного радиуса оценивается по отношению к характерной длине поглощения излучения в среде, которую будем считать равной по порядку величины $\alpha^{-1} \approx 0,1 \text{ см}^{-1}$. В этом случае, производные корреляционной функции $g(\mathbf{x})$ по каждой из координат радиус-вектора \mathbf{x} будут большими величинами так, что, в выражении (9) для корреляционной функции, первое слагаемое намного превосходит второе. Следовательно, при построении теории, можно ограничиться приближённым выражением

$$g_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = v(T(\mathbf{x}, t))v(T(\mathbf{x}', t'))(\delta_{ij}(\nabla, \nabla') - \nabla_i \nabla'_j)g(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + o(g(0)).$$

Так как $\nabla' = -\nabla$ в этой формуле, то, с учётом изотропии поля $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ имеем, при $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$,

$$g_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = -\frac{2}{3} \delta_{ij} v^2(T(\mathbf{x}, t)) \Delta g(0) + o(g(0)). \quad (10)$$

Это выражение положительно, так как неполюжителен оператор Лапласа.

Величину

$$\int_{t-\delta}^{t+\delta} \langle [\nabla, \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)]_j [\nabla, \mathbf{G}(\mathbf{x}, t)]_j \rangle dt' = g_{ii}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; t)$$

мы отождествим, в дальнейшем, с интенсивностью излучения энергии электромагнитного поля. Зависимость от \mathbf{x} и t этой величины полностью определяются значением мгновенного распределения температуры в точке с радиус-вектором \mathbf{x} в момент времени t . В связи с этим, выразим эту величину через локальную интенсивность излучения среды, находящейся при температуре $T(\mathbf{x}, t)$. Положим

$$g_{ii}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; t) = \left(\frac{dW(r)}{dV(r)} \right)_{r \rightarrow 0}(\mathbf{x}, t),$$

где в скобках стоит производная по мере и при этом можно считать, что $V(r)$ – объём шара с центром в точке \mathbf{x} , а $W(r)$ энергия электромагнитного поля, излучаемая в единицу времени из этого шара наружу. Примем, что $dV(r) = S(r)dr$, $dW(r) = S(r)dI(r)$, где r – радиус шара, и $I(r)$ – энергия поля, излучаемая в единицу времени с единицы площади его поверхности. Она имеет размерность $\frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \text{с}}$. Эта величина зависит от \mathbf{x} и от t , так как интенсивность излучения из малого шара радиуса r с центром в точке \mathbf{x} в момент времени t зависит от локальной температуры $T(\mathbf{x}, t)$ в этой пространственно-временной точке \mathbf{x}, t . В частности, в так называемом "сером приближении" положим $I(r) = (\alpha r) \sigma T^4(\mathbf{x}, t)$ (закон Стефана-Больцмана), где постоянная α , имеющая

размерность обратной длины, характеризует плотность распределения источников стохастического электромагнитного поля. Тогда,

$$g_{ii}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; t) = -2v^2(T(\mathbf{x}, t))\Delta g(0) = \alpha\sigma T^4(\mathbf{x}, t). \quad (11)$$

Уравнение для тензора энергии-импульса

Перейдём теперь к анализу стохастического уравнения (4) со стохастическим источником вида (10). Ввиду δ -функциональной особенности относительно разности $(t-t')$ в корреляционной функции случайного электромагнитного поля, подчиняющегося этому уравнению, набор решений уравнения (4) марковский случайный процесс со значениями в пространстве распределений электромагнитного поля $\{\mathbf{F}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \mathbf{R}^3\}$.

Линейность уравнения (4) и свойство марковости случайного процесса позволяют получить замкнутые уравнения для описания эволюции его статистических моментов. Непосредственным усреднением уравнения (4) получаем уравнение для первого момента

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \tilde{F}_j(\mathbf{x}, t) \rangle + \gamma\langle \tilde{F}_j(\mathbf{x}, t) \rangle = -ic_s[\nabla_j(\tilde{\mathbf{F}})]_j(\mathbf{x}, t).$$

Вывод уравнения для второго момента $\langle F_i(\mathbf{x}', t)F_j(\mathbf{x}'', t) \rangle$ использует существенно свойство марковости. В результате вычислений, имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle \tilde{F}_i(\mathbf{x}', t)\tilde{F}_j^*(\mathbf{x}'', t) \rangle &= -2\gamma\langle \tilde{F}_i(\mathbf{x}', t)\tilde{F}_j^*(\mathbf{x}'', t) \rangle - ic_s\langle [\nabla'_i\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{x}', t)]_i\tilde{F}_j^*(\mathbf{x}'', t) \rangle + \\ &+ ic_s\langle \tilde{F}_i(\mathbf{x}', t)[\nabla''_j\tilde{\mathbf{F}}^*(\mathbf{x}'', t)]_j \rangle + g_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t). \end{aligned}$$

В тензорных обозначениях, вводя корреляционную функцию

$$Q_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) = \langle \tilde{F}_i(\mathbf{x}', t)\tilde{F}_j^*(\mathbf{x}'', t) \rangle$$

случайного поля $F_i(\mathbf{x}, t)$, полученное уравнение запишем в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}Q_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= -2\gamma Q_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) - ic_s\epsilon_{ikl}\nabla'_k Q_{lj}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + \\ &+ ic_s\epsilon_{jkl}\nabla''_k Q_{il}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + g_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t). \end{aligned} \quad (12)$$

Разложим комплекснозначный тензор $Q_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)$ на сумму эрмитовской $Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)$ и антиэрмитовской $Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)$ частей

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= \frac{1}{2}\left(Q_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + Q_{ij}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)\right), \\ Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= \frac{1}{2}\left(Q_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) - Q_{ij}^*(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)\right), \end{aligned}$$

и запишем уравнение (12) в виде системы уравнений для этих составляющих и перейдём по непрерывности к пределу на диагональ, где точки \mathbf{x}' и \mathbf{x}'' совпадают. Для тензора $Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)$ имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= -2\gamma Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) - \\ &- \frac{i}{2}c_s\epsilon_{ikl}\left((\nabla'_k + \nabla''_k)Q_{lj}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)\right) - \frac{i}{2}c_s\epsilon_{ikl}\left((\nabla'_k + \nabla''_k)Q_{lj}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)\right) + \\ &+ \frac{i}{2}c_s\epsilon_{jkl}\left((\nabla'_k + \nabla''_k)Q_{il}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)\right) - \frac{i}{2}c_s\epsilon_{jkl}\left((\nabla'_k + \nabla''_k)Q_{il}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t)\right) + \\ &+ g_{ij}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t). \end{aligned}$$



Далее, перейдём к пределу $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}, \mathbf{x}'' \rightarrow \mathbf{x}$ воспользовавшись следующими равенствами

$$\begin{aligned} & \left[(\nabla'_k - \nabla''_k) Q_{ii}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) \right]_{\substack{\mathbf{x}' = \mathbf{x} \\ \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} = \\ & = \{ \langle (\nabla'_k F_i(\mathbf{x}', t)) F_i^*(\mathbf{x}'', t) \rangle - \langle (\nabla'_k F_i^*(\mathbf{x}', t)) F_i(\mathbf{x}'', t) \rangle - \\ & - \langle F_i(\mathbf{x}', t) (\nabla''_k F_i^*(\mathbf{x}'', t)) \rangle + \langle F_i^*(\mathbf{x}', t) (\nabla''_k F_i(\mathbf{x}'', t)) \rangle \}_{\substack{\mathbf{x}' = \mathbf{x} \\ \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} = 0. \end{aligned}$$

В результате, получим искомое уравнение для плотности тензора энергии-импульса

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}, t) = & -2\gamma Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}, t) - \frac{i}{2} c_* \epsilon_{ikl} \nabla_k Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}, t) + \\ & + \frac{i}{2} c_* \epsilon_{jkl} \nabla_k Q_{il}^{(+)}(\mathbf{x}, t) + g_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; t). \end{aligned} \quad (13)$$

Точно также получается уравнение для функции $Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t)$ на диагонали $\mathbf{x}' = \mathbf{x}'' = \mathbf{x}$. Из уравнения (12), вычитая комплексно сопряжённое ему с перестановкой индексов i и j местами, находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) = & -2\gamma Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) - \\ & - \frac{i}{2} c_* \epsilon_{ikl} \left((\nabla'_k - \nabla''_k) Q_{ij}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) \right) - \frac{i}{2} c_* \epsilon_{ikl} \left((\nabla'_k + \nabla''_k) Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) \right) + \\ & + \frac{i}{2} c_* \epsilon_{jkl} \left((\nabla'_k - \nabla''_k) Q_{il}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) \right) - \frac{i}{2} c_* \epsilon_{jkl} \left((\nabla'_k + \nabla''_k) Q_{il}^{(-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) \right). \end{aligned}$$

Перейдём к пределу $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}, \mathbf{x}'' \rightarrow \mathbf{x}$, приняв во внимание, что

$$\begin{aligned} & \left[(\nabla'_k - \nabla''_k) Q_{ii}^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) \right]_{\substack{\mathbf{x}' = \mathbf{x} \\ \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} = \\ & = \{ \langle (\nabla'_k F_i(\mathbf{x}', t)) F_i^*(\mathbf{x}'', t) \rangle + \langle (\nabla'_k F_i^*(\mathbf{x}', t)) F_i(\mathbf{x}'', t) \rangle - \\ & - \langle F_i(\mathbf{x}', t) (\nabla''_k F_i^*(\mathbf{x}'', t)) \rangle - \langle F_i^*(\mathbf{x}', t) (\nabla''_k F_i(\mathbf{x}'', t)) \rangle \}_{\substack{\mathbf{x}' = \mathbf{x} \\ \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} = 0. \end{aligned}$$

В результате, получим уравнение для тензора $Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}, t)$,

$$\frac{\partial}{\partial t} Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}, t) = -2\gamma Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}, t) - \frac{i}{2} c_* \epsilon_{ikl} \nabla_k Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}, t) - \frac{i}{2} c_* \epsilon_{jkl} \nabla_k Q_{il}^{(-)}(\mathbf{x}, t). \quad (14)$$

В этом уравнении нет источника. Поэтому, в стационарном режиме распространения электромагнитного поля, нужно считать, что

$$Q_{ij}^{(-)}(\mathbf{x}, t) = 0,$$

в то время как уравнение (13) описывает распространение энергии и импульса электромагнитного поля, излучённого тепловыми источниками.

Литература

1. L.A. Atherton, J.J. Derby, R.A. Brown, Radiative heat exchange in Czochralski crystal growth. *Journal of Crystal Growth* **84** (1987), 57-78.
2. F. Dupret, P. Nicodeme, Y. Ryckmans, Numerical method for reducing stress level in GaAs crystals. *Journal of Crystal Growth* **97** (1989), 162-172.
3. Yu.P. Virchenko, A.V. Kolesnikov. Analytic approach to the radiative conduction problem in semi-transparent media. The large optical length approximation. *Functional Materials*. **13**, No.3, P. 372-390 (2006).
4. E.M. Sparrow, R.D. Cess, Radiation heat transfer. Brooks/Cole Publishing Company, Belmont, California. (Спэрроу Э.М., Сесс Р.Д. Теплообмен излучением Л.: Энергия, Ленинградское отделение, 1972, 295 с.).
5. Петров В.А., Марченко Н.В. Перенос энергии в частично прозрачных твёрдых материалах. М: Наука 1985, 190 с.

STOCHSTIC THEORY OF HEAT ELECTROMAGNETIC IRRADIATION TRANSFER IN SEMITRANSSPARENT DIELECTRICS

M.A. Saprykin

Belgorod State University, Studencheskaya st., 14, 308007, Belgorod, Russia

The process of heat transfer in semitransparent dielectrics by the electromagnetic radiation is investigated. The dielectrics is heated so much that processes connected with the energy transfer from phonons to photons give the essential influence on the heat transfer in such a solid medium. The semi phenomenological theory describing this process which is based on Maxwell's equations containing some stochastic sources of the electromagnetic radiation is built. It is supposed that the correlation function of the probability distribution of these sources in the medium is depeded by a phenomenological way on the temperature. The self consistent equation describing the evolution of the momentum energy tensor which is connected with heat electromagnetic irradiation in the medium is obtained.

Key words: Maxwell's equations, heat transfer, stochastic processes, correlation function, momentum energy tensor

DEVELOPMENT H⁻ SOURCES FOR THE MEDICINE ACCELERATORS

P. Litvinov, V. Baturin

Institute of Applied Physics National Academy of Science of Ukraine,
40030 Sumy, Ukraine, e-mail: baturin@ipflab.sumy.ua litvinov@ipflab.sumy.ua

In the work two versions of H⁻ ion source (without additives of cesium) for a neutron capture and fast neutron therapy were considered. The results of researches of a high current pulse H⁻ source and a three-chambered discharge section for a stationary H⁻ ion source are submitted.

Key words and phrases: high current pulse source of negative ion hydrogen, neutron capture and fast neutron therapy.

Introduction

One of the important tasks in creation of the medical equipment of neutron capture and fast neutron therapy based on accelerators is the development of effective sources of negative ions. These sources, depending on the installation on which they will be used, should function either in pulse or stationary modes of operation [1].

So the installation for therapy by fast neutrons, which is based on the pulse small-sized accelerator, requires a source of H⁻ ions with a current in some mA functioning in a pulse mode with duration of a pulse from 1 up to 10 ms.

Neutron capture therapy requires use of electrostatic tandem accelerator, for which the source working in a quasi-stationary mode with a current in tens mA and duration of an exposition in tens of minutes is necessary.

In both versions to the ion source such requirements as an extremely high reliability, a large lifetime, a high readiness, simplicity of supply and service are demanded.

On the basis of the analysis of a modern condition of works on generation of negative ions and their sources it is possible to make such conclusion.

1. A high reliability and a large lifetime of the source are possible to achieve on the basis of the following concept:

1.1. Using of plasma systems with the cold cathode (without additives of cesium);

1.2. Removing all isolators using in a design of the discharge chamber outside of the direct irradiation from plasma;

1.3. Creating of designs of magnetic system of a source, in which the field of magnetic filter is generated by magnets placed outside of plasma and, hence, are not exposed to the large thermal loadings.

2. High readiness for use it is possible to reach due to inclusion into the mechanism of generation of negative ions only those elementary processes, which do not require applications of vapors of alkaline materials, and also due to exception of elements which need to be heated from a design of the discharge chamber.

At reception of necessary vacuum conditions at the input into the accelerator there is a serious problem of a reduction of a gas flow from the ion source into the area of a beamline. This problem has a principal character at limitation of sizes of evacuation systems.

Besides the efficiency of use of a concrete ion source will depend on a degree of suppression of an electron component in a flow of negative ions.

In this work the constructive schemes are submitted and physical characteristics of two versions (pulse and stationary) of a source of negative hydrogen ions developed at the Insti-

tute of Applied Physics National Academy of Science of Ukraine are given, in our opinion they in general satisfy above requirements.

Pulse source of H^- ions

The design scheme of ion source is shown in Fig.1. It is a source with volume generation of negative ions (without additives of cesium).

In it the two-step dissociative attachment of thermal electrons to vibrationally excited molecules H_2 is used [2]. The cross-section of this process quickly grows up to a significant size ($>10^{-17} \text{ cm}^2$) with growth of oscillatory quantum number at electron energy of several eV. The basic contribution to the generation of H^- ions is brought by H_2 molecules excited on levels $v = 5-11$. The formation of the vibrationally excited H_2 molecules is carried out basically by fast electrons ($E > 10 \text{ eV}$). The optimization of conditions for vibrating excitation of molecules and for the following formation of negative ions in this source is realized due to creation of discharge system generating two areas of plasma in the discharge chamber: peripheral, with rather large fraction of fast electrons and paraxial with cold electrons.

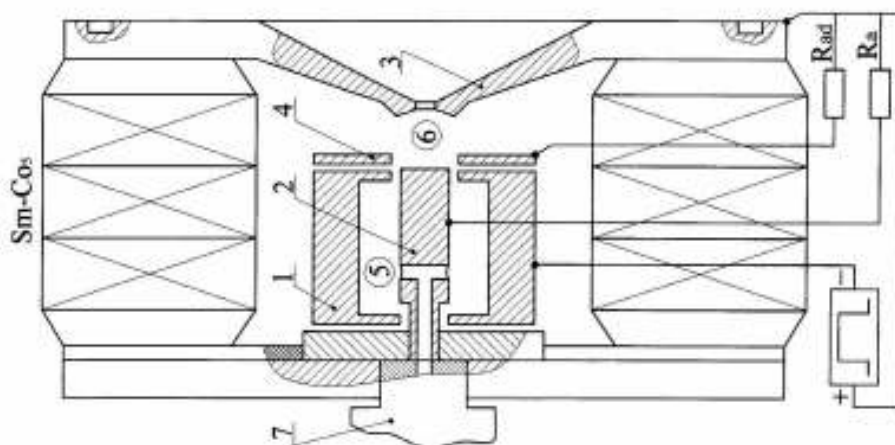


Figure 1. Schematic of ion source with a magnetron discharge in longitudinal magnetic field. 1- cathode; 2- anode; 3- plasma electrode; 4- intermediate electrode; 5- discharge chamber, 6- emission chamber; 7- gas valve.

The ion source functions as follows. The discharge chamber 5 consisting of the cathode 1 and anode 2 represents inverse gas magnetron which works on the basis of glow discharge in crossed $E \times H$ fields. The electromagnetic valve 7 supplies gas magnetron with working gas [3]. Under submission of a pulse of a voltage onto electrodes of the discharge chamber, plasma of a tubular configuration is generated. Under the certain conditions plasma penetrates through an annular slot into the emission chamber 6 and reaches the emission electrode 3. For stable current transmission, the additional electrode 4 is placed near a face part of magnetron, on which voltage higher than potential of anode is applied.

Due to formation of double layer before a narrow annular slot at magnetron output delivering fast electrons to the area of its volume, in peripheral plasma favorable conditions for vibrational excitation of molecules are created.

Internal paraxial plasma, formed by diffusion of peripheral tubular plasma across a magnetic field, will contain the vibrationally excited molecules and the enriched fraction of slow electrons, while the fraction of fast electrons does not penetrate here because of the action of magnetic filter [4]. Thus, in the internal plasma there are necessary conditions for effective realization of a finishing phase of two-step process of formation of negative ions.

It is necessary to note, that in the presented source, the magnetic field of a filter coincides with a magnetic field of discharge and, accordingly, is created by general magnetic sys-

tem. The magnetic system is executed on the basis of permanent Sm-Co5 magnets, which create a field with magnetic induction $B_z = 0,09 - 0,12\text{T}$ in the interpolar gap.

The design of discharge system provides the existence of differential pressure in its various parts caused by resistance of the convergent channels. The design of a source also allows to pump out unionized working gas from the emission chamber past by the emission aperture. At that the gas conductivity of the additional channel of pumping-out can be made much above conductivity of the emission aperture. It allows to reduce essentially the pressure of gas in the field of primary formation of ion beam and thus to reduce the neutralization of negative ions along the channel of acceleration.

Extraction of ions from a source is made from paraxial zone of the emission chamber. Suppression of accompanying electrons occurs due to their moving along a magnetic field onto the emission electrode serving as the anode of a source.

The tests of this ion source were carried out with orientation of its use in high current injector of the accelerator. The results of tests are given in the table:

Ion beam current I_i	$\sim 50\text{ mA}$
Ratio I_e/I_i	$\sim 3 - 6$
Ion beam energy	$10 - 100\text{ keV}$
Emission current density	$\sim 0,22\text{ A/cm}^2$
Impurity ions	$\sim 3\%$
Pulse duration	$\sim (10^{-4} - 10^{-3})\text{ s}$
Repetition rate of pulses	$\sim (1 - 10)\text{ s}^{-1}$
Gas flow	$3 - 10^{-2}\text{ cm}^3\text{ Pa / pulse}$
Gas flow through emission aperture	$3,7 - 10^{-3}\text{ cm}^3\text{ Pa / pulse}$
Life time of source	$\sim (1-2) 10^6\text{ pulses}$

The lifetime of a source is determined mainly by a resource of the electromagnetic valve.

From the table it is visible, that the basic parameters of the ion source in some times exceed those which are necessary for installation of therapy by fast neutrons, but there are also those which need to be improved, for example, gas flow from the source and a lifetime of the electromagnetic valve.

The gas flow from the source working at pulse duration of ion current equal to some micro seconds is basically determined by the minimal duration of a gas pulse, which can generate the gas valve and by geometry (diameter and length) of channel between the valve and discharge chamber.

We hope to solve this task with the help of the fast-acting valve, developed by us [5]. The design of this valve allows to feed working gas directly to the discharge chamber of ion source, and to exclude completely the integration of a gas pulse.

Experimental researches of gas discharge in direct current H^- source

The work of volume sources in a stationary mode is especially important, as the existing now powerful surface plasma sources, with use of vapors of alkaline metals, work in a range up to 10 ms and at the further increase of duration of a pulse there are complexities.

As a result of our thermal-physical researches we obtained a power flux $\sim 1\text{ kW/cm}^2$ (on different areas of the discharge chamber) giving the basis for development of a source of quasi-continuous action, on the basis of pulse source described above.

For use of glow discharges in the dc ion sources it is necessary to decrease gas pressure in the discharge chamber. This fact is especially important in the sources of negative ions, where negative ions are collected from all volume of their generation, therefore the mean free path of a negative ion in the emission area should be large. For minimization of negative ion neutralization it is necessary to reduce the pressure in front and behind of the emission aperture, where the velocity of negative ions is small and cross section of their neutralization in collisions with gas is large.

Decrease of gas feed into discharge system with cold cathode leads to sharp increase of ignition and burning voltage of the glow discharge. To increase both ignition voltage and working gas pressure we were able due to the auxiliary discharge at high pressure [6]. The auxiliary discharge feeds a flow of penetrating plasma into the chamber of low pressure and works as the plasma cathode, which gives primary electrons for maintenance of basic discharge here.

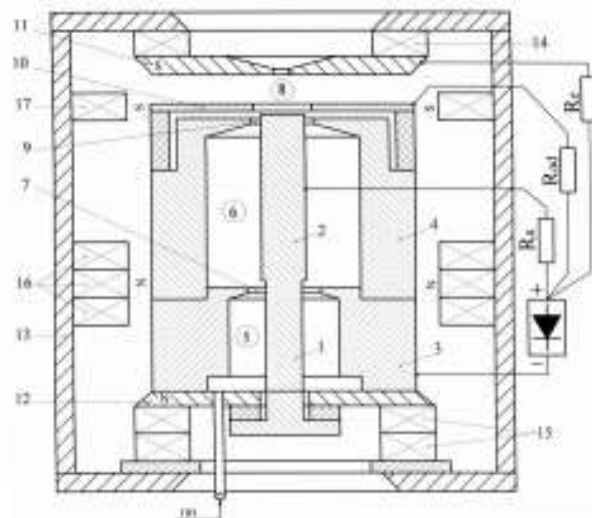


Figure 2. Schematic diagram of three-chambered discharge system. 1,2 – anode; 3,4 – cathode; 5,6 – discharge chamber; 7,9 – convergent ring channels; 8 – emission chamber; 10 – intermediate electrode; 11 – emission electrode; 12 – magnetic pole; 13 – framework; 14 – 17 – $SmCo_5$ magnets.

The design of a source is schematically shown on Fig. 2. Its discharge system consists of three chambers with a dosed supply of gas between them. The copper anode (1 and 2) and copper cathode (3 and 4) are made of two parts. Part 3 of the cathode and part 1 of the anode create the first discharge chamber 5 (with high pressure), and part 4 of the cathode and part 2 of the anode create the second discharge chamber 6 (with low pressure). Chamber 5 is connected with chamber 6 by convergent ring channel 7, and the discharge chamber 6 is connected with the third emission chamber 8 with the help of another convergent ring channel 9. Due to gas flow resistance of the convergent ring channels, the decrease of pressure in each following chamber is obtained. An additional decrease of working gas pressure due to its expansion to the large volume and due to radial differential pumping is obtained in the emission chamber 8. $SmCo_5$ magnets (14 and 15) is established between the emission electrode 11 and a magnetic pole 12. The framework 13 of the discharge system, which is a component of magnet system, has a form of six-sided box. The ~ 35 mm gaps between the longitudinal sides of the box provide the radial pumping of inter-electrode space. High-pressure chamber is supplied with the working gas through the bottom tube.

The electrode system, forming discharge chambers 5 and 6, represents two-chambered inverse gas magnetron, which works as $E \times H$ glow discharge. Both discharge chambers are connected to one power supply, as shown in Fig. 2. The voltages on the electrodes were distributed with the help of the resistive divider.

Dependence of ignition voltage U_b of magnetron as a function of gas pressure P_e in the emission chamber is shown at Fig. 3 by curve (gas flow is proportional to the pressure P_e). The maximal voltage applied was 800 V. At this voltage (800V) the discharge ignites when

pressure is $P_e \approx 1,7 \cdot 10^{-3}$ Pa, and it ignites at lower pressure with the gas flow increase. Experiment has shown, that in a range of gas pressure $P_e = (1,7 - 3) \cdot 10^{-3}$ Pa the discharge glows only in the first chamber, and at $P_e \geq 3 \cdot 10^{-3}$ Pa the discharge begins to glow in the second chamber, at ignition voltage $U_b = 560$ V (as it follows from the diagram).

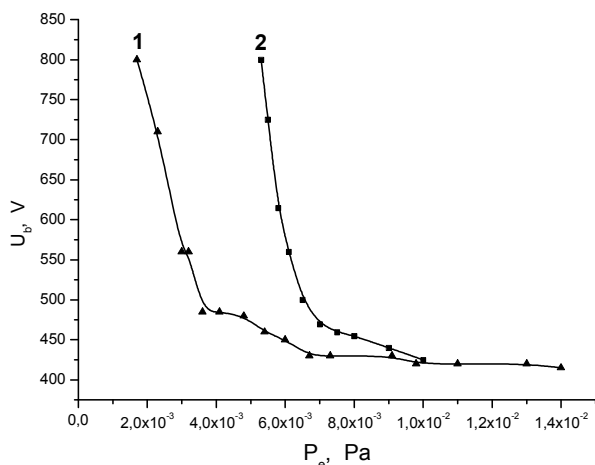


Figure 3. Dependence of ignition voltage discharge in two-chambered (1) and one-chamber (2) gas magnetron on pressure in the emission chamber.

A similar dependence for the single-chamber gas magnetron is shown in the same figure (curve 2) for comparison. In this case, chamber 5 was filled with a copper insert. The outside surface of this insert adjoined tightly to the internal surface of the cathode 3, and a ring channel with width $\Delta r \sim 0,8$ mm was left between the anode 1 and the internal surface of insert for gas delivery into the chamber 6.

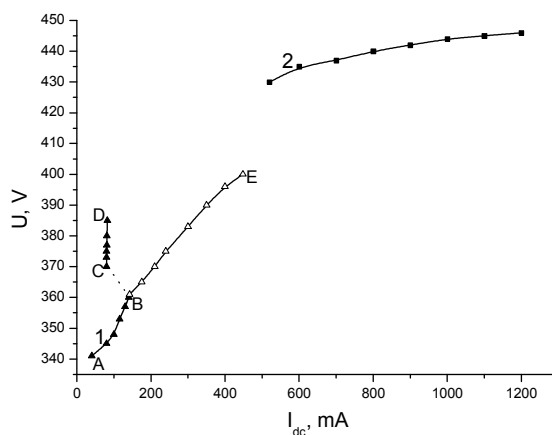


Figure 4. Volt-ampere characteristic of discharge in the gas magnetron (1) and discharge in the emission chamber (2) at $P_e = 1,5 \cdot 10^{-2}$ Pa.

The discharge ignition voltage in the chamber 6 was 560 V, and it occurs at pressure $P_e \approx 6 \cdot 10^{-3}$ Pa, two times higher as compared with that of the two-chamber magnetron.

Fig. 4 shows a volt-ampere characteristic of the magnetron discharge (curve 1) and of the discharge in the emission chamber (curve 2) at the following characteristics of the gap: $\Delta r = 1,5$ mm; $P_e = 1,5 \cdot 10^{-2}$ Pa; $\Delta l = 0,4$ mm; $l_e = 0,7$ cm. After the discharge initiation, a voltage between cathode and anode falls from value U_b to the value designated by a point A on curve 1. Further a volt-ampere characteristic corresponds to AB segment of this curve. At obtaining of the certain current (point B) a discharge initiation occurs in the emission cham-

ber, and then the dependence of a current in the anode circuit from a voltage corresponds to CD segment. When the emission electrode is disconnected, then a volt-ampere characteristic corresponds to ABE curve. The change of gas pressure in the emission chamber results in the point B shift: point B is shifted to larger currents with pressure decrease, and to smaller current with pressure increase. The dependence of a current in the circuit of the emission electrode vs voltage (after voltage breakdown in the gap) is shown by curve 2.

The carried out experiment also has shown, that after discharge ignition in the gap, the pressure P_e can be decreased down to $\sim 8 \cdot 10^{-3}$ Pa at the same discharge current and with the same stability of discharge burning. In other words, a discharge ignition occurs at a little bit higher pressure than its stable burning.

Conclusions

On the basis of the received experimental data it is possible to make the following conclusions.

1. In a pulse volume source of H⁻ ions on a base of magnetron tubular discharge with a quasi-differential pumping out of emission chamber, the optimum conditions for reception of record values of the emission density of a current were carried out.

2. The pulse source has shown the high physical-technical and operational characteristics. The ion source readiness time for use ~ 1 min. The basic construction of a source satisfies the principal requirements of the concept declared above.

3. The change of operation regime of the ion source from pulse to stationary was made. A stable ignition and burning of the charge at a rather low voltage and pressure in the emission chamber was obtained.

References

1. B.F. Baynov et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **413**, 397 (1998).
2. Yu.V. Kursanov, P.A. Litvinov, V.A. Baturin, 10th International Symposium on the Production and Neutralization of Negative Ions and Beams, Kiev, Ukraine, 2004, (<http://www.plasma.kiev.ua/events/pnnib10.html>)
3. A.J.T. Holmes, Rev. Sci. Instrum. **53**, 1517 (1982).
4. L.P. Veresov, P.A. Litvinov, Yu.P. Neustroev, E.S. Nikolaev, inventors certificate, USSR, № 4364894 (1989).
5. J.R. Hiskes, A.M. Karo, J. Appl. Phys. **56**, 1927 (1984).
6. V.A. Baturin, A.Yu. Katpenko, P.A. Litvinov, Instruments and Experimental Techniques. **43**, №3. 417 (2004).
7. P.A. Litvinov, V.A. Baturin, Technical Physics. **75**, № 4, 80 (2005)

РАЗРАБОТКА ИСТОЧНИКА ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА ДЛЯ МЕДИЦИНСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ

П.А. Литвинов, В.А. Батурин

Институт прикладной физики НАН Украины, 40030, Сумы, Украина,
e-mail: baturin@ipflab.sumy.ua litvinov@ipflab.sumy.ua

В работе представлено две версии H⁻ ионного источника (без добавок цезия) для нейтронозахватной терапии и терапии быстрыми нейтронами. Представлены результаты исследований сильноточного импульсного источника H⁻ и трех камерной разрядной ячейки для работы источника H⁻ в стационарном режиме.

Ключевые слова и фразы: сильноточный импульсный источник отрицательных ионов водорода, нейтронозахватная и терапии быстрыми нейтронами

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ Au В ПРОБАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ $(\gamma, \gamma')^m$ РЕАКЦИИ И ИНТЕГРАЛЬНЫХ СЕЧЕНИЙ

Э.Л. Купленников¹⁾, С. Н. Афанасьев¹⁾, В.В. Красильников²⁾

¹⁾Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая 1, 61108 Kharkov, Ukraine
e-mail: kupl@kipt.kharkov.ua

²⁾Белгородский Государственный Университет, ул. Победы 85, 308015 Белгород, Россия
e-mail: kras@bsu.edu.ru

Рассмотрена возможность применения ускорителя электронов (УЭ) для анализа рудных проб на золото. Результаты основаны на использовании $^{197}\text{Au}(\gamma, \gamma')^{197m}\text{Au}$ реакции, экспериментальных интегральных сечений возбуждения изомера активационными уровнями и моделирования по методу Монте-Карло (GEANT3.21).

Ключевые слова: электронный ускоритель, фотоны, неупругое рассеяние, фото-возбуждение, гамма-активационный анализ, золото, изомер, геологические пробы, концентрация, чувствительность анализа.

Введение

Золото (Au) – редкий металл. Поэтому для определения концентрации Au в геологических пробах при поисках, разведке и разработке месторождений необходимо использовать методы с максимальной чувствительностью, точностью, экономичностью и высокой производительностью. Примером успешного решения данной задачи является применение для анализа нейтронно- и гамма- активационной методик:

а) Методика, использующая $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$ реакцию. Активация образцов осуществляется резонансными нейтронами. Методика разработана и применена в работе [1]. Нейтроны получены на микротроне МТ-16 при энергии электронов $E_e = 16$ МэВ и среднем токе $I_e = 25$ мкА. Предел обнаружения Au не хуже 0.1 г/т. Время облучения $t_{\text{ит}} \sim 10$ часов и охлаждения $t_c \sim 95$ часов. Производительность метода 264 анализа в сутки.

б) Методика, использующая реакцию $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$. Активация осуществляется тепловыми нейтронами. Данная методика применена в [2]. Показано, что использование микротрона с энергией 20-24 МэВ и током $I_e = 15$ мкА обеспечивает анализ проб на содержание Au с пределом обнаружения ≥ 0.1 г/т. Чувствительность анализа падает, если в образцах много Na, Mg, Sb, As. Время $t_{\text{ит}} \sim 2$ часа и $t_c \sim 24$ часа. Производительность метода ~ 40 анализов в смену.

в) Наибольшая чувствительность нейтронно-активационного анализа $\leq 10^{-9}$ г/г достигается на ядерных реакторах. Реактор мощностью 1 МВт обеспечивает поток нейтронов $\geq 10^{13}$ см⁻²с⁻¹. При этом ~ 90 -95% потока составляют тепловые нейтроны. Такой анализ, однако, имеет ограниченное применение из-за мощного фона наведенной активности в элементах матрицы.

г) Методика, использующая реакцию $^{197}\text{Au}(\gamma, n)^{196}\text{Au}$. Активация проводится тормозными фотонами. В работе [3] данная методика задействована для определения содержания Au в рудах Украины. С этой целью использовался линейный УЭ (ЛУЭ), работающий в диапазоне энергий 16-25 МэВ, токов 0.1-1 мА и временем облучения от 1 часа до нескольких дней. Достигнут порог детектирования Au 0.03-0.1 г/т для большинства исследованных руд за исключением образцов с высоким содержанием Mn, где порог оказался 1-1.5 г/т. Масса облучаемых проб $M_{\text{пр}} \leq 500$ г. Время охлаждения ~ 5 -10 часов. Производительность метода ~ 50 анализов в смену.

д) Методика, использующая $^{197}\text{Au}(\gamma, \gamma')^{197\text{m}}\text{Au}$ реакцию (период полураспада $^{197\text{m}}\text{Au}$ $T_{1/2} = 7.73$ с; энергия изомерного состояния 409.1 кэВ, регистрируемая γ - линия спектра $E_\gamma = 279.0$ кэВ). Активация образцов осуществляется тормозными фотонами. Ниже даны примеры наиболее информативных исследований. В работе [4] анализы выполнены на ЛУЭ при $E_e = 4.2$ МэВ и $I_e = 50-65$ мкА. Время $t_{\text{irr}} \sim 47$ с. Пороговая чувствительность определения содержания золота, рассчитанная для случая 99.7% доверительной вероятности, 30 г/т. Практическое применение метода рассмотрено в [5], где применен микротрон МТ-13. Энергия $E_e = 6$ МэВ, $I_e = 80$ мкА, $M_{\text{пр}} = 50-130$ г. Время t_{irr} , t_c и время измерения $t_m - 30, 3$ и 20 с соответственно. Порог детектирования Au ~ 1 г/т. В работе [6] анализ проведен на микротроне МТ-16 при энергии $E_e = 9$ МэВ и $I_e = 30$ мкА. Вес образцов 100-200 г. Время t_{irr} , t_c и $t_m - 18, 3$ и 18 с соответственно. Пороговая чувствительность определения золота в пробах руд кварц-карбонатного состава, руд с большим содержанием сульфидных минералов и руд с повышенным содержанием естественных радиоактивных элементов получена 3, 7 и 5 г/т соответственно.

На базе перечисленных выше лабораторных исследований создан действующий промышленный фотоядерный аналитический комплекс «Аура» [7]. Применение ЛУЭ с энергией 8 МэВ, навески 500 г, состоящей из дробленой породы с диаметром частиц ~ 1 мм, времени t_{irr} , t_c и $t_m - 15, 3$ и 15 с соответственно, двух однокристалльных γ -спектрометров NaJ(Tl) диаметром 150 и высотой 100 мм обеспечивает предел определения золота 0.2-0.5 г/т в рудах различного состава. Проектная производительность комплекса 400 образцов в смену.

В 1992 г. на тормозном пучке ЛУЭ S-DALINAC проведены детальные исследования короткоживущих изомеров, включая Au, в интервале граничных энергий тормозного спектра $E_{\gamma\text{max}} = 2-7$ МэВ [8]. В результате найдены 4 активационных уровня, дающих наибольший вклад в заселение изомера, их энергии возбуждения E_j , а также интегральные сечения возбуждения изомера через j -ый активационный уровень. Оказалось, что величины интегральных сечений $\geq 10^{-26}$ см²кэВ, что в 1000 раз больше, чем в большинстве исследованных ранее $(\gamma, \gamma')^m$ реакций. Полученные результаты давали возможность оценить количество активированных ядер $^{197\text{m}}\text{Au}$, которые образовались в результате облучения исследуемого материала, по новой методике.

Проведенный нами анализ результатов [4-7] показал, что наблюдается заметный разброс в выборе основных параметров анализа: энергия электронов $E_e = 4.2-9$ МэВ, масса проб $M_{\text{пр}} = 10-500$ г, время облучения $t_{\text{irr}} = 2T_{1/2}-6T_{1/2}$ и т.д. Поэтому в настоящей работе рассмотрена возможность применения УЭ для экспресс-анализа природных и технологических материалов на наличие золота с учетом результатов экспериментальных и теоретических исследований, данных о числе и энергии активационных уровней, интегральных сечениях возбуждения изомера $^{197\text{m}}\text{Au}$ через активационные уровни, а также достижений в области оптимизации.

1. Выбор рабочих параметров

При определении оптимальных условий проведения активационного анализа важную роль играет селективность, т.е. способность анализа выделять ядра искомого элемента на фоне остальных ядер, присутствующих в образце. На Рис. 1 [9] показана зависимость удельной селективности обнаружения золота в кварцевой породе от граничной энергии тормозного спектра $E_{\gamma\text{max}}$ для четырех значений времени облучения. Кривые 1-4 соответствуют $t_{\text{irr}} = T_{1/2}, 3T_{1/2}, 5T_{1/2}, 7T_{1/2}$.

Видно, что наибольшая удельная селективность наблюдается при $E_{\gamma\text{max}} = 8.5$ МэВ для любых t_{irr} и растет с уменьшением времени активации. Из последнего утверждения вовсе не следует, что наилучшие условия для анализа будут обеспечены малым t_{irr} .

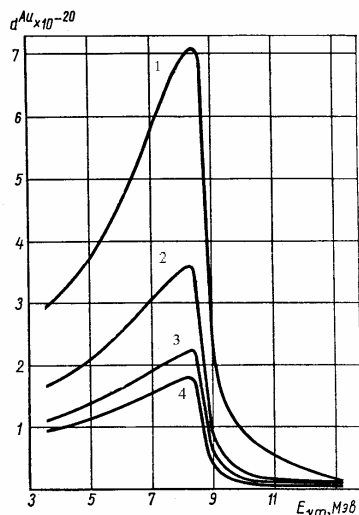


Рис. 1. Зависимость удельной селективности Au от $E_{\gamma\max}$

Выбор времени облучения определяется в конечном счете чувствительностью анализа. Кроме того, в [9] показано, что поскольку $T_{1/2}$ Au меньше периодов полураспада основных мешающих элементов, время доставки пробы к γ -спектрометру необходимо уменьшать до минимума. Поэтому в данной работе: 1) за основу взята энергия $E_e = 8.5$ МэВ. Однако, т.к. электроны при прохождении выходной фольги УЭ и слоя воды теряют ~ 200 кэВ, для дальнейших оценок начальная энергия пучка электронов увеличена до 8.7 МэВ; 2) время $t_{\text{пр}}$, t_c и t_m выбрано исходя из опыта работ [1-4] 16, 3 и 19 с соответственно. Данный режим работы позволяет с учетом технологических перерывов облучать и исследовать ≥ 300 проб в смену. Сразу же отметим, что температура пробы за одну экспозицию при среднем токе 1 мА (диаметр пучка на конверторе 5 мм) возрастает примерно на 20°C относительно начального значения, т.е. дополнительное охлаждение образца не требуется.

Предлагаемое размещение активационного оборудования на выходе УЭ представлено на рис. 2. Обозначения на рисунке: 1, 4 – фольги из Ti по 50 мкм каждая; 2 – два слоя воды по 1.5 мм; 3 – конвертор из Au; 5 – слой воздуха 5 мм; 6 – золотосодержащая смесь; 7 – Al контейнер, 8 – крышка из полиэтилена.

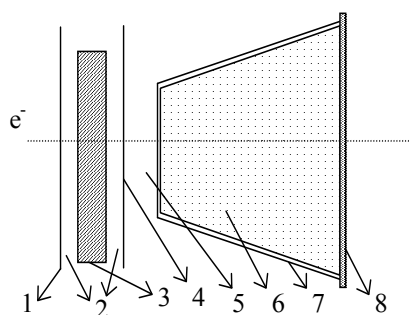


Рис. 2. Блок-схема активационного оборудования

В связи с наибольшим порогом эмиссии нейтрона по сравнению с традиционными металлами Ta и W в качестве конвертора используется золото. Оптимальная толщина диска 1 мм определена по результатам математического моделирования. Контейнер многоразового использования для дробленой массы исследуемого материала, представляет собой усеченный прямой конус из Al с толщиной стенок 1 мм и полиэтиленовой крышки толщиной 1 мм. Высота конуса $h = 40$ мм, малый r и большой радиус R равны 20 и 35 мм соответственно. Оптимальная величина малого (большого) радиуса определена на основе модельного

расчета (диаметра кристалла γ -спектрометра), а высота конуса – в предположении, что средняя длина свободного пробега фотона $L = 1/\mu_l$, где μ_l – линейный коэффициент ослабления γ -излучения в веществе, с энергией 279.0 кэВ больше толщины золотосодержащей смеси в контейнере.

Доставка активированного образца к γ -спектрометру может быть решена тремя способами. 1. Использовать пневмотранспортную систему. 2. Применить прецизионный транспортер, который доставит образец к детектору и одновременно установит очередную пробу на место облучения. 3. Сбрасывать контейнер в вертикальный канал (см. описание в [7]), ведущий к блоку измерения. Отключение УЭ во время охлаждения и измерения даст возможность убрать основной γ -фон элементов матрицы образца и электромагнитные помехи во время регистрации спектра остаточной активности.

2. Выход реакции

В работе предполагалось, что золото находится в породе, состоящей из двуокиси кремния SiO_2 . Это связано с тем, что практически любой геологический образец содержит в своем составе кремний и кислород. Окиси и силикаты Na, Mg, Al, Ca, Fe, J составляют почти 99% руд земной коры [3].

Для вышеописанных параметров внутренний объем контейнера равен 97.39 см^3 . При плотности измельченного образца 0.8 г/см^3 (средняя плотность золотосодержащей смеси [2]), вес содержимого контейнера 77.9 г , а масса золота (при условии его содержания в смеси 1 г/т) $0.779 \times 10^{-4} \text{ г}$, что соответствует числу ядер золота на см^2 $N_{\text{Au}}^{\text{Au}} = N_T = 0.979 \times 10^{16}$.

Число активированных ядер N_f находилось, используя выражение для нормированного выхода реакции $(\gamma, \gamma')^m$ [10]:

$$Y(E_{\gamma \text{ max}}) = \frac{N_f}{N_T N_e} = \sum_j (\sigma\Gamma)_{iso}^j N(E_j, E_{\gamma \text{ max}}), \quad (1)$$

где N_e – число электронов, прошедших через конвертор, $(\sigma\Gamma)_{iso}^j$ – интегральное сечение возбуждения изомера через промежуточный уровень j , $N(E_j, E_{\gamma \text{ max}})$ – спектральная интенсивность фотонного поля в единичном интервале энергий для $E_{\gamma \text{ max}}$. Величина $N(E_j, E_{\gamma \text{ max}})$ рассчитывалась для индивидуальной геометрии облучения в коде GEANT3.21. Оценка N_f выполнена со статистикой 10^6 , интервалом группирования 10 кэВ и экспериментальными интегральными сечениями [8], приведенными в табл. Согласно (1) число возбужденных ядер в изучаемой реакции $^{197}\text{Au}(\gamma, \gamma')^{197m}\text{Au}$ равно 7822.

Таблица

Активационные уровни
и интегральные сечения.

$E_j, \text{ МэВ}$	$(\sigma\Gamma)_{iso}^j, (10^{-29} \text{ см}^2 \text{ кэВ})$
1.7 ± 0.3	70 ± 30
2.5 ± 0.1	500 ± 50
3.2 ± 0.1	4500 ± 500
4.2 ± 0.2	20000 ± 4000

3. Эффективность системы

Для оценки числа γ -квантов с $E_{\gamma} = 279.0 \text{ кэВ}$, которые реально будут зарегистрированы γ -спектрометром, необходимо ввести поправки на наложение импульсов, просчеты и эффективность системы. В качестве детектирующей системы рассматривался спектрометрический блок 6931-20 с блоком БДЭГ2-39 и кристаллом NaI(Tl) $150 \times 100 \text{ мм}$.

В случае, когда учитываются только события с полным поглощением энергии, полная эффективность равна [11]:

$$\varepsilon_{\Pi} = \varepsilon_{\text{ГЕОМ}} \varepsilon_{\text{ПОГЛ}} \varepsilon_{\text{ОБР}} \varepsilon_{\text{СОБ}}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{\text{ГЕОМ}}$ – доля от полного числа фотонов, вылетающих в телесный угол 4π , попадающих на детектор. $\varepsilon_{\text{ГЕОМ}}$ – получена путем математического моделирования. Поверхность NaI(Tl) относительно поверхности пробы находилась на расстоянии 3 мм . Согласно расчета, на кристалл диаметром 150 мм попадает 34.7% γ -квантов с $E_{\gamma} = 279.0 \text{ кэВ}$, т.е. $\varepsilon_{\text{ГЕОМ}} = 0.347$.

$\varepsilon_{\text{ПОГЛ}}$ – учитывает влияние промежуточных материалов, которые поглощают часть излучения перед тем, как фотоны попадут на детектор. Математический вид коэффициента:

$$\varepsilon_{\text{ПОГЛ}} = \exp\left[-\sum \mu_i(E_{\gamma}) \rho_i x_i\right], \quad (3)$$

где μ_i , ρ_i и x_i – массовый коэффициент поглощения, плотность и толщина i -го промежуточного материала.

Чтобы попасть на детектор, фотон с энергией 279.0 кэВ должен пройти 1 мм полиэтилена, слой воздуха 1 мм и Al фольгу толщиной 1 мм . Массовые коэффициенты поглощения и плотность элементов взяты в [12,13]. В результате $\varepsilon_{\text{ПОГЛ}} = 0.96$.

$\varepsilon_{\text{ОБР}}$ – доля γ -квантов, излученных самим образцом, реально покидающих исследуемый материал. Согласно [11]:

$$\varepsilon_{OBR} = \frac{1 - \exp[-(\mu\rho x)]}{(\mu\rho x)}, \quad (4)$$

где μ , ρ и x – массовый коэффициент поглощения, плотность и толщина материала.

В данной работе считается, что смесь элемента, испускающего γ -излучение, с элементами матрицы образца, достаточно равномерна и однородна по составу и плотности. Кроме того, частицы, испускающие фотоны, малы и поэтому самоослабление внутри отдельных частиц пренебрежимо мало. Эти требования гарантируют, что линейный коэффициент ослабления имеет одно значение в достаточно большом диапазоне и его можно использовать для количественного расчета. Оценка ε_{OBR} проведена с массовым коэффициентом поглощения и плотностью [12,13] для химического соединения SiO_2 . Величина $\varepsilon_{OBR} = 0.72$.

ε_{COB} – вероятность того, что γ -квант, который попадает в детектор, даст импульс в пик полного поглощения. Простейшим образом эту эффективность можно получить из стандартной формулы поглощения, которая не учитывает тот факт, что пик полного поглощения может также содержать события многократного комптоновского рассеяния:

$$\varepsilon_{COB} = 1 - \exp(-\mu\rho x), \quad (5)$$

где μ – массовый коэффициент ослабления, ρ (x)- плотность (толщина) чувствительного материала детектора.

Массовый коэффициент поглощения рассчитан для химического соединения NaJ, поскольку примесь Tl в сцинтилляционном кристалле NaJ(Tl) $\sim 0.1\%$ и его вклад в величину μ пренебрежимо мал. Плотность NaJ 3.67 г/см^3 взята в [14]. В результате $\varepsilon_{COB} = 0.99$.

Таким образом полная эффективность детектирующей системы $\varepsilon_{II} = 0.237$. Поправки на наложение импульсов и просчеты не учитывались.

4. Обсуждение результатов

Известное количество активированных ядер N_f позволяет оценить число реальных фотонов в площади фотопика S_γ , которые будут зарегистрированы γ -спектрометром. Для этого необходимо ввести [9, 14] поправки, учитывающие распад ядер за время облучения $(1 - e^{-\lambda_{irr}}) = 0.76$, охлаждения $e^{-\lambda_c} = 0.76$, измерения $(1 - e^{-\lambda_m}) = 0.82$, поправку, связанную с интенсивностью γ -линии $I_\gamma = 0.71$, полную эффективность детектора $\varepsilon_{II} = 0.237$, а также зависимость от постоянной распада $\lambda = 0.0897$. В результате $S_\gamma \sim 7000$.

Таким образом, при энергии электронов 8.7 МэВ и среднем токе 1 мА количество фотонов с энергией 279.0 кэВ, которое должен в идеальном случае зарегистрировать детектор после облучения пробы с содержанием Au 1 ppm, ~ 7000 , а при концентрации 0.1 г/т $S_\gamma \sim 700$. Кроме того, расчеты свидетельствуют о возможности надежного определения минимальной концентрация золота для промышленного сырья $\sim 1 \text{ г/т}$ [7] при снижении тока до величины 50 мкА ($S_\gamma \sim 350$). Полученные результаты согласуются с данными работ [6,7].

Чувствительность анализа может быть улучшена, если увеличить массу пробы до $\sim 500 \text{ г}$, использовать два однокристалльных γ -спектрометра NaJ(Tl) или применять полупроводниковые γ -детектора из сверхчистого германия с большим чувствительным объемом.

Выводы

Представленные результаты основаны на использовании экспериментальных интегральных сечений возбуждения изомера золота через активационные уровни и мате-

матического моделирования по методу Монте-Карло (код GEANT3.21). Показано, что предложенный метод оценки выхода ядер ^{197m}Au для обнаружения золота в природных и технологических материалах, дает разумные результаты, согласующиеся с экспериментальными данными, и может быть использован для практического применения.

Литература

1. Белов, А.Г. Методика определения содержания золота в геологических образцах с использованием резонансных нейтронов [Текст] / А.Г. Белов и др. // Препринт ОИЯИ 18-80-841. Дубна. 9 с.
2. Зузаан, П. Методика определения золота в золотосодержащих образцах с использованием замедленных нейтронов [Текст] / П. Зузаан, Б. Отгоолой, З. Дамдинсурен // Письма в ЭЧАЯ. 2005. Т. 2. № 6(129). С. 58-63.
3. Dikiy, N.P. Use of accelerators in geology, medicine, isotopes production and atomic-power energetics [Текст] / N.P. Dikiy, A.N. Dovbnya, N.A. Skakun et al. // Problems of Atomic Science and Technology. 2001. № 1. Series: Nucl. Phys. Invest. (37). P. 26-35.
4. Аббосов, О. Гамма- и нейтронно-активационный анализ с применением ускорителя электронов на 4,2 МэВ [Текст] / О. Аббосов, С. Кодир, Л.П. Старчик // Сб. Ядернофизические методы анализа веществ. 1971. М. Атомиздат. С. 244-250.
5. Берзин, А.К. Практические возможности применения реакции неупругого рассеяния γ - квантов для элементного анализа пород и руд. [Текст] / А.К. Берзин, Ю.В. Груздев, В.В. Сулин // Сб. Ядернофизические методы анализа веществ. 1971. М. Атомиздат. С. 236-244.
6. Капица, С.И. О применении микротрона для экспрессного γ -активационного анализа рудных проб на золото [Текст] / С.И. Капица, Ю.Т. Мартынов, В.В. Сулин, Ю.М. Ципенюк // Атомная Энергия. 1973. Т. 34. Вып. 3. С. 199-200.
7. Бурмистренко, Ю.Н. Фотоядерный анализ состава вещества. [Текст] / Ю.Н. Бурмистренко // 1986. М. Энергоатомиздат. 200с.
8. Collins, C.V. Common threshold and role of deformations in the photoexcitation of isomers [Текст] / C.V. Collins, J.J. Carroll, K.N. Taylor et al. // Phys. Rev. C. 1992. V. 46. N. 3. P. 952-960.
9. Давыдов, М.Г. Селективность γ -активационного анализа [Текст] / М.Г. Давыдов, В.А. Щербаченко // Атомная Энергия. 1969. Т. 27. Вып. 3. С.205-208.
10. Shevchenko, O.S. Excitation of isomer in $^{115}\text{In}(\gamma,\gamma')^{115m}\text{In}$ reaction [Текст] / O.S. Shevchenko, A.N. Dovbnja, E.L. Kuplennikov et al. // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Nuclear Physics Investigation. 2005. 6(45). P. 30-34.
11. Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials. Edited by D. Reilly, N Ensslin, H. Smith and S. Kreiner, 1991. 436 p.
12. О.Ф. Немец, Ю.В. Гофман Справочник по ядерной физике. Киев. Наукова Думка.1975. 415 с.
13. Eidelman, S. Particle Physics booklet. [Текст] / S. Eidelman et al. // Phys. Lett. B. V.592. No 1. 320 p.
14. Yhiep, T.D. Activation method for measurement of bremsstrahlung photon flux produced by electron accelerator [Текст] / T.D. Yhiep, T.T. An, T.D. Phu et al. // Письма в ЭЧАЯ. 2005. Т. 2. № 4. С. 53-59.

FINDING CONTENT OF Au IN SAMPLES BY $(\gamma,\gamma')^m$ REACTIONS AND INTEGRAL SECTIONS

E.D. Kuplennikov¹⁾, S.N. Afanas'ev¹⁾, V.V. Krasil'nikov²⁾

¹⁾National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology",
Akademicheskaya St. 1, 61108 Kharkov, Ukraine
e-mail: kupl@kipt.kharkov.ua

²⁾Belgorod State University, Pobeda St. 85, 308015 Belgorod, Russian
e-mail: kras@bsu.edu.ru

In this work, it is considered the possibility of applying an electron accelerator to control gold test in ore samples. The results are based on the $^{197}\text{Au}(\gamma,\gamma')^{197m}\text{Au}$ reaction, experimental integral sections of isomer excitation by activation levels and Monte-Carlo modeling (GEANT3.21).

Key words: electron accelerator, photons, inelastic scattering, photoexcitation, gamma-activation analysis, gold, isomer, geological sample, concentration, analysis sensibility.

ОЦЕНКА ЭЛЕКТРОННОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ В ПЛАЗМЕ ДУГИ ДВУХСТРУЙНОГО ПЛАЗМАТРОНА

Е.А. Тагильцева¹⁾, А.П. Тагильцев²⁾, Б.К. Зуев¹⁾

¹⁾ Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991, г. Москва, ул. Косыгина 19

²⁾ Государственный научно-исследовательский и проектный институт
редкометаллической промышленности "ГИРЕДМЕТ"
119017, г. Москва, Б. Толмачевский пер., 5.

В предположении о наличии в плазме двухструйного дугового плазматрона локального термодинамического равновесия (ЛТР) экспериментально определена концентрация электронов по относительной интенсивности ионной и атомной линий элементов с высоким потенциалом ионизации и уравнению Саха. Получены значения электронной концентрации $1 \cdot 10^{14} - 3 \cdot 10^{16}$. Показано, что объяснить наблюдаемые экспериментальные закономерности поведения ионных и атомных линий в аргоновой плазме двухструйного плазматрона можно только невыполнением ЛТР и высокой степенью ионизации элементов производимую метастабильными атомами аргона.

Ключевые слова: плазма, аргон, плазматрон, уравнение Саха.

Введение

Проблема определения элементного состава вещества была, есть и, наверное, всегда будет актуальной. Эта задача решается при поисках полезных ископаемых в геологии, при переработке минерального сырья в горнодобывающей промышленности и на различных предприятиях химического и металлургического профиля. Охрана окружающей среды требует получения информации о нахождении в природных объектах и промышленных продуктах присутствия вредных для нас веществ, прежде всего тяжелых металлов.

Среди различных физических и химических методов контроля состава вещества особое место занимает атомно-эмиссионный спектральный анализ, позволяющий одновременно определять широкий круг элементов с необходимой чувствительностью, точностью и правильностью.

Источник возбуждения спектров

Основным звеном атомно-эмиссионного метода анализа является источник возбуждения спектров. До сих пор в аналитических лабораториях используются традиционные пламя, дуга, искра. Последние десятилетия широкое распространение получили плазматроны, особенно плазматроны индуктивно-связанной плазмы. Единственным, пожалуй, ограничением этого источника возбуждения спектров является необходимость перевода анализируемой пробы в раствор.

Двухструйный дуговой плазматрон, предложенный Энгельштом [1] и доработанный Тагильцевым [2] используется в качестве источника возбуждения спектров порошковых проб и растворов. Кроме низких пределов обнаружения к неоспоримым достоинствам этого плазматрона относят ослабленное влияние элементного и минералогического состава проб на результаты анализа, которое отмечают многие авторы [3,4,5]. Этот факт теперь не вызывает сомнения, но должного объяснения в работах пока не было.

Постановка задачи

Температура и электронная концентрация в плазме источника возбуждения спектров определяют величину интенсивности аналитической линии, по которой опреде-

ляется содержание элемента в пробе. Практика показывает, что основной причиной влияния валового состава проб на результаты анализа – это присутствие в анализируемых пробах легкоионизируемых элементов, являющихся поставщиками электронов.

В работах [6,7] исследовалась зависимость интенсивности аналитических линий от присутствия в пробах легкоионизируемой примеси при возбуждении спектров в двухструйном плазматроне. Показано, что интенсивность ионных линий практически не зависит от присутствия в исследуемых пробах 25% NaCl. Интенсивность атомных линий возрастает с уменьшением потенциала ионизации определяемого элемента.

В работе [8,9] приводятся результаты измерения локальных температур в потоке плазмы двухструйного дугового плазматрона. Показано, что в месте слияния струй плазмы температура 8000 К и убывает плавно по потоку. Введение в плазму больших количеств легкоионизируемой примеси (Na 25%) приводит к незначительному снижению температуры ~700°К только в месте слияния струй. Далее по потоку температура плазмы практически не реагирует на вводимую легкоионизируемую примесь.

Только постоянством температуры, очевидно, невозможно объяснить отсутствие влияния легкоионизируемой примеси, являющейся поставщиком электронов, на интенсивность ионных линий определяемых элементов.

Необходима информация о концентрации электронов в плазме двухструйного дугового плазматрона. Поэтому поставлена задача – экспериментально оценить электронную концентрацию в плазме двухструйного плазматрона при введении разных по валовому составу проб.

Рабочая формула

Известно, интенсивность спектральных линий определяется выражением

$$I = h\nu_{qp} n_q A_{qp} \quad (1)$$

где h – постоянная Планка, ν_{qp} – частота перехода с возбужденного уровня q на p -уровень, A_{qp} – вероятность этого перехода, n_q – концентрация атомов в возбужденном q -состоянии.

Концентрация атомов в возбужденных состояниях описывается формулой Больцмана.

$$n_q = n_{a(i)} \left(\frac{g_q}{Z} \right) \exp\left(-\frac{E_q}{kT}\right) \quad (2)$$

здесь $n_{a(i)}$ – концентрация нейтральных атомов (или ионов) данного элемента во всех возможных энергетических состояниях, E_q – энергия возбужденного состояния q , g_q – статистический вес состояния q , Z – сумма по состояниям, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.

Если энергию E_q выразить в электронвольтах, то выражение (2) можно записать в удобной для расчетов форме

$$n_q = n_{a(i)} \left(\frac{g_q}{Z} \right) \cdot 10^{-\frac{5040}{T} E_q} \quad (3)$$

где E_q – энергия уровня q в электронвольтах.

Сумма по состояниям Z определяется системой энергетических уровней атома (иона) и зависит от температуры плазмы

$$Z_{a(i)} = \sum_{q=0}^j g_q \exp\left(-\frac{E_q}{kT}\right) \quad (4)$$

где g_q – статистический вес состояний атома (или иона) с энергией E_q

В работе [10] показана возможность аппроксимировать зависимость Z от T в форме

$$Z = Z' \exp\left(-\frac{E'}{kT}\right), \quad (5)$$



где Z и E' – постоянные, характерные для атома (иона) данного элемента.

Если E' выразить в электронвольтах и обозначить через ξ , то

$$Z = Z' \cdot 10^{-\frac{5040}{T} \xi} \quad (6)$$

Подставив полученные выражения для Z в формулу (3), получим

$$n_q = n_{a(i)} \frac{E_i}{Z} \cdot 10^{-\frac{5040}{T} (E_q - E_i)} \quad (7)$$

При условии полной диссоциации молекул, концентрации атомов и ионов элемента зависят от степени ионизации x и связаны с общей концентрацией n его в пробе следующими соотношениями.

$$n_a = (1-x) \cdot n \quad (8)$$

$$n_i = x \cdot n \quad (9)$$

$$x = \frac{n_i}{n_a + n_i}$$

С учетом (8) и (9) получим выражения для интенсивности атомной и ионной линии

$$I_a = h\nu_a \frac{A_{sp} E_a}{Z_a} (1-x) \cdot n \cdot 10^{-\frac{5040}{T} E_a} \quad (10)$$

$$I_i = h\nu_i \frac{A_{sp} E_i}{Z_i} \cdot x \cdot n \cdot 10^{-\frac{5040}{T} E_i} \quad (11)$$

Степень ионизации x элемента определяется равновесием между концентрацией его нейтральных атомов n_a , ионов n_i и электронов n_e в плазме.

$$n_a \rightleftharpoons n_i + n_e$$

Константа ионизационного равновесия описывается известным соотношением Саха.

$$\frac{n_i n_e}{n_a} = S_n(T) = \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{2Z_i}{Z_a} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \quad (12)$$

При подстановке численных значений и с учетом (6), выражение для степени ионизации принимает вид

$$\frac{x}{1-x} = \frac{S_n(T)}{n_e} = 4,83 \cdot 10^{15} \cdot \frac{1}{n_e} \cdot T^{3/2} \cdot 10^{-\frac{5040}{T} \bar{U}_i} \quad (13),$$

где \bar{U}_i – кажущийся потенциал ионизации.

Из уравнения (13) следует, что степень ионизации x атомов увеличивается с повышением температуры плазмы и уменьшается при увеличении электронной концентрации n_e .

Эффективные значения электронной концентрации могут быть получены на основании измерения относительной интенсивности ионной и атомной линий элемента, для которого известны атомные константы и который не влияет на измеряемые параметры плазмы – T и n_e . Из выражений (10) и (11) следует

$$\lg \frac{I_i}{I_a} = \lg \frac{x}{1-x} + \lg \frac{(A\nu)_i}{(A\nu)_a} + \frac{5040}{T} (E_a - E_i) - \lg \frac{Z_i}{Z_a} \quad (14)$$

Отношение $\frac{x}{1-x}$ связано с n_e формулой (13). После соответствующей подстановки и преобразований получим

$$\lg n_e = \lg \frac{I_i}{I_a} + \lg \frac{A_i Z_i^2 \bar{U}_i}{A_a Z_a^2 \bar{U}_a} - \frac{5040}{T} (U_i + E_{II} - E_I) + \frac{3}{2} \lg T + 15,684 \quad (15)$$

Уравнение (15) было использовано нами для вычисления концентрации электронов по измеренным отношениям интенсивностей ионной и атомной линий нескольких элементов в образцах разного валового состава. Атомные константы взяты из работ

[10,11]. Данные по температуре плазмы в аналитической зоне двухструйного плазматрона взяты из работы [9].

Экспериментальная установка

Работа выполнялась на эмиссионном спектрометре, состоящем из двухструйного дугового плазматрона с длинным секционированным соплом в каждой головке [2], дифракционного спектрографа ДФС-8-3 с решеткой 1800 штр/мм, обратная линейная дисперсия – 2А/мм, фотоэлектронной кассеты на линейных ПЗС и производства и программным обеспечением фирмы ООО «МОРС» (г. Троицк Мос. обл.). Подача анализируемой порошковой пробы в плазму плазматрона осуществлялась с помощью устройства ввода порошка [12], в котором диспергирование пробы происходит высокочастотным искровым разрядом между коаксиальной парой электродов и затем транспортирующим газом азровзвесь по трубке подается между струями плазмы соосно основному потоку.

Режим работы плазматрона

Рабочий ток – 90А, угол между струями плазмы – 60°, расход пробы 10мг/с, экспозиция 10с. Расход защитного и плазмообразующего газа (Ar) – 4л/мин. Расход транспортирующего пробу газа – 1л/мин.

На щель спектрографа с помощью одно линзовой системы (F150) проектировалась аналитическая зона плазмы – 30мм от среза сопел плазматрона.

Результаты

В табл. представлены длины волн, используемых пар линий, вероятности переходов и статистические веса возбужденных состояний, потенциалы возбуждения атомной и ионной линии, потенциал ионизации элемента, результат определения электронной концентрации и состав образца, вводимого в плазму плазматрона. Температура плазмы в аналитической зоне принята согласно [9] равной 7000К.

Таблица

элемент	λ_{II} , нм	λ_{I} , нм	A_{ig_i}	$A_{a_{g_a}}$	$U_{i, \text{эВ}}$	$U_{i, \text{эВ}}$	$U_{i, \text{эВ}}$	n_e	образец
Be	313,107	234,861	2,3	16,4	3,96	5,28	9,32	$1 \cdot 10^{14}$	гранит
	313,107	234,861	2,3	16,4	3,96	5,28	9,32	$3 \cdot 10^{14}$	гранодиорит ГСО МК1
	313,107	234,861	2,3	16,4	3,96	5,28	9,32	$3 \cdot 10^{14}$	гранодиорит ГСО МК2
Cd	226,502	228,802	99	12	5,47	5,42	8,99	$1 \cdot 10^{16}$	ГСО СПГ27
	226,502	228,802	99	12	5,47	5,42	8,99	$3 \cdot 10^{16}$	шлам
Mg	279,553	285,213	10,7	14,8	4,43	4,35	7,65	$1,6 \cdot 10^{15}$	графит
Ti	338,783	338,594	17,44	35	3,68	3,7	6,82	$1 \cdot 10^{15}$	СПГ27
	337,22	337,043	58,4	228	4,28	3,67	6,82	$8 \cdot 10^{15}$	гранит МК3
	338,783	338,594	17,44	35	3,68	3,7	6,82	$4 \cdot 10^{15}$	дунит СДУ1
	338,783	338,594	17,44	35	3,68	3,7	6,82	$3 \cdot 10^{15}$	шлам Киев

Обсуждение результатов

Из табл. следует, что измеренные значения электронной концентрации зависят от элемента, линии которого используются для расчета и находятся в пределах от 10^{14} до



$3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Разница в цифрах ощутимая. Но при измерении по линиям бериллия в трех образцах, отличающихся по валовому составу, получены практически одинаковые результаты электронной концентрации. По линиям кадмия определялась электронная концентрация в совершенно разных по основе образцах – в графитовом порошке и в шламе. Результат отличается настолько незначительно, что не скажется на степени ионизации определяемых элементов

Для независимости интенсивности ионных линий от присутствия в плазме легкоионизируемой примеси достаточно предположить сохранение высокой степени ионизации всех определяемых элементов, включая и трудно ионизируемые.

Для объяснения низких, ионизационных влияний и высокой интенсивности ионных линий в аргоновой индуктивно связанной плазме Баумансом [10] была предложена модель возбуждения и ионизации элементов-примесей, основанная на предположении об отклонении от локального термодинамического равновесия (ЛТР) в аргоновой плазме. Частицы анализируемой пробы, находясь в относительно холодной осевой зоне, окружены горячей аргоновой плазмой, в которой предполагается высокая заселенность возбужденных метастабильных уровней аргона. Аргону в этой модели приписываются две функции: ионизатора и элемента легкоионизируемого, который задает концентрацию электронов в плазме. В обоих случаях главную роль играют возбужденные метастабильные атомы аргона.

Ионизация элемента примеси может происходить за счет пеннинговской ионизации, описываемой уравнением



где Ar^m – атом аргона в метастабильном возбужденном состоянии, Y^+ – ион примесного элемента в основном либо в возбужденном состоянии. Возбуждение иона возможно при условии

$$E_m \geq V_{\text{ion}}^y + E_{qi} \quad (17)$$

где E_m – энергия возбуждения Ar^m (11,55 или 11,72 эВ), V_{ion}^y энергия ионизации элемента Y , E_{qi} – энергия возбуждения иона Y^+ . Сохраняется и известный канал ионизации электронным ударом



Основным каналом ионизации является пеннинговская ионизация (16). Отношение констант скоростей ионизации (16) и (18) по оценкам [10] составляет $> 10^3 - 10^5$. Рекомбинация в основном осуществляется в трех частичных столкновениях (18).

Величина плотности электронов n_e согласно этой модели в чистой аргоновой плазме определяется ионизационным равновесием между Ar и Ar^m :



По оценкам [10] величина плотности электронов при температуре $T = 6000\text{K}$ составляет $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$. При такой высокой плотности электронов, создаваемой самим аргоном, добавление в плазму легкоионизируемого элемента не может существенно повлиять на величину n_e .

Геометрия плазмы двухструйного плазматрона напоминает геометрию индуктивно связанной плазмы. Здесь проба идет по плазменному коридору, нагревается от горячих струй аргоновой плазмы и как уже отмечалось [13], разряд между струями плазмы двухструйного плазматрона является несамостоятельным и условия ионизации во многом обусловлены внешним притоком тепла от струй плазмы; доля джоулева тепла в этом балансе невелика.

Вклад легкоионизируемой примеси (25% NaCl) в n_e по оценкам [2] составляет $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и не может привести к большим изменениям результирующей электронной концентрации в плазме двухструйного плазматрона если степень ионизации элементов

задается, в основном, столкновениями с метастабильными атомами аргона и является достаточно высокой. Эти изменения не приводят к существенному уменьшению интенсивности ионных линий (ионизационный фактор $F_i = x_2/x_1$ будет близким 1 для элементов с разными потенциалами ионизации), а интенсивность атомных линий должна увеличиться ($F_a = (1-x_2)/(1-x_1)$ будет > 1) в зависимости от потенциала ионизации определяемого элемента.

Интенсивность ионных линий легкоионизируемых элементов (6-7 эВ) в области, близкой к месту слияния струй плазмы (8000-7300К), согласно расчету должна изменяться мало (ионизационный фактор $F_i = 1 \div 0,8$), а интенсивность линий элементов с потенциалом ионизации $8 \div 9$ эВ должна довольно значительно уменьшаться ($F_i = 0,5 \div 0,3$), что не согласуется с экспериментом.

В удаленной по потоку области плазмы, где температура принимает значение ~ 6000 К, расчетная степень ионизации элементов-примесей в присутствии натрия сильно понижается, предсказывая понижение и интенсивности ионных линий: $F_i = 0,4 \div 0,002$. Величина эффекта уменьшения интенсивности ионных, линий должна быть зависимой от потенциала ионизации определяемого элемента. Эксперимент же показывает, что интенсивность ионных линий исследованных элементов изменяется в небольших пределах ($F_{i\text{эксп}} = 1-0,9$) независимо от потенциала ионизации.

Косвенным подтверждением факта высокой степени ионизации плазмы двухструйного плазматрона и как следствие высокой электронной плотности является наблюдаемое нами очень незначительное (порядка 2В) уменьшение падения напряжения на дуге по сравнению с рабочим (120В) при введении в плазму больших (до 100%) количеств легкоионизируемой пробы.

Использование для определения электронной концентрации уравнения Саха и отношения интенсивностей ионных и атомных линий элементов анализируемой пробы возможно лишь при наличии локального термодинамического равновесия. Поэтому мы полученные результаты по измерению электронной концентрации рассматриваем как оценочные. Для более корректной оценки электронного давления необходимо использовать методы измерения, которые не зависят от предположений о ЛТР, на пример штарковское уширение линий H_β , что и планируется в следующих работах.

Заключение

Экспериментально определена концентрация электронов в плазме двухструйного дугового плазматрона по относительным интенсивностям ионной и атомной линий и уравнению Саха. Использование пар линий разных элементов дало значения электронной концентрации $1 \cdot 10^{14} - 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при введении проб разного валового состава. Для объяснения экспериментальных закономерностей поведения ионных и атомных линий определяемых элементов привлечена модель, основанная на предположении об отклонении от ЛТР и высокой степени ионизации аргоновой плазмы за счет метастабильных атомов аргона.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям. Роснаука ГК 02.552.11.7024.

Литература

1. Жеенбаев Ж, Энгельшт В.С. Двухструйный плазматрон, Фрунзе, ИЛИМ, 1983
2. Тагильцев А.П. Спектральные и химико-спектральные методы анализа проб сложного состава с использованием двухструйного дугового плазматрона. Диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук // Новосибирск, 1986 г.
3. Смирнова Е.В. Оценка спектральных помех при атомно-эмиссионном определении редкоземельных элементов цериевой группы в геологических объектах с использованием дугового двухструйного плазматрона. Васильева И.Е., Кузнецов А.М. // Журнал аналитической химии, 1997, т. 52, №8, с. 876-883.



4. Золотовицкая Э.С. Атомно-эмиссионный плазменно-спектральный анализ высокотемпературных сверхпроводящих материалов Штительман З.В., Глушкова Л.В., Бланк А.Б. // Журн. прикладной спектроскопии, 1993, т. 59, №1-2, с. 27-31.
5. Черевко А.С., Юделевич И.Г., Попова В.П. и Тагильцев А.П. Атомно-эмиссионный спектральный анализ порошков с использованием дугового двухструйного плазматрона. Журнал аналитической химии, том XLIII, вып. 3, 1988, с. 426 – 434.
6. Черевко А.С. Использование двухструйного плазматрона для спектрального анализа геологических проб сложного состава Тагильцев А.П., Юделевич И.Г., Энгельшт В.С., Жеенбаев Ж. // В кн.: Методы спектрального анализа минерального сырья, Новосибирск: Наука, 1984, с. 23-25.
7. Yudelevich I.G., Cherevko A.S., Engelsht V.S., Pikalov V.V., Tagiltsev A.P. and Zheenbaev Zh. Zh. A two-jet plasmatron for the spectrochemical analysis of geological samples. Spectrochimica Acta, 1984, v. 39B, №6, p 777-785.
8. Черевко А.С. Изучение температурного поля плазменной струи двухструйного плазматрона. Пикалов В.В., Тагильцев А.П., Юделевич И.Г., Энгельшт В.С., Жеенбаев Ж. // Журнал прикладной спектроскопии, 1983, т. 38, №3, с. 497-499.
9. Черевко А.С. Зависимость температуры плазменной струи двухструйного плазматрона от потенциала ионизации запыляющего плазму вещества. Пикалов В.В., Тагильцев А.П., Юделевич И.Г., Энгельшт В.С., Жеенбаев Ж. // Изв. СО АН СССР, серия химич. наук, 1983, №6, с. 80-75.
10. Boumans P.W.J.M. An experimental study of a 1-kW, 50-MHz RF inductively coupled plasma with pneumatic nebulizer, and a discussion of experimental evidence for a non-thermal mechanism. F.J. De Boer // Spectrochim. Acta, 1977, v. 32B, №9/10, p 365-395.
11. Зильберштейн Х.И. Спектральный анализ чистых веществ. Санкт-Петербург, «Химия», 1994г.
12. Тагильцев А.П., Тагильцева Е.А. Устройство ввода порошка в поток плазмы, материалы 13-го научно-практического семинара «Аналитика 2005», 30мая-1июня 2005г.
13. Асаналиев М.К. Структура потока плазмы двухструйного плазматрона. Жеенбаев Ж.Ж., Самсонов М.А., Энгельшт В.С. // Препринт, Фрунзе, 1980, с. 29.

ESTIMATION OF ELECTRONIC CONCENTRATION IN PLASMA OF AN ARCH TWO-JET PLASMATRON

E.A. Tagiltseva ¹⁾, A.P. Tagiltsev ²⁾, B.K.Zuev ¹⁾.

¹⁾Institute of geochemistry and analytical chemistry it. V.I.Vernadsky of the Russian Academy of Science
119991, Moscow, street Kosygina 19.

²⁾State research and a project institute of the rare-metal industry
119017, Moscow, B.Tolmachevsky p., 5.

In the assumption of presence in plasma two-jet arc plasmatron local thermodynamic balance (LTE) concentration электронов on relative intensity of ionic and nuclear lines of elements with high potential of ionization and to the equation of Saha is experimentally certain. Values of electronic concentration $1 \cdot 10^{14} - 3 \cdot 10^{16}$. It is shown what to explain observable experimental laws of behaviour of ionic and nuclear lines in argon to plasma two-jet плазматрона it is possible only default LTE and a high degree of ionization of elements made by metastable atoms of argon.

Key words: plasma, argon, plasmatron, equation of Saha.

СТАТУС ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ПОИСКУ И ИССЛЕДОВАНИЮ ДИФРАГИРОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА МИКРОТРОНЕ НИИЯФ МГУ

Д.А. Бакланов¹⁾, И.Е. Внуков¹⁾, В.К. Гришин²⁾,
А.Н. Ермаков²⁾, Ю.В. Жандармов¹⁾, Р.А. Шатохин¹⁾

¹⁾ Белгородский государственный университет, Белгород, Россия
e-mail: vnukov@bsu.edu.ru

²⁾ Научно исследовательский институт ядерной физики при МГУ, Москва, Россия

Обсуждается возможность экспериментального обнаружения дифрагированного излучения каналированных электронов с энергией 15-40 МэВ на микротроне НИИ ЯФ МГУ. Предложен новый способ ориентации кристалла на электронных ускорителях средних энергий с коротким временем цикла ускорения и сброса электронов на мишень (микротрон, линейный ускоритель) по интегральным характеристикам выхода мягкого излучения из тонких металлических мишеней, обеспечивающий существенное сокращение временных затрат на ориентацию кристалла. Создана экспериментальная установка, разработан и отлажен комплекс программ для работы с аппаратурой, проведены тестовые измерения, то есть, выполнен весь комплекс работ, позволяющий уже в ближайшее время проводить экспериментальные исследования характеристик излучения, возникающего при взаимодействии быстрых электронов с упорядоченными и частично упорядоченными средами.

Ключевые слова: каналирование, дифракция, кристалл, дифрагированное излучение каналированных электронов, эксперимент, ориентация кристалла

Введение

Дифрагированное излучение каналированных электронов (DCR – Diffracted Channeling Radiation) или, как его иногда называют, дифрагированное (дифракционное) излучение релятивистского осциллятора (ДИО) [1-3], одно из интересных физических явлений, происходящих при прохождении быстрых заряженных частиц через упорядоченные среды, предсказанных в 70-80-ых годах в работах В.Г. Барышевского с соавторами. Часть из них, например, параметрическое рентгеновское излучение (ПРИ) быстрых заряженных частиц в кристаллах и ПРИ под малыми углами к направлению скорости частицы, экспериментально зарегистрирована [4,5].

ДИО, являющееся результатом когерентного суммирования двух процессов – излучения фотона и его дифракции в кристалле (см. [1-3,6] и цитированную там литературу), до последнего времени оставалось вне поля зрения экспериментаторов как вследствие недостаточной ясности в величине эффекта, так и очевидной сложности его выделения на фоне конкурирующих процессов: ПРИ и дифрагированного тормозного излучения (ДТИ). Дополнительную сложность с точки зрения возможности проведения исследований по поиску проявления эффекта представляет ограниченный диапазон энергии частиц, где возможно его чёткое проявление (10-40 МэВ), и очень узкий диапазон энергий фотонов, где оно может отчетливо проявиться, что предъявляет жёсткие требования к выбору угла наблюдения и коллимации излучения [7].

В последнее время, после появления цикла работ [7-10], ситуация с оценкой величины эффекта прояснилась. В соответствии с результатами цитируемых работ в узком угловом интервале выход дифрагированного излучения каналированных электронов может на несколько порядков превышать выход ПРИ. В случае справедливости этой оценки можно надеяться на создание нового интенсивного источника рентгеновского излучения с перестраиваемой энергией, поскольку с практической точки зрения



источник излучения на основе механизма ПРИ в совершенных кристаллах себя не оправдал [11]. Весьма интересным выглядит и утверждение авторов [6] о возможности интерференции механизмов излучения при каналировании и ПРИ. В этом случае при выполнении условий дифракции для фотонов, испущенных при переходе электрона из одного связанного состояния в другое, можно ожидать изменения соотношения пиков в спектре излучения при каналировании. Поскольку интерференция когерентного тормозного излучения и излучения при каналировании наблюдалась экспериментально [12,13], регистрация эффекта интерференции механизмов излучения при каналировании и ПРИ представляется интересной физической задачей. Исходя из вышеизложенного, экспериментальные исследования, направленные на верификацию теоретических предсказаний о величине и характеристиках ДИО, бесспорно важны и актуальны.

1. Постановка задачи

В соответствии с теоретическими предсказаниями [7-10] проявление обсуждаемого эффекта возможно для практически любого угла наблюдения и, соответственно, энергий фотонов, при выполнении условия $\omega_B \leq \omega_{ch}$, где ω_{ch} - энергия фотонов излучения при каналировании, а ω_B - брэгговская энергия для этого угла наблюдения. Однако характер и степень проявления эффекта кардинально зависит от соотношения этих энергий. Если брэгговская энергия близка к энергии любого пика в спектре излучения при каналировании, то в центре углового распределения ПРИ, соответствующего минимуму интенсивности этого типа излучения, должен наблюдаться резкий максимум, амплитуда которого в несколько десятков раз превышает выход ПРИ [10].

Если это условие не выполняется, то на угловом распределении ПРИ появляются узкие сдвоенные пики с амплитудой, значимо превышающей выход ПРИ. Число этих пиков с каждой стороны от центра углового распределения ПРИ совпадает с количеством пиков в спектре излучения при каналировании [7, 10]. Другими словами, для энергий электронов $E_0 > 20-30$ МэВ, для которых спектр излучения при каналировании содержит несколько пиков, при измерении углового распределения или ориентационной зависимости (ОЗ) выхода излучения с помощью детектора с конечной угловой апертурой можно ожидать некоторого увеличения интенсивности для всех точек в угловом распределении или ориентационной зависимости выхода ПРИ.

Как отмечено во введении, целенаправленный поиск обсуждаемого механизма излучения не проводился. Эксперимент [14] для энергии электронов 900 МэВ и угла наблюдения 90 градусов ($\omega_B \sim 7-20$ кэВ), где контролировалось наличие режима плоскостного и осевого каналирования, показал полное отсутствие какого либо влияния эффекта каналирования на спектр и угловое распределение ПРИ, что, по-видимому, обусловлено большой разницей между брэгговской энергией и характерной энергией излучения при каналировании для этой энергии электронов ($\omega_h \sim 3-5$ МэВ), см. например, [7]. В экспериментах по исследованию ПРИ выполнение режима каналирования обычно не контролируется, к тому они чаще всего выполняются с использованием кристаллов с толщиной много большей длины деканалирования ($\sim 2-10$ мкм, для энергии электронов меньше 100 МэВ), требуемой для уверенного проявления эффекта.

Однако анализ опубликованных экспериментальных данных показывает, что в нескольких экспериментах его проявление всё-таки могло регистрироваться. В работе [15] сообщалось о двукратном превышении зарегистрированного выхода излучения из тонких кристаллов кремния и алмаза под углом 180 градусов по сравнению с предсказаниями кинематической теории ПРИ. Поскольку для строго брэгговской ориентации этот угол наблюдения соответствует режиму осевого каналирования, а кристаллы обычно вырезаются и устанавливаются так, что их грани параллельны кристаллографическим плоскостям, не исключено, что ориентационные зависимости выхода ПРИ

вокруг вертикальной оси, полученные в этом эксперименте, измерялись при выполнении условий каналирования в горизонтальной плоскости. Характерная энергия излучения при плоскостном каналировании электронов с энергией 30 – 87 МэВ (несколько десятков кэВ) значительно больше брэгговской энергии для этого угла наблюдения (~2-5 кэВ), поэтому обсуждаемый эффект мог проявиться в увеличении интенсивности регистрируемого излучения, что и наблюдалось в цитируемой работе. Объяснение этого превышения вкладом динамических эффектов, свойственных отражению рентгеновского излучения в геометрии Брэгга, предложенное авторами [15], представляется не правомерным, поскольку в других экспериментах, так же выполненных в геометрии Брэгга, см., например, [14], значимого увеличения интенсивности по сравнению с предсказаниями теории не наблюдалось.

В эксперименте [16] проведено измерение ОЗ выхода ПРИ для отражения (111) в кристалле кремния толщиной 17 мкм. Геометрия измерений была выбрана так, что ориентационные зависимости измерялись при движении электронов под малыми углами к плоскости (112). Результаты этого эксперимента интересны тем, что для энергии электронов 15.7 МэВ с учетом вклада ДТИ никаких отклонений от предсказаний кинематической теории ПРИ не наблюдалось, а для $E_0=25.7$ МэВ, где энергия излучения при плоскостном (112) каналировании больше энергии фотонов первого порядка отражения для условий цитируемой работы (10-15 кэВ), зарегистрированный выход излучения во всех точках измеренной зависимости оказался примерно на 30 процентов больше, чем это предсказывает теория ПРИ.

Из проведенного анализа следует, что обсуждаемый эффект скорее всего существует, но для его уверенной идентификации измерения должны быть выполнены для такой геометрии и энергии электронов, для которых брэгговская энергия близка к энергии хотя бы одного пика в спектре излучения при каналировании. С методической точки зрения наиболее привлекательным представляется диапазон энергий фотонов 20 – 35 кэВ. Он может быть реализован на ускорителях с энергией 20 – 30 МэВ. Из-за низкого поглощения фотонов этих энергий в воздухе эксперимент можно провести без вакуумирования фотонной трассы, а детектор отнести на большое расстояние от ускорителя для уменьшения фона. Эксперимент предполагается провести на разрезном микротроне НИИ ЯФ МГУ с током ~3 мА (~ 10^{12} частиц за цикл ускорения), частотой 10 Гц, длительностью цикла излучения $\tau \sim 8-10 \mu\text{с}$ и эмиттансом $\approx 1 \text{мм} \times \text{мрад}$ [17]. Наличие выведенного электронного пучка, нужный энергетический диапазон (14.6-67.4 МэВ) и возможность изменения энергии частиц позволяют надеяться на успешное выделение этого типа излучения на фоне ПРИ и ДТИ.

Исходя из условий простоты эксперимента, плоскость каналирования должна совпадать с горизонтальной, а плоскость, на которой происходит дифракции излучения при каналировании, развернута вокруг вертикальной оси на требуемый угол. Для регистрации искомого излучения предполагается использовать NaI детекторы (как показывает практика, для энергий фотонов больше 20 кэВ их разрешения вполне достаточно, что бы выделить ПРИ на непрерывном фоне) или pin-детектор.

Для уверенного выделения искомого эффекта планируется провести измерения угловых распределений выхода рентгеновского излучения для нескольких порядков отражения. Как отмечено выше, при выполнении условия $\omega_B \leq \omega_{ch}$ в центре углового распределения ПРИ должен появиться узкий максимум с большой амплитудой. Контрольной проверкой будет проведение таких же измерений для другой энергии электронов. Все условия для генерации ПРИ и ДТИ изменятся достаточно слабо, тогда как совпадения энергий излучения при каналировании и дифрагированных фотонов, требуемого для проявления искомого эффекта в его наиболее яркой форме, не будет, а форма углового распределения должна будет совпадать с предсказаниями теории ПРИ.

Для наблюдения эффекта необходимо сориентировать плоскость кристалла вдоль направления электронного пучка, то есть выйти на режим плоскостного каналирования. Методы ориентации кристаллов по выходу излучения при каналировании с помощью ионизационной камеры [18] или NaI(Tl) детектора в комптоновской геометрии [19], обычно используемые на ускорителях более высоких энергий для электронов средних энергий не пригодны, поскольку характерная энергия излучения при каналировании таких частиц не превышает 50-100 кэВ.

Использование счётного режима работы детекторов, обычно применяемое на ускорителях низких и средних энергий (см., например, [20] и цитируемую там литературу) на ускорителях с коротким временем цикла ускорения практически не возможно, так как типичная длительность импульса с детектора излучения ($\sim 1-6$ мс), в зависимости от типа используемого детектора, сопоставима с длительностью цикла ускорения (6-10 мс). В связи с этим для исключения наложений ток ускорителя должен поддерживаться таким, что бы за один цикл ускорения регистрировалось не более 0.2-0.4 импульсов. Для получения статистической ошибки на уровне 5% при частоте ускорителя 10 Гц необходимо не менее 100 – 200 секунд для каждой ориентации кристалла. В процессе ориентации кристалла обычно измеряется несколько ориентационных зависимостей с числом точек от 100 до 200. Другими словами ориентация кристалла требует 10-20 часов непрерывной работы ускорителя, что в наших условиях практически не осуществимо. Ориентация по спектрам излучения требует увеличения временных затрат как минимум в несколько раз и поэтому так же не может быть использована на этапе первоначальной ориентации кристалла. Следует отметить, что в процессе ориентации необходимо измерять токи на уровне $10^3 - 10^5$ частиц за цикл ускорения, что представляет собой отдельную техническую задачу.

Традиционный метод ориентации кристалла с помощью тонкостенной и толсто-стенной ионизационных камер [18], где используется интегральный режим работы детекторов, в наших условиях заведомо не пригоден вследствие низкой энергии излучения при каналировании электронов средних энергий. Поэтому для ориентации кристалла предполагается использовать рентгеновский NaI детектор толщиной 1 мм, расположенный под углом 90° и регистрирующий изменение выхода характеристического рентгеновского излучения (ХРИ) из тонкой металлической мишени, установленной на γ -пучке, в зависимости от ориентации кристалла. Такой метод ориентации в счётном режиме использовался в условиях ускорительного зала томского синхротрона для энергии электронов 500 МэВ и показал хорошую чувствительность [21]. Путём замены рассеивателя можно добиться оптимального соотношения сигнал/фон и выделить изменение интенсивности той или иной линии в спектре регистрируемого излучения (см. следующий раздел). Измерения предполагается проводить в токовом режиме включения детектора. Это позволит работать в обычном для ускорителя режиме и сократить время ориентации кристалла.

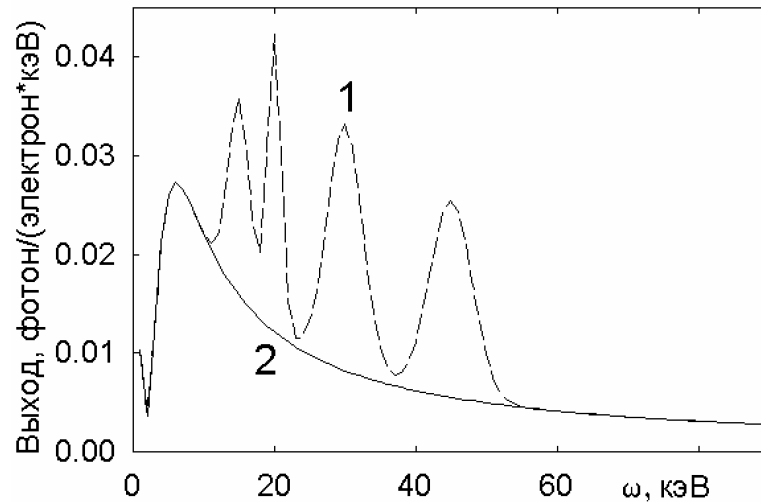
2. Моделирование

Для проверки применимости предлагаемого метода ориентации кристалла для меньших энергий электронов, чем в эксперименте [21], проведено моделирование зависимости интегрального отклика детектора, то есть энергии поглощённой в детекторе, от спектра анализируемого излучения, материала и толщины мишени. Расстояние от металлической мишени до детектора 1 м. Угол коллимации рассеянного излучения 2° . В процессе моделирования учитывались эффективность детектора, поглощение первичного и рассеянного излучения в материале мишени и в воздухе на пути от кристалла до мишени и от неё до детектора.

Для сопоставления были использованы результаты эксперимента [22] по исследованию излучения при плоскостном (110) каналировании электронов с энергией 30 МэВ

в кристалле кремния толщиной 15 мкм. На рис. 1 приведены начальные участки спектров излучения, использованных при моделировании.

Рис. 1 Спектры излучения электронов с $E_0=30$ МэВ в кристалле кремния для условий эксперимента [22]: 1 – излучение при плоскостном (110) каналировании; 2 – тормозное излучение



Модельный спектр излучения при каналировании (кривая 1) воспроизводит экспериментальный спектр [22] с погрешностью не более 30%. Тормозной спектр (кривая 2) рассчитан исходя из спектрально-углового распределения Шиффа [23] с учётом параметров цитируемого эксперимента: начальной расходимости пучка электронов, многократного рассеяния частиц в кристалле и угла коллимации излучения (0.5 мрад). Полное число фотонов в спектре излучения при каналировании на 25-30% выше, чем в спектре тормозного излучения из разориентированного кристалла. В соответствии с результатами расчёта основной вклад в выход регистрируемого излучения даёт процесс фотопоглощения квантов первичного пучка в мишени. Вклад фотонов, испытавших в мишени когерентное и некогерентное рассеяние, для всех мишеней не превышал долей процента, что обусловлено как малым значением сечения, так и низкой эффективностью детектора для энергий фотонов $\omega > 100$ кэВ.

Расчёт выполнен для мишеней из свинца, олова, серебра, молибдена, ниобия и меди, то есть для тех распространённых металлов, из которых можно изготовить тонкие фольги. На рис. 2 приведена зависимость отклика прибора от толщины мишени для нескольких материалов и разных спектров излучения. Верхние кривые соответствуют регистрации излучения при каналировании, а нижние тормозного излучения.

Как видно из рисунка, вещества с большим Z обеспечивают больший отклик из-за большей энергии фотонов ХРИ. В то же время различие величины отклика для спектров каналированного и тормозного излучений, наиболее важное с точки зрения эффективности предложенного ме-

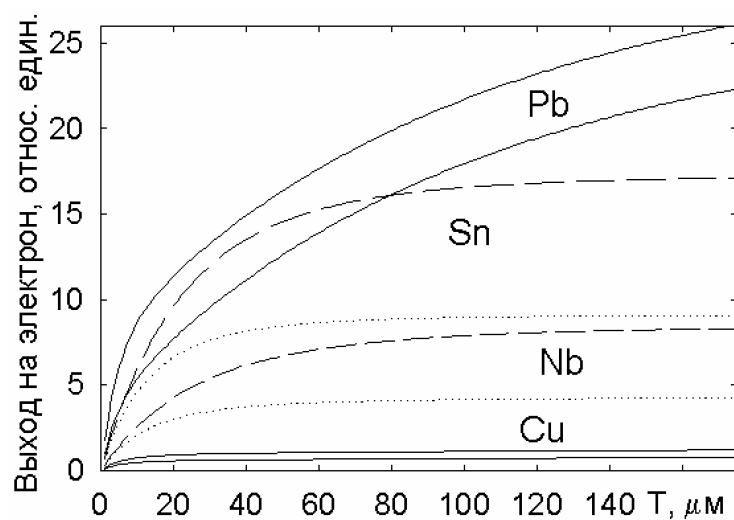


Рис. 2. Зависимость отклика детектора рассеянного излучения от спектра излучения, падающего на мишень, её материала и толщины

тода ориентации кристаллов, максимально для веществ с средним Z (олово, серебро, см. рис. 3). Следует отметить, что выход регистрируемого излучения практически выходит на насыщение для толщин мишеней 40-70 мкм, что обусловлено большим сечением фотопоглощения в области интересующих нас энергий.

На рисунке 3 приведена зависимость отношения выходов регистрируемого излучения для спектров каналированного и тормозного излучений и мишеней из свинца, олова, серебра, ниобия и меди.

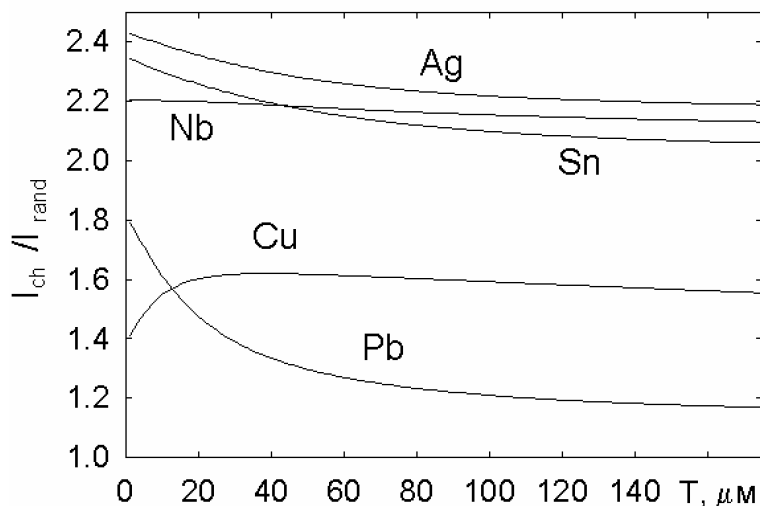


Рис. 3. Зависимость отношения отклика детектора к излучению разного спектрального состава от материала и толщины металлической мишени

Из рисунка видно, что лучшими мишенями для реализации предлагаемого метода ориентации кристаллов по интегральному выходу рассеянного излучения являются серебро и олово. Вещества с малым Z (медь) проигрывают из-за меньшей величины превышения и малой величины отклика, что приводит к увеличению доли фона. Вещества с большим Z (свинец) несмотря на большую величину отклика (см. рис. 2) так же не подходят. Вследствие большой энергии порога фотопоглощения на К оболочке (~88 кэВ), превышающей спектральную область излучения при каналировании (см. рис. 1) для анализируемых условий, выход фотонов ХРИ с К оболочки не зависит от ориентации кристалла. Разница в выходе рассеянного излучения для этой мишени и когерентного и некогерентного спектров излучения обусловлена фотопоглощением на L оболочке. Для мишеней оптимальной толщины отношение регистрируемых выходов рассеянного излучения для анализируемых спектров (~2.4 – 1.7) существенно лучше, чем отношение числа фотонов в этих спектрах ~1.3.

Достаточно высокая чувствительность предлагаемого метода и пороговый характер зависимости сечения фотопоглощения от энергии фотонов позволяет осуществить проверку существования интерференции механизмов ПРИ и излучения при каналировании в случае выполнения условий дифракции для фотонов того или иного пика в спектре излучения (см. введение и [6]) не проводя трудоёмких спектральных измерений. Возьмём для определённости кристалл кремния с ориентацией $\langle 111 \rangle$ и электроны с энергией 30 МэВ. Плоскость (110) совпадает с горизонтальной плоскостью, а (112) с вертикальной. В соответствии с [22] (см. рис. 1) в спектре излучения при (110) плоскостном каналировании электронов с $E_0 = 30$ МэВ в кремнии наблюдаются четыре ярко выраженных пика с энергиями 45 кэВ, 29.2 кэВ, 19.7 кэВ и 13.6 кэВ.

Для ориентации $\langle 111 \rangle$ и выбранной геометрии расположения плоскостей кристалла наиболее сильное отражение должно наблюдаться на плоскости (112) (отражение (224)) и двух плоскостях типа (110) (отражение (220)), развёрнутых относительно вертикальной плоскости на углы $\pm 30^\circ$, см. например, [5]. Дифракция на плоскостях типа (112), развёрнутых на угол $\pm 60^\circ$ относительно вертикальной плоскости, должна на-

блюдаются для больших углов разориентации оси и поэтому не рассматривается. Если искомый эффект существует, то в спектрах излучения при каналировании должны наблюдаться особенности для углов разориентации оси кристалла вдоль плоскости (110) $\Theta = 82.9$ мрад и 124.6 мрад ($\omega = 45$ кэВ), $\Theta = 127.9$ мрад и 192.2 мрад ($\omega = 29.2$ кэВ), $\Theta = 192$ мрад и 287.8 мрад ($\omega = 19.7$ кэВ), $\Theta = 277$ мрад и 424.6 мрад ($\omega = 13.6$ кэВ). Первое значение угла разориентации соответствует выполнению брэгговского условия для фотонов этих энергий на плоскостях (110), а второе на плоскости (112). В случае интерференции этих механизмов излучения для этих углов разориентации оси выход регистрируемого излучения должен изменяться.

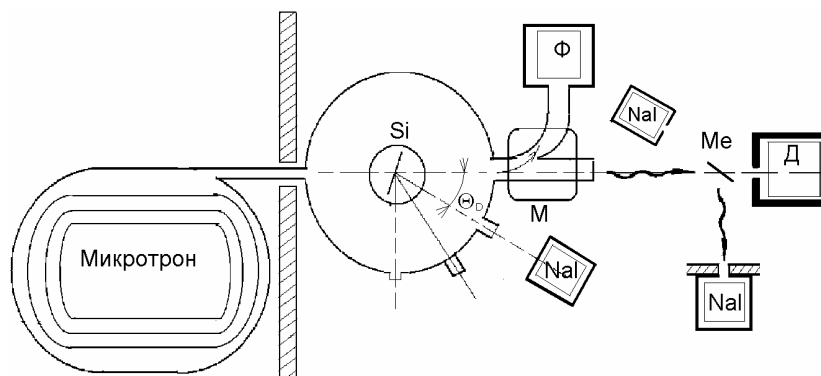
Порог фотопоглощения на К оболочке для олова – 29.2 кэВ, для серебра – 25.51 кэВ, для ниобия – 18.99 кэВ, а для меди – 8.98 кэВ, поэтому при измерении ориентационных зависимостей с использованием тонких фольг из этих материалов изменение спектров, обусловленное выполнением условия дифракции будет проявляться не одинаково. Например, тонкая мишень из ниобия должна обладать наибольшей чувствительностью к изменению интенсивности пика с $\omega = 19.7$ кэВ для углов ориентации $\Theta = 190 - 300$ мрад, тогда как для мишеней из олова или серебра изменение интенсивности этого пика не влияет на выход регистрируемого излучения.

С увеличением толщины кристалла и угла коллимации излучения соотношение интенсивностей каналированной и тормозной компонент излучения уменьшается. Тем не менее, для толщины кристалла 0.2 мм и того же угла коллимации (0.5 мрад) в предположении, что каналирование происходит только в приповерхностном слое кристалла толщиной меньше 0.015 мм, отношение выходов регистрируемого излучения для спектра излучения при каналировании и тормозного излучения остается $\sim 1.1-1.2$. С учётом эффекта объёмного захвата электронов в режим плоскостного каналирования в глубине кристалла [24] это соотношение должно быть несколько лучше, что позволяет надеяться на успешную регистрацию искомого эффекта и при увеличении толщины кристалла или угла коллимации излучения.

3. Экспериментальная методика и предварительные результаты

Схема предполагаемого эксперимента приведена на рис. 4. Электроны с пятой или шестой орбиты микротрона ($E_0 = 25.2$ МэВ или 30 МэВ) выводятся в камеру рассеяния, где расположен трёхосевой гониометр с установленным на нём кристаллом и есть несколько окон для вывода излучения. Рабочий диапазон углов вращения кристалла вокруг вертикальной и горизонтальной оси Θ_v и $\Theta_h - \pm 45^\circ$ и $\pm 5^\circ$, соответственно. Шаг вращения – 0.01° . Диапазон углов вращения вокруг оси электронного пучка $\phi - \pm 5^\circ$ с шагом 0.04° . Для вращения гониометра используется предложенная в [25] схема управления шаговыми двигателями через LPT порт компьютера, позволяющая осуществить автоматический переход двигателей на ток удержания при отсутствии вращения, что целесообразно с точки зрения работы гониометра в вакууме, где недопустим нагрев двигателей из-за ухудшения вакуума. Размер электронного пучка на выходе из ускорителя 3×7 мм² соответствует расходимости ~ 0.2 мрад [17], что вполне достаточно для планируемых измерений.

Рис. 4. Схема расположения экспериментальной аппаратуры. М – очистной магнит; Ф – цилиндр фарадея; Me – металлическая пластина; Д – дозиметр; Si – кристалл кремния, установленный в гониометре



Выведенный электронный пучок измеряется магнитоиндукционным датчиком в режиме большого тока, либо в режиме спектральных измерений монитором вторичной эмиссии. Прошедшие через кристалл электроны отворачиваются в могильник очистным магнитом. Там же может быть установлен цилиндр Фарадея для калибровки датчика вторичной эмиссии. Основная проблема, которую предстоит решить, состоит в том, что до последнего времени ускоритель использовался для проведения исследований сечений ядерных реакций, где нет особой необходимости в точном измерении тока в каждом цикле ускорения, и отсутствуют датчики для измерения малых токов. Эта часть аппаратуры в настоящее время разрабатывается и, частично, настраивается.

Основной задачей первого этапа измерений была проверка развиваемого метода ориентации кристаллов на ускорителях средних энергий с коротким циклом ускорения по интегральному выходу рассеянного излучения из мишени, установленной на пучке γ -излучения из кристалла. Из-за отсутствия камеры рассеяния эксперимент выполнен на воздухе и без поворота прошедших через кристалл электронов. Пучок электронов с энергией 30 МэВ из микротрона проходил титановую фольгу толщиной 0.05 мм, падал на установленный в гониометре кристалл кремния, находящийся на расстоянии ~ 10 -15 см от выходного фланца, и рассеивался в воздухе. Наличие фольги и слоя воздуха перед кристаллом увеличивало расходимость пучка до ~ 20 мрад.

Тормозное излучение, рожденное в титановой фольге и кристалле, проходило через металлическую фольгу и регистрировалось дозиметром (Д). В эксперименте использовался кристалл кремния диаметром 40 мм и толщиной 0.23 мм. Ось $\langle 111 \rangle$ совпадала с нормалью к поверхности мишени с точностью не хуже долей градуса. Первоначально кристалл устанавливался перпендикулярно направлению электронного пучка с погрешностью не более 5-7 градусов, причём плоскость (110) была расположена горизонтально с погрешностью на уровне 4-6 градусов. Рассеянное в мишени (Me) излучение регистрировалось рентгеновским NaI(Tl)-спектрометром диаметром 40 мм и толщиной 1 мм, расположенным под углом 90 градусов относительно направления фотонного пучка. Для подавления фона спектрометр находился в свинцовой защите с толщиной стенок 15 см. Расстояние от мишени до рабочего объема детектора ~ 80 см.

В эксперименте исследовалась зависимость показаний рентгеновского NaI(Tl) детектора, регистрирующего рассеянное γ -излучения из тонкой металлической мишени, от материала мишени и ориентации кристалла. На рис. 5 приведены сглаженные спектры излучения для мишени из ниобия размерами 80×150 мм и толщиной 0.4 мм, измеренные детектором за одинаковое время (5 мин). Спектр излучения измерялся только в течение цикла ускорения (см. рис. 7а), что позволило существенно уменьшить вклад фона, обусловленного наведённой активностью в зале микротрона.

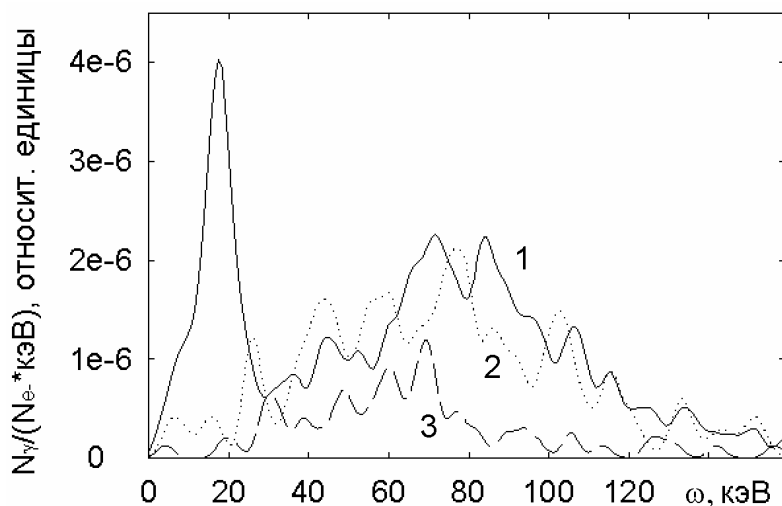


Рис. 5. Спектры излучения для мишени из ниобия: 1 – спектр с мишенью, 2 – спектр без мишени, 3 – трасса рассеянного излучения перекрыта свинцом толщиной 1 мм

Из рисунка видно, что наряду с уверенным пиком ХРИ ниобия ($\omega \approx 16.6$ кэВ) присутствует излучение с энергией $\omega \sim 70-100$ кэВ, причём выход этого излучения с мишенью и без мишени примерно одинаков. Наличие «ложных» пиков обусловлено низкой статистикой (полное число событий $\sim 300-400$). Перекрытие трассы рассеянного излучения свинцовой пластиной толщиной 1 мм добавило фотоны ХРИ свинца ($\omega \sim 70$ кэВ) и практически полностью «срезало» это излучение, то есть оно идёт непосредственно с участка трассы тормозного пучка, просматриваемого детектором.

Наиболее вероятно, что появление таких амплитуд в спектре регистрируемого излучения обусловлено когерентным и некогерентным рассеянием фотонов пучка γ -излучения из кристалла и титановой фольги в слое воздуха, просматриваемом детектором. Для расстояния от кристалла до мишени 2 м и наших мишеней (титан и кремний), установленных на пути электронного пучка микротрона, поперечный размер пучка тормозного излучения в месте расположения мишени порядка 40 см. Продольный размер области, откуда рассеянное излучение может попасть в детектор, так же несколько десятков сантиметров, то есть значительно больше, чем рабочая область металлической мишени. Поэтому вклад рассеянных комптоновских фотонов достаточно велик.

Для проверки этого предположения было проведено моделирование спектра излучения, регистрируемого детектором рассеянного излучения толщиной 1 мм, при прохождении пучка γ -излучения из кристалла кремния в воздухе для условий нашего эксперимента. Угол коллимации пучка тормозного излучения – 100 мрад. Использовалась та же самая методика и условия моделирования, как и в предыдущем разделе. Сглаженный спектр, полученный в результате моделирования, приведён на рис. 6.

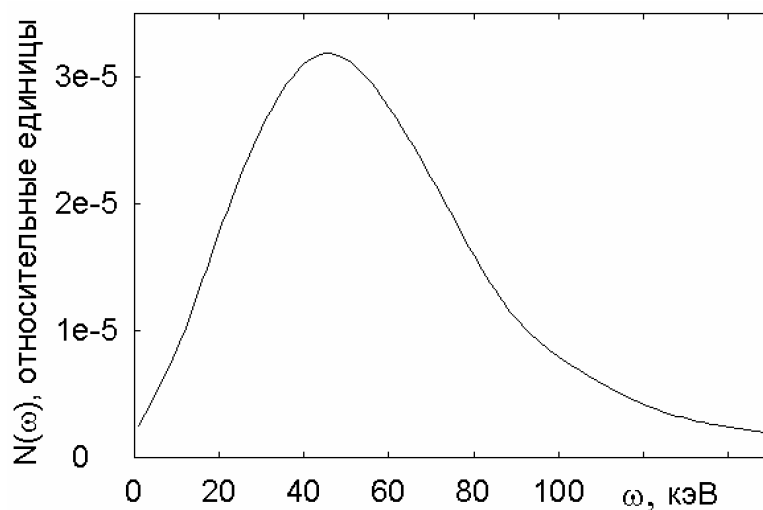


Рис. 6. Модельный спектр излучения, попадающего в детектор при рассеяния тормозного излучения в воздухе

Из рисунка видно, что форма спектра рассеянного излучения, полученного в результате моделирования, достаточно близка к форме экспериментального спектра, то есть это пик с максимумом в районе 50-60 кэВ. Спад в низкоэнергетичной области спектра обусловлен поглощением излучения в тормозных мишенях и воздухе, а в области жёстких фотонов связан с резким снижением эффективности NaI(Tl) детектора из-за его малой толщины (1 мм).

Полного совпадения нет, так в данном случае нас интересовала только физическая природа регистрируемого спектра. Поэтому в процессе моделирования не учитывался разлёт фотонов пучка тормозного излучения, а предполагалось, что фотонный пучок, не имеющий линейных размеров, рассеивается в воздухе. Учёт поперечных размеров должен привести к увеличению эффективной толщины детектора и, следова-

тельно, к увеличению эффективности регистрации жёстких фотонов, то есть сдвигу максимума модельного спектра в область больших энергий фотонов. К тому же следует отметить, что из-за малой статистики форма экспериментального спектра определена не достаточно точно. Можно надеяться, что использование достаточно простых мер, например, «разнесённого» коллиматора уменьшит область просматриваемого детектором участка воздуха и увеличит долю фотонов ХРИ.

Для выхода на режим спектральных измерений путём уменьшения тока накала катода электронной пушки ток ускорителя снижался с 5 мА (мощность дозы ~ 20 Зв/час) до ~ 0.5 μ А (мощность дозы $\sim 2-3$ μ Зв/час), что обеспечило загрузку детектора ~ 1 Гц, при частоте ускорителя 10 Гц. В качестве примера такого режима работы ускорителя на рис. 7а приведена осциллограмма выходного сигнала с детектора (зависимость 1), измеренная за несколько десятков циклов ускорения. Здесь и на следующих рисунках зависимость 2 – огибающая ускоряющего ВЧ поля. Из рисунка видно, что в этом режиме наложение сигналов в детекторе в течении одного цикла ускорения отсутствует, а сами импульсы возникают только в момент цикла ускорения.

Как отмечено выше, спектрометрический и счётный режим работы детектирующей аппаратуры не может использоваться для ориентации кристалла в первую очередь из-за больших временных затрат. С увеличением тока число фотонов, попадающих в детектор, резко возрастает, и на выходе детектора наблюдается широкий импульс, обусловленный наложением сигналов от разных фотонов и их интегрированием на выходном сопротивлении (рис. 7, б). Для обеспечения интегрального режима съёма информации с детектора разработано устройство, синхронизированное с циклом ускорения и интегрирующее этот сигнал (рис. 7, г). После окончания цикла ускорения в нём формируется импульс управления АЦП (рис. 7, в), выполненного в стандарте КАМАК и подключённого к интегратору.

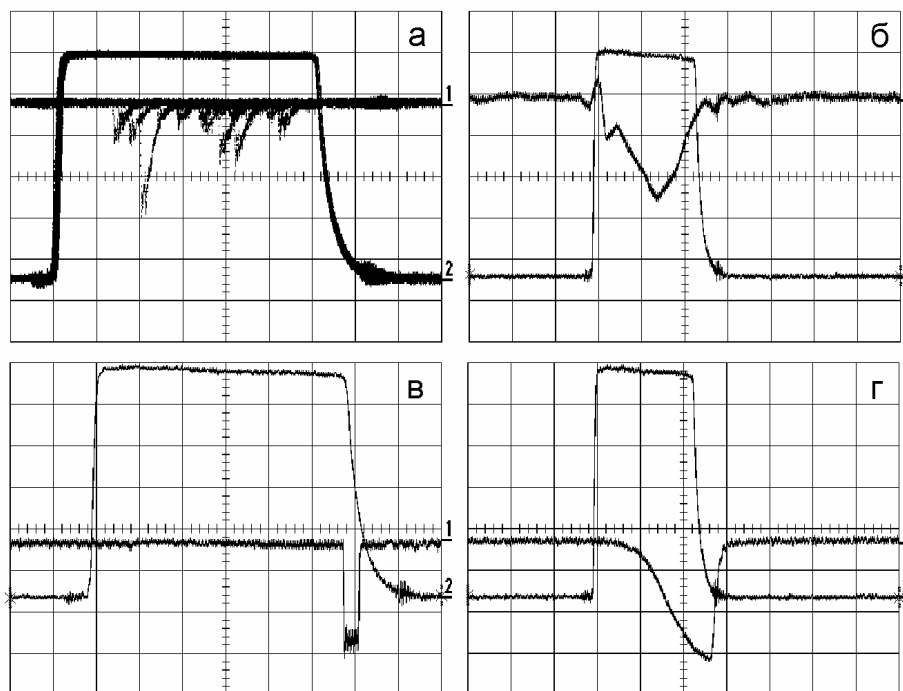


Рис. 7. Осциллограммы импульсов с рентгеновского детектора:

а) временное распределение импульсов с детектора в режиме спектральных измерений ($I \sim 1-3$ μ А) за несколько циклов ускорения;

б) сигнал с детектора в режиме большого тока ($I \sim 1-3$ мА);

в) временное положение импульса управления АЦП; г) Импульс после интегратора

Измерения показали, что ток микротрона неконтролируемо меняется в пределах 20-30%. Поскольку ожидаемое изменение выхода излучения в зависимости от ориентации кристалла такого же порядка, необходимо измерять ток во время каждого цикла ускорения с погрешностью не больше одного процента. Для этого использовался детектор NaI(Tl) большего размера также включённый в интегральном режиме и регистрирующий обратно рассеянное излучение из могильника, куда направлялось рождённое в кристалле тормозное излучение. Известно, что для энергий электронов больше 15 МэВ обратно рассеянное излучение формируется за счёт перерассеяния фотонов с энергией больше нескольких МэВ, поэтому для энергии электронов $E_0 = 30$ МэВ полная энергия этого излучения не должна зависеть от ориентации кристалла.

На рис. 8 приведена зависимость амплитуд сигналов, зарегистрированных каждым детектором, и их отношение для неизменной ориентации кристалла.

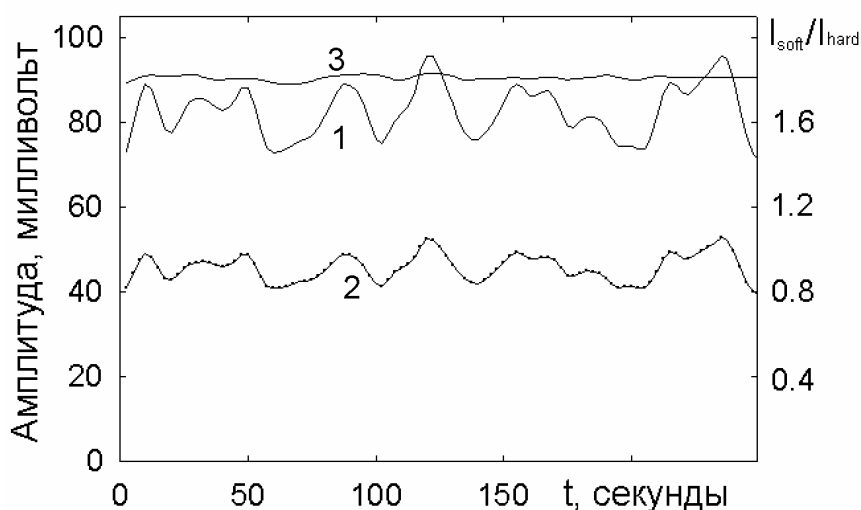


Рис. 8. Зависимость амплитуды сигналов с рентгеновского и «фонового» детекторов от времени и их отношение: 1 – показания детектора рассеянного излучения; 2 – показания детектора «фонового» излучения; 3 – отношение показаний детекторов

Из рисунка видно, что спонтанные колебания тока ускорителя приводят к изменению амплитуд регистрируемых сигналов на 30-40%, тогда как изменение отношения амплитуд не превышает $\pm 1\%$. Исходя из ожидаемого выхода параметрического рентгеновского излучения $\sim 10^{-7}$ - 10^{-8} фотон/электрон, в процессе измерений угловых распределений и ориентационных зависимостей выхода ПРИ для относительного мониторинга может быть использован этот же способ измерения тока микротрона. Для измерений спектров излучения при каналировании его чувствительности будет уже недостаточно, и нужно развивать новые методики измерения.

Разработанный комплекс экспериментальной аппаратуры позволил провести измерения ориентационных зависимостей выхода рассеянного излучения от ориентации кристалла. На рисунке 9 приведена одна из ОЗ, измеренная с шагом 0.02 градуса. На пучке излучения установлена мишень из олова размерами 80×15 мм² и толщиной 60 мкм. Каждая точка ОЗ соответствует 20 циклам ускорения (2 секунды). Полное число точек – 1000, время измерения – 37 минут. Такое же число точек с измерением счёта фотонов или спектров излучения и статистической ошибкой на уровне 5% заняло бы около 100 часов.

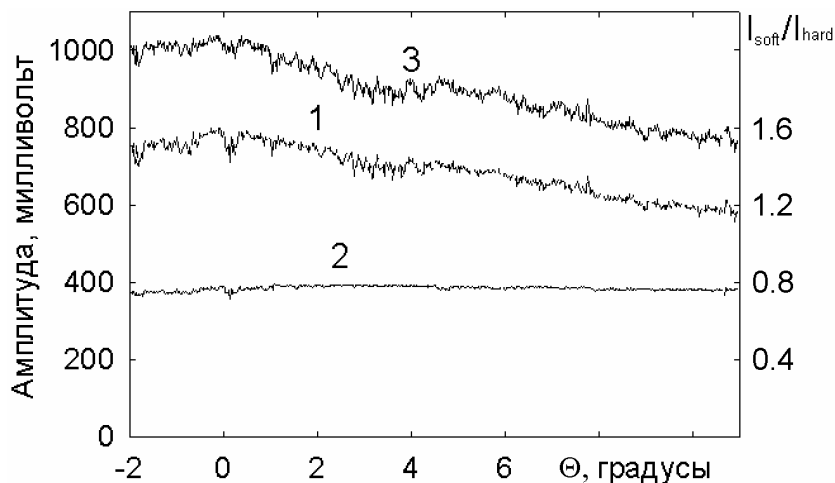


Рис. 9. Ориентационная зависимость выхода излучения для энергии электронов 30 МэВ и кристалла кремния. Обозначения совпадают с обозначениями предыдущего рисунка

Из рисунка видно, что при изменении угла поворота кристалла выход рассеянного излучения плавно возрастает, достигает максимума и затем начинает спадать, причем не плавно. Можно заметить появление второго пика для угла разориентации $\sim 4^\circ$. Однако, ожидаемые узкие пики, связанные с излучением при плоскостном каналировании электронов в кремнии, отсутствуют. Наиболее вероятно, что отсутствие этих пиков обусловлено двумя причинами. Во-первых, из-за наличия фольги на выходном фланце и слоя воздуха перед кристаллом расходимость электронного пучка $\nu_e \sim 20$ мрад больше угла плоскостного каналирования $\vartheta_c \sim 1$ мрад. Во-вторых, большим вкладом фотонов, рассеянных на воздухе. Как уже отмечалось при обсуждении результатов измерений спектров рассеянного излучения, размеры просматриваемого детектором участка трассы пучка излучения намного больше размеров металлической мишени, поэтому вклад фотонов ХРИ, с которым связана ожидаемая регистрация излучения при каналировании, мал.

Зарегистрированная зависимость показаний детектора от ориентации кристалла обусловлена увеличением выхода фотонов когерентного тормозного излучения (КТИ) [26] при уменьшении угла между направлениями кристаллографической оси и пучка электронов. Для энергии электронов $E_0 = 30$ МэВ в зависимости от угла между импульсом электрона и кристаллографическими плоскостями энергия фотонов КТИ может меняться от нескольких сотен кэВ до единиц МэВ, то есть находиться в том диапазоне энергий, для которого сечение комптоновского рассеяния достаточно велико. Для подтверждения вышесказанного, на рис. 10 приведена модельная ориентационная зависимость, рассчитанная по той же методике, как и при моделировании зависимости отклика детектора от толщины металлической мишени, для рассеяния пучка фотонов КТИ в воздухе в зависимости от ориентации кристалла. Расчёт спектров КТИ выполнен по методике работы [27] для угла разориентации оси $\langle 111 \rangle$ $\Theta_h = 6.5^\circ$ и азимутального угла разворота плоскости (110) $\varphi = 5^\circ$.

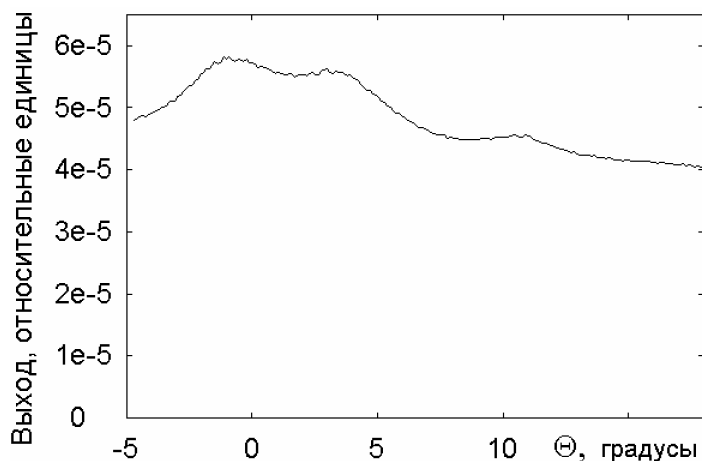


Рис. 10. Модельная ориентационная зависимость показаний детектора, обусловленная механизмом рассеянием на воздухе КТИ электронов с $E_0 = 30$ МэВ из кристалла кремния

Из рисунка видно, что модельная ориентационная зависимость имеет такую форму, как и экспериментальная. Как и на рисунке 9 здесь можно выделить два широких пика, один из которых выше другого. Как и в случае с моделированием спектра рассеянного излучения здесь нет полного согласия экспериментальной и расчетной зависимостей, поскольку нас интересует только физическая природа наблюдаемых ориентационных зависимостей. Тем не менее, как уже отмечалось выше, при использовании достаточно простых мер, например, разнесенного коллиматора, вклад воздуха в показания детектора можно уменьшить как минимум на порядок, и уверенно регистрировать пики, связанные с излучением при каналировании.

Заключение

Наличие необходимого минимума требуемой аппаратуры, проведенные оценки и тестовые измерения позволяют надеяться на успешное выполнение предлагаемых исследований после изготовления и установки подключенной к вакуумной системе ускорителя камеры рассеяния. На первом этапе будет окончательно проверен предлагаемый метод ориентации кристалла по выходу рассеянного излучения, проведен поиск влияния выполнений условий дифракции на выход излучения при каналировании и выполнено измерение угловых и ориентационных зависимостей выхода параметрического рентгеновского излучения при выполнении условий каналирования. Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 05-02-17648) и программы внутренних грантов БелГУ.

Литература

1. Барышевский В.Г., Дубовская И.Я. Сложный и аномальный эффект Доплера для каналированного позитрона (электрона)// ДАН СССР.1976. Т.231.№6. С.1335-1338.
2. Baryshevsky V.G., Dubovskaya I.Ya. Coherent radiation of the channeling positron (electron) // Phys. stat. sol. (b). 1977. v.82. P.403-412.
3. Барышевский В.Г., Градовский О.Т., Дубовская И.Я. О дифракционном излучении осциллятора в периодической среде (эффект Барышевского-Дубовской) // Вестник АН БССР. Сер. физ.-мат.наук.1987. №6. С.77-81.
4. Воробьев С.А., Калинин Б.Н., Пак С., Потылицын А.П. Обнаружение монохроматического рентгеновского излучения при взаимодействии релятивистских электронов с монокристаллом алмаза// Письма ЖЭТФ. 1985. т. 41, вып. 1, С.3-6.
5. Алейник А.Н., Балдин А.Н., Богомазова Е.А., Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Кубанкин А.С., Насонов Н.Н., Науменко Г.А., Потылицын А.П., Шарафутдинов А.Ф. Экспериментальное обнаружение параметрического рентгеновского излучения вдоль скорости релятивистских электронов, движущихся в кристалле вольфрама //Письма в ЖЭТФ. 2004. Т.80. Вып.6. С.447-451.
6. Барышевский В.Г., Дубовская И.Я. Дифракционные явления в процессах спонтанного и коллективного излучения релятивистских заряженных частиц в кристаллах. //Итоги науки и техники. Сер. Пучки заряженных частиц и твердое тело. М.: ВИНТИ. 1991. т. 4, С.129-225.
7. Богданов О.В., Коротченко К.Б., Пивоваров Ю.Л. Угловое распределение дифрагированного рентгеновского излучения при (111) каналировании электронов в Si: влияние зонной структуры энергетических уровней.// Письма в ЖЭТФ. 2007. Т.85. вып.11. С.684-688.
8. Ikeda T., Matsuda Y., Nitta H. and Ohtsuki Y.H. Parametric X-ray radiation by relativistic channeled particles// Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. 1996. v.115. P.380.-383.
9. Matsuda Y., Ikeda T., Nitta H. and Ohtsuki Y.H. Numerical calculation of parametric X-ray radiation by relativistic electrons channeled in a Si crystal// Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. 1996. v.115. P.396-400.
10. Yabuki R., Nitta H., Ikeda T. and Ohtsuki Y.H. Theory of diffracted channeling radiation// Phys. Rev. B. 2001. v.63. 174112
11. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Шатохин Р.А. Использование мозаичных кристаллов для генерации интенсивных пучков рентгеновского излучения //Письма ЖТФ. 2007. Т.33. вып.14. С.87-94.
12. Andersen J.U. and Laesgaard E. Coherent bremsstrahlung and sidebands for channeled electrons// Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B. 1988. v.33. P.11-17
13. Амосов К.Ю., Внуков И.Е., Калинин Б.Н. и др. Влияние эффекта каналирования ультрарелятивистских электронов на спектр когерентного тормозного излучения типа Б. //Письма в ЖЭТФ. 1992. т.55. вып.8. С.587-590.



14. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Каратаева Е.А. О вкладе дифракции реальных фотонов в наблюдаемые спектры параметрического рентгеновского излучения электронов в совершенных кристаллах// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2006. вып. 4. С.72-85.
15. Freudenberger J., Genz H., Morokhovskii V.V., Richter A., Sellschop J.P.L Parametric X rays observed under Bragg conditions: Boost of intensity by factor of two// Phys. Rev. Lett. 2000. V.84. N.2. P.270-273.
16. Shchagin A. V., Pristupa V. I., Khizhnyak N. A. A fine structure of parametric X-ray radiation from relativistic electrons in a crystal //Phys. Lett. A. 1990. V.148. P.485-488.
17. Shvedunov V.I., Ermakov A.N., Karev A.I., Knapp E.A., Sobenin N.P. and Trower W.P. 70 MeV electron racetrack microtrone commissioning // Proceedings of the 2001 Particle Accelerator Conference, Chicago, p.2596-2598.
18. Lackey D., Scwitters R.F. Methods of crystal alignment for the production of coherent bremsstrahlung// Nucl. Instrum. and Meth. 1970. v.81. P.164-172.
19. Калинин Б.Н., Коновалова Е.И., Плешков Г.А., Потылицын А.П., Тарасов В.М., Томчаков В.К., Хаббердыев И. Автоматизированная система ориентирования монокристаллических мишеней в электронном ускорителе // ПТЭ. 1985. № 3, С.31-35.
20. Berman B.L Channeling radiation: A historical perspective// H. Wiedemann (ed.) Electron-Photon Interaction in Dense Media, NATO Science Series, II Mathematics, Physics and Chemistry – Vol. 49. P.7-24. 2002 Kluwer Academic Publishers. Printed in the Netherlands
21. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Нечаенко Д.А., Шатохин Р.А. Влияние мозаичности кристаллов на характеристики параметрического рентгеновского излучения// Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. 2006. Т.744. серия физическая. "Ядра, частицы, поля". вып.3(31). С.51-65.
22. Gary C.K., Fisher A.S., Pantell R.H., Harries J., Piestrup M.A. Channeling of electrons in Si produces intense quasimonochromatic, tunable, picosecond x-ray bursts// Phys. Rev. B. 1990. v.42. No.1 (1990), P.7-14.
23. Schiff L.I. Energy – angle distribution of thin target bremsstrahlung //Phys. Rev. 1951. v.83. P.252-257.
24. Амосов К.Ю., Андреяшкин М.Ю., Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Науменко Г.А, Потылицын А.П., Сарычев В.П. Исследование угловых распределений мягкой компоненты релятивистских электронов вблизи плоскостной ориентации монокристаллов большой толщины// Известия ВУЗов, "Физика". 1991. Т.34. N6. С.70-80.
25. Шатохин Р.А. Драйвер управления униполярным шаговым двигателем от LPT порта с автоматическим переходом на ток удержания. //Схемотехника. 2207. No.6. С.45-47.
26. Тер-Микаэлян М.Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях, Изд. АН АРМ ССР, Ереван, 1969, 459с.
27. Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Потылицын А.П., Исследование характеристик когерентного тормозного излучения электронов в монокристаллах большой толщины //Известия ВУЗов "Физика". 1991.Т.34. N 6. С.21-43.

STATUS OF THE EXPERIMENT ON SEARCH AND INVESTIGATION OF ELECTRON DIFFRACTED CHANNELING RADIATION ON THE RINP MSU MICROTRONE

**D.A. Baklanov¹, I. E. Vnukov¹, V.K. Grishin ², A.N. Ermakov²,
Yu.V. Zhandarmov¹, R. A. Shatokhin¹**

¹Belgorod State University, 14 Studencheskaya str., 308007 Belgorod, Russia,
e-mail: vnukov@bsu.edu.ru

²Research Institute of Nuclear Physics, MSU, Moscow, Russia

The possibility of experimental observation of the diffracted electron channeling radiation energy of 15-40 MeV on the RINP MSU microtrone. A new method of a crystal orientation alignment to the radiation yield under channeling on the electron accelerators of the average energies with the short spill (microtrone, linear accelerator) by the integral characteristics of the soft radiation yield from the thin metal targets is proposed. It provides the ten times reduction of time spending on the orientation. The main part of necessary experimental equipment is prepared and test measurements are taken. It allows in future time to carry out experimental investigation of emission generated under fast electron interaction with streamlined or partially streamlined media.

Key words: channeling, diffraction, crystal, diffracted channeling radiation, experiment, crystal alignment.

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ В НЕМАТИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ

Е. П. Бухели, С. И. Кучеев

Белгородский государственный университет.
Студенческая 14, г Белгород 308007, Россия, e-mail: kucheev@bsu.edu.ru

Экспериментально продемонстрирована возможность детектировать месторасположение нано-размерных механических дефектов поверхности кремния в нематической ячейке поляризационным оптическим микроскопом. Визуализация месторасположения дефекта осуществляется за счет изменения ориентации жидкого кристалла в узкой полоске в окрестности дефекта. Механизм визуализации связан с обеднением поверхности кремния основными носителями заряда под действием электрического поля ионного заряда, накопленного в жидком кристалле и соответствующим перераспределением напряжения приложенного к ячейке между слоем жидкого кристалла и обедненным слоем в кремнии.

Ключевые слова: нематик, кремний, визуализация дефектов, эффект поля, ионы в нематике.

Введение

Одним из видов механических дефектов поверхности кремния являются микро(нано) размерные трещины, царапины, которые могут образовываться при механической обработке поверхности. С увеличением степени интеграции кремниевых приборов нано-размерные дефекты могут значительно уменьшить выход годных. Поэтому к поверхности кремния предъявляются высокие требования, и соответственно, разработка методов контроля поверхности кремния остается актуальной задачей.

Хорошо известны такие высокоразрешающие методы исследования поверхности, как РЭМ (растровая электронная микроскопия), АСМ (атомно-силовая микроскопия). Физические принципы лежащие в основе этих методов хорошо известны, например, в РЭМ получение изображения поверхности основано на особенностях возникновения вторичных электронов, в АСМ изображение строится в соответствии с величиной взаимодействия нано острия с поверхностью. Существенным недостатком оптической микроскопии является дифракционное ограничение, не позволяющее регистрировать дефекты с размерами порядка (и менее) длины волны света. В данной работе в основу физического механизма визуализация нано-размерных дефектов поверхности кремния (их месторасположения) положены особенности формирования обедненного приповерхностного слоя в кремнии в окрестности дефекта. Благодаря соответствующему электрооптическому отклику жидкокристаллического слоя в жидкокристаллической ячейке появляется возможность позиционировать дефекты поверхности при большом поле зрения оптического микроскопа.

Эксперимент

В эксперименте исследовалась поверхность монокристаллического кремния *n*-типа проводимости с удельным сопротивлением 4,5 Ом × см. Поверхность кремния была изучена с помощью РЭМ Quanta 200 3D с целью поиска нано-размерных дефектов (царапин) в окрестности реперной области (СН), которая была предварительно сформирована в виде прямоугольной углеродной пленки размером 100×175 мкм с помощью электронного луча, [1], рис. 1. Необходимо отметить, что микро, а тем более нано-размерные царапины представляют из себя малоконтрастные объекты для наблюдения при данном (сравнимым с увеличением оптического микроскопа) увеличении РЭМ.

Поэтому требуется использовать или большее увеличение РЭМ или использовать другие принципы визуализации, например визуализация в ионном луче. Однако при этом начинает проявляться проблема поиска месторасположения нано-размерного дефекта поверхности.

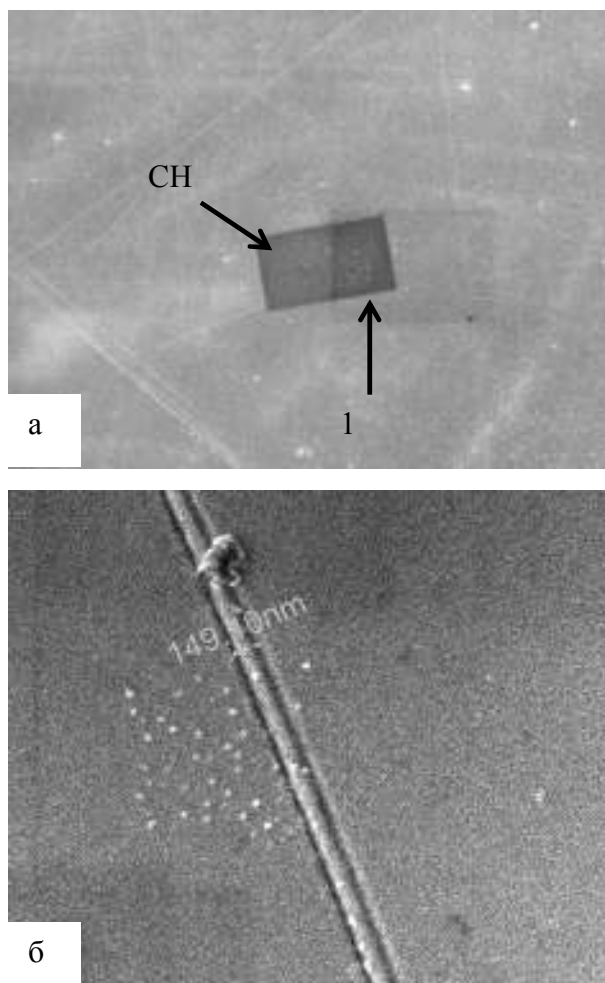


Рис. 1 а) РЭМ ($300\times$) изображение поверхности кремния в окрестности реперной (СН) области.

б) РЭМ ($50000\times$) изображение нано-размерной двойной царапины шириной ~ 150 нм.

Стрелка 1 – ориентировочное месторасположение царапины

Далее образец кремния был использован в качестве подложки в жидкокристаллической ячейке сэндвич типа. Референтной поверхностью в жидкокристаллической ячейке служила поверхность окиси индия (ИТО) с полиимидной пленкой, натертой в одном направлении, которая задавала планарную ориентацию молекул жидкого кристалла. Толщина слоя жидкого кристалла поддерживалась фторопластовыми прокладками и составляла 5 мкм. Использовался нематический жидкий кристалл 5СВ, который заправлялся в ячейку в изотропной фазе за счет капиллярных сил.

Визуализация месторасположения микро(нано)-размерных дефектов в нематической ячейке осуществляется при прикладывании к ячейке переменного напряжения. С целью изучения механизма визуализации переменное напряжение подавалось на ячейку следующим образом. Первоначально плавно увеличивалось от 0 В до напряжения, которое соответствует переходу Фредерикса. Далее изменялось ступенчато, увеличиваясь каждый раз на 0,1 вольт. При каждом последующем значении напряжения ячейка выдерживалась до момента начала визуализации дефекта. После этого ячейка электрически закорачивалась на 20 минут, а затем напряжение вновь увеличивалось на 0,1 вольт от предыдущего значения и проводилось новое измерение момента времени начала визуализации

дефекта. Электрическое закорачивание ячейки требовалось для релаксации объемного заряда. В ходе эксперимента контролировалась светочувствительность интересующего участка нематической ячейки. С этой целью данный участок ячейки освещался He-Ne ($0,63$ мкм) лазером. Переориентация нематика в области лазерного пятна на поверхности кремния указывала на то, что в данном месте ячейки в приповерхностном слое кремния формируется обедненный основными носителями заряда слой [2].

Рис. 2 демонстрирует визуализацию микро (нано)-размерных дефектов в нематической ячейке. Визуализация наступает после соответствующей временной выдержки нематической ячейки под действием данной величины напряжения (см. рис. 3 кривая 1). Хорошо видно, что визуализация месторасположения механических дефектов осуществляется благодаря изменению ориентации нематика в узкой полоске прилегаю-

шей к данному дефекту (см. рис. 1, в). Одновременно с началом визуализации дефектов появляется светочувствительность ячейки. Однако в области непосредственно прилегающей к дефекту (в области полосок) светочувствительность ячейки отсутствует.

Заметно явное преимущество в контрасте изображения полученного в нематической ячейке по сравнению с изображением полученным в РЭМ при сравнимых увеличениях (рис. 1, а и рис. 2, б). Более того, на рис. 2 стрелка 2 указывает на дефект, который уверенно визуализируется в нематической ячейке, однако не был разрешен с помощью РЭМ. По всей видимости, в данном случае проявился недостаток РЭМ, связанный с зарядкой исследуемой поверхности электронным лучом и соответствующим подпылением этого заряженного участка углеродной пленкой [3], что ухудшает контрастность изображения.

Рис. 3 (кривая 1) демонстрирует типичную зависимость периода времени действия напряжения приложенного к ячейке, которое необходимо для начала визуализации наноразмерного дефекта. Принимая во внимание, что временная задержка между моментом включения напряжения и началом визуализации трещин (рис.2 кривая 1) значительно превышает характерное время классической реакции нематика на внешнее поле [4], мы связываем механизм визуализации дефекта с накоплением ионных зарядов в жидком кристалле и влиянием этих зарядов на поверхностную проводимость кремния посредством электрического поля (эффект поля). Вследствии электрической несимметричности жидкокристаллической ячейки (разные материалы по типу проводимости, разные электрохимические реакции на границах кремний/жидкий кристалл и ИТО/жидкий кристалл, а также наличие контакта металл/кремний) переменное напряжение, приложенное к ячейке частично выпрямляется. Это вызывает дрейф ионов в жидком кристалле. Накапливающийся ионный заряд у поверхности кремния, благодаря эффекту поля, вы-

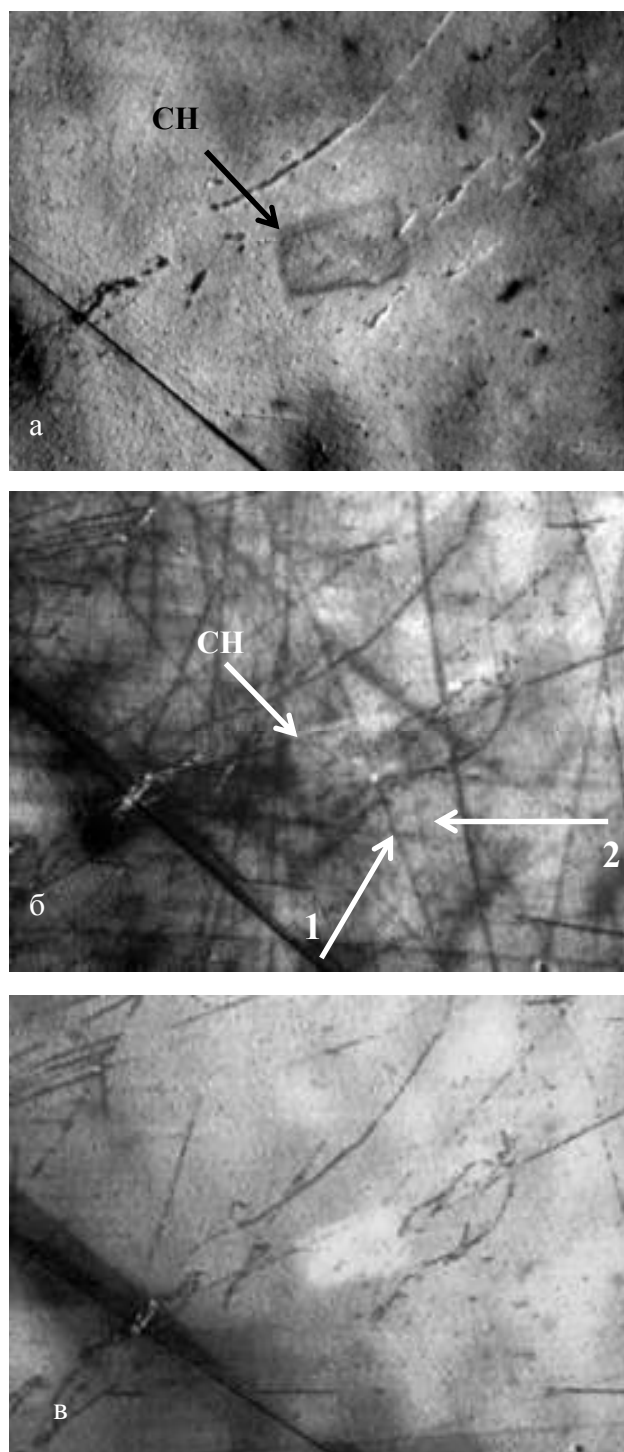


Рис.2. Визуализация микро(нано)размерных дефектов поверхности кремния в нематической ячейке. Напряжение, В: а-0; б-2,1; в-3,1. Частота $2 \cdot 10^4$ Гц.

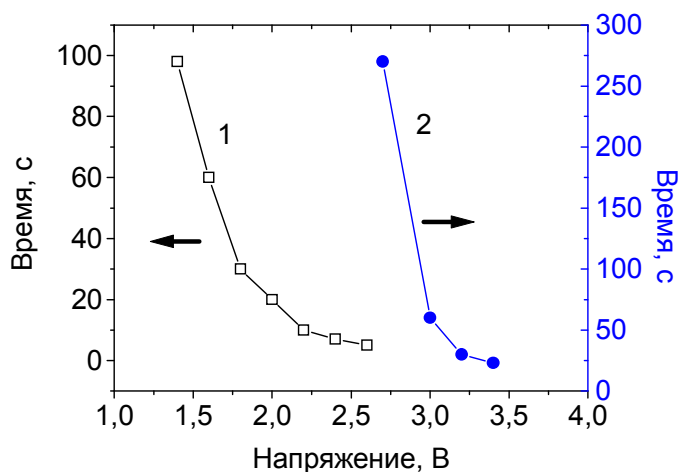


Рис.3. 1 – Требуемая длительность действия напряжения приложенного к ячейке для начала визуализации нано-размерного дефекта.

2 – Типичная зависимость периода времени визуализации дефекта от приложенного напряжения.
Частота $2 \cdot 10^4$ Гц.

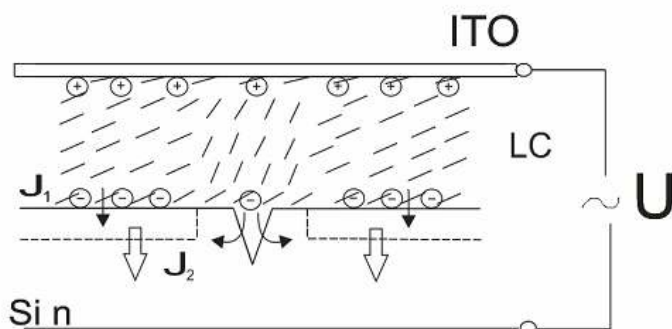


Рис.4. Переориентация нематика в окрестности дефекта поверхности кремния.

Пунктирная линия – граница обедненного приповерхностного слоя;

J_1 – ток утечки из жидкого кристалла в кремний;

J_2 – ток оттока от поверхности основных носителей заряда в кремнии

зывает формирование высокоомного обедненного основными носителями заряда приповерхностного слоя, рис. 4. На этом высокоомном слое падает часть внешнего напряжения. Однако в области дефекта поверхность кремния более развита, поэтому токи утечки J_1 преобладают над токами оттока J_2 носителей в объем кремния, что препятствует (частично или полностью) формированию обедненного слоя. Поэтому в непосредственной окрестности дефекта приложенное напряжение к ячейке падает в основном на слое жк, вызывая дополнительную (к уже имеющейся по всей ячейке) переориентацию нематика, рис. 4. В области дефекта светочувствительность не регистрируется, что подтверждает отсутствие в этом месте обедненного слоя в кремнии, рис. 4.

На рис. 3 кривая 2 демонстрирует зависимость времени визуализации дефекта от величины напряжения прикладываемого к ячейке. На приведенной кривой видно, что начиная приблизительно с 2,75 В временной интервал, в течении которого имеет место визуализация дефектов начинает резко сокращаться. По истечении этого временного интервала визуализация дефектов исчезает, рис.1 г, однако светочувствительность ячейки остается. Светочувствительность ячейки появляется

также и в области дефектов. Исчезновение визуализации дефектов (но при наличии светочувствительности ячейки), означает, что 1) процесс накопления заряда происходит весь период времени пока действует напряжение и 2) толщина обедненного слоя увеличивается и оказывается больше чем глубина микро (нано)-размерных дефектов.

Заключение

Таким образом, в работе показано, что нано-размерные дефекты поверхности кремния могут быть визуализированы оптическим микроскопом в нематической ячейке. Механизм визуализации связан с обеднением поверхности кремния под действием электрического поля ионного заряда накапливающегося в жидком кристалле у поверх-

ности кремния. Благодаря более развитой поверхности дефекта обеднение в этом месте поверхности отсутствует, поэтому приложенное к ячейке напряжение в области дефекта почти полностью падает на слое жк. Переориентированный нематик в окрестности дефекта визуализирует месторасположение этого дефекта на поверхности кремния в поляризованном свете. Очевидным преимуществом метода является возможность охватывать большое поле исследуемой поверхности оптическим микроскопом. Метод отличается простотой и не требует дорогостоящего оборудования, но при этом одновременно демонстрирует высокий контраст и чувствительность при сравнимых увеличениях РЭМ и оптического микроскопа.

Авторы благодарят Центр коллективного пользования оборудованием Белгородского государственного университета за предоставленную возможность исследовать образцы с помощью РЭМ. Работа частично выполнена в рамках внутривузовского гранта Белгородского государственного университета.

Литература

1. Kucheev S. I., Litvin P.M., Tkach V.N., Chigrinov V.G. EuroDisplay'2007, p. 302-305.
2. Маллер Р., Кейминс Т. Элементы интегральных схем: Пер.с англ. М.: Мир, 1989. - 630 с.
3. Д. Голдстейн, Х. Яковиц. Практическая растровая электронная микроскопия. М.: Мир, 1978, 250 с.
4. Л. М. Блинов. Электро-и магнитооптика жидких кристаллов. М.: Наука, 1978, 335с.

DETECTION OF NANO-SCALING MECHANICAL DEFECTS ON SILICON SURFACE IN NEMATIC CELL

E.P. Bucheli, S.I. Kucheev

Belgorod State University
Studencheskaya 14 str, Belgorod 308007, Russian Federation

The possibility to detect the nano-scaling mechanical defects on silicon surface in nematic cell with polarizing microscopy is demonstrated experimentally. The visualization of local position of defects is due to the change of liquid crystal molecules orientation within thin bond in the vicinity of the defects. Physical mechanism of visualization is associated with silicon surface depletion by major charge carriers under electric field of ions collected in liquid crystal and with subsequent redistribution of applied voltage between liquid crystal and depleted layers.

Key words: nematic, silicon, visualization of defects, field effect, ions in nematic.

КВАНТОВЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ДЛЯ КЛАССИЧЕСКОЙ ИНТЕГРИРУЕМОЙ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ДВУХЪЯМНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Н.А. Чеканов, Е.В. Шевченко

Белгородский государственный университет,
Студенческая 14, 308007, Белгород, Россия
chekanov@bsu.edu.ru, eug_shev@mail.ru

Для квантовой системы с C_{2v} симметричным гамильтонианом, поверхность потенциальной энергии которого имеет два локальных минимума, решена задача на собственные значения. Построены функция распределения расстояний между соседними уровнями, спектральная жесткость Дайсона, а также узловые линии для некоторых волновых функций. Полученные результаты сопоставлены с теоретическими предсказаниями для регулярных и хаотических классических систем.

Ключевые слова и фразы: детерминированный хаос, спектр, волновые функции, функции распределения расстояний между соседними уровнями энергии, нодальная структура волновых функций.

1. Открытие А. Пуанкаре в конце XVIII века динамического хаоса в классических системах и его интенсивное исследование в последние, примерно, три десятилетия стимулировали также поиски его проявлений в характеристиках соответствующего квантового аналога (см., например, [1-3]).

Как известно, для консервативных гамильтоновых систем с двумя степенями свободы существование классического хаоса связано с отсутствием второго интеграла движения, в случае же интегрируемых систем этот интеграл имеется, и классическое движение является регулярным. В квазиклассическом приближении М. Берри и М. Табором [4] было доказано, что если классическая система является интегрируемой, то функция распределения $p(s)$ расстояний $s = E_{j+1} - E_j$ между соседними значениями спектра $\{E_j\}$ ее квантового аналога имеет пуассоновский вид $p(s) = \exp(-s)$. Для квантовых аналогов классических неинтегрируемых систем по аналогии со статистической теорией сложных систем [5] была выдвинута гипотеза [6], согласно которой функция распределения $p(s)$ расстояний s между соседними уровнями имеет вигнеровский вид $p(s) = \pi s / 2 \cdot \exp(-\pi s^2 / 4)$. Как легко видеть, при сближении энергетических уровней $s \rightarrow 0$ для распределения Вигнера $p(s) \rightarrow 0$, а для распределения Пуассона $p(s) \rightarrow 1$, что означает отталкивание уровней в первом случае и кластеризацию уровней во втором.

Что касается более чувствительной квантовой характеристики как волновая функция, то для поиска квантовых проявлений характера классического движения исследуют нодальную картину или, другими словами, узловую структуру волновых функций $\psi(x, y)$, т.е. семейство линий, на которых $\psi(x, y) = 0$. Вполне очевидно, что для сепарабельных, а, значит, и интегрируемых систем эти линии пересекаются, но для неинтегрируемых в классическом пределе систем ожидаются так называемые «избегнутые пересечения» в нодальной картине волновых функций в соответствии с поведением классических траекторий в фазовом пространстве.

Реальная ситуация на самом деле более сложная, так как во многих классических системах даже с двумя степенями свободы, поверхности потенциальной энергии (ППЭ) которых имеют несколько локальных минимумов, при одной и той же энергии

сосуществуют в разных потенциальных ямах два типа движений: хаотическое в одной и регулярное во второй, это так называемые смешанные состояния [7]. Кроме того, во многих системах классический хаос не развивается в полной мере (см., например [8-10]), о чем можно судить по сечениям Пуанкаре, а также может происходить возврат от хаотического движения опять к регулярному, то есть реализуется переход регулярность-хаос-регулярность [11]. Следует отметить, что строгих математических теорем о взаимосвязи характера движения в классической системе (интегрируемая или неинтегрируемая система) и свойствами спектра и волновых функций ее квантового аналога, к сожалению, в настоящее время нет, поэтому основным способом установления этой связи являются прямые и крайне сложные численные или символьно-численные вычисления.

В предыдущих работах [8-10] были представлены некоторые результаты для двумерной квантовой C_{2V} симметричной системы, параметры гамильтониана которой выбраны так, что эта система при классическом описании допускала хаотический режим движения. В настоящей работе исследована та же система, но параметры ее гамильтониана таковы, что она при классическом описании является интегрируемой.

2. Рассмотрим классическую систему, описываемую функцией Гамильтона в виде

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y), \quad (1a)$$

$$V(x, y) = \frac{a}{2}(x^2 + y^2) - \frac{a'}{2}x^2 + bx^2y^2 + c(x^2 + y^2)^2. \quad (1b)$$

где (p_x, p_y) и (x, y) – канонически сопряженные импульсы и координаты, соответственно, a, a', b, c – параметры; а также квантовый аналог системы (1), оператор Гамильтона \hat{H} которой получается из классического выражения (1) известной заменой: $p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i \partial / \partial x$, $p_y \rightarrow \hat{p}_y = -i \partial / \partial y$. Система (1) обладает симметрией точечной группы C_{2v} , которая соответствует группе поворотов и поворотов с отражениями прямоугольника и имеет четыре неприводимых представления: A_1, A_2, B_1, B_2 .

Число особых точек потенциальной функции (1б) зависит от выбора параметров. В данной работе приведено исследование системы (1) с параметрами

$$a = 1,849, \quad a' = 8,257825, \quad b = 0, \quad c = 1, \quad (2)$$

при которых ППЭ (1б) имеет два локальных минимума и одну седловую точку в начале координат. При этом классическое движение является финитным ($c > 0$), а при квантовом рассмотрении спектр является дискретным.

Наличие седловой точки на ППЭ (1б) свидетельствует о присутствии на этой поверхности областей с отрицательной гауссовой кривизной, что указывает на возможность существования классического хаоса в системе (1). Однако, при выборе параметров системы (1) в виде (2) движение является регулярным, так как система (1) имеет, кроме энергии, второй интеграл движения

$$I = (x p_y - y p_x)^2 + a' \left(\frac{p_x^2}{2} + x^4 + x^2 y^2 + \frac{a - a'}{2} x^2 \right). \quad (3)$$

Кроме того, нами найдено, что система (1) является не только интегрируемой, но и сепарабельной в вырожденных эллиптических координатах

$$x = \sqrt{\frac{a'}{2}} \operatorname{ch}(u) \cdot \cos(v), \quad y = \sqrt{\frac{a'}{2}} \operatorname{sh}(u) \cdot \sin(v), \quad (4)$$

где $u \in [0, \infty)$, $v \in [0, 2\pi)$ и фокусами в точках $(\mp\sqrt{a'/2}, 0)$, в которых функция Гамильтона (1) принимает сепарабельный вид

$$H(p_u, p_v, u, v) = \frac{1}{2}(p_u^2 + p_v^2) + V(ch u) + V(\cos v),$$

где

$$V(t) = \frac{a'}{8}(a'^2 - a'a - 4E)t^2 + \frac{a'^2}{8}(a - 2a'a)t^4 + \frac{a'^3}{8}t^6, \quad t = chu, \cos v.$$

Одним из методов исследования характера классического движения гамильтоновой системы является известный метод сечений Пуанкаре. На рис. 1 показаны сечения Пуанкаре системы (1), построенные для значений энергии вблизи седловой точки и для значений, находящихся в диапазоне вычисленных нами энергетических уровней квантового аналога системы (1). Как видно из рис. 1, пересечения классических траекторий с поверхностью сечения (x, p_x) для любых значений энергии образуют гладкие замкнутые кривые. Таким образом, классические траектории лежат на инвариантных торах, что подтверждает регулярность системы (1).

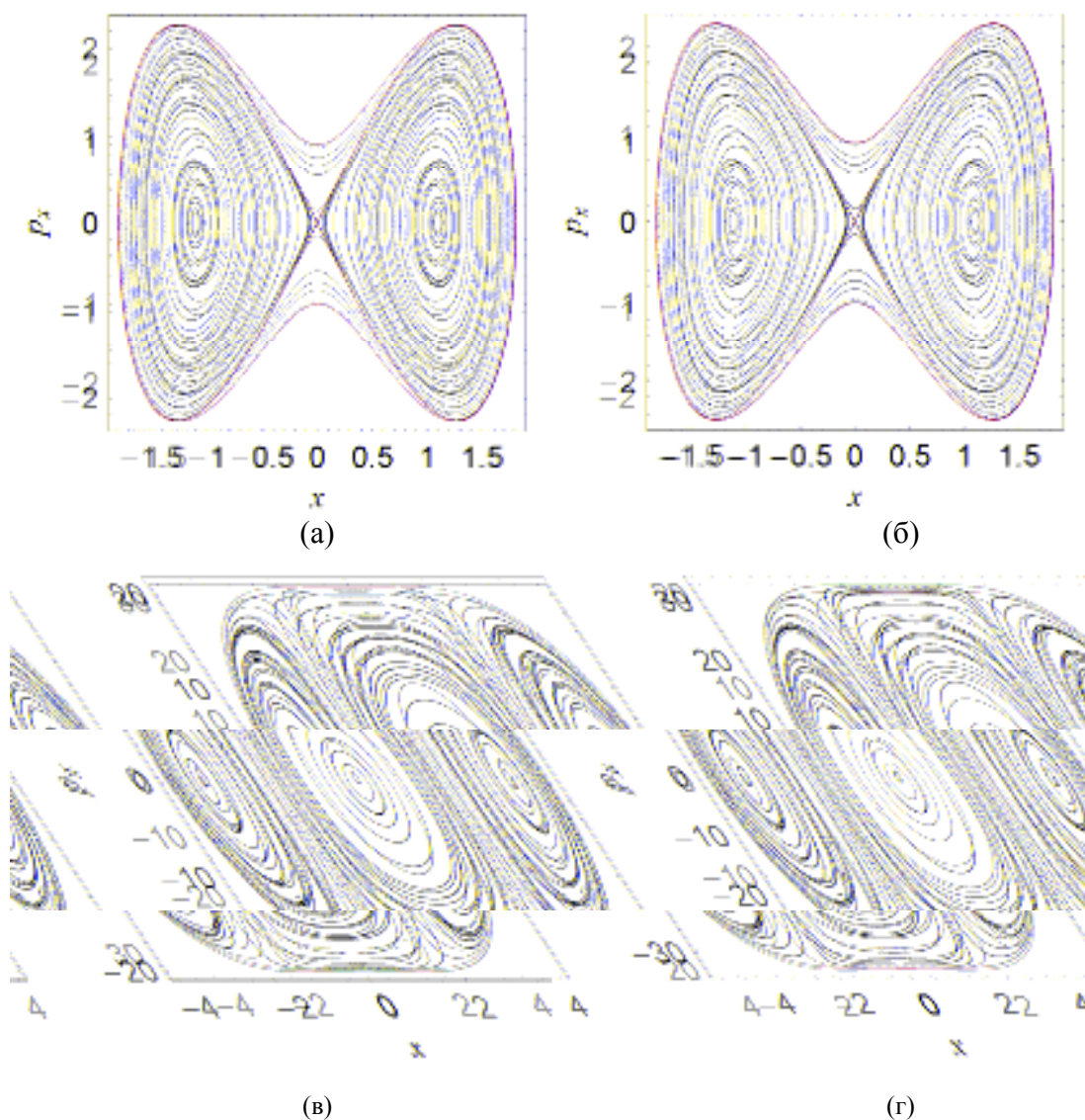


Рис. 1. Сечения Пуанкаре, построенные для системы (1) при значениях энергии: (а) $E=0$, (б) $E=0,5$, (в) $E=200$, (г) $E=530$.

3. Квантовый аналог гамильтониана (1) имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{a}{2} (x^2 + y^2) - \frac{a'}{2} x^2 + bx^2 y^2 + c(x^2 + y^2)^2. \quad (5)$$

Для вычисления спектра и волновых функций требуется решить задачу на собственные значения:

$$\hat{H}(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y). \quad (6)$$

Собственные состояния гамильтониана (6) были вычислены нами при помощи процедуры диагонализации гамильтоновой матрицы $\langle n'_1, n'_2 | \hat{H} | n_1, n_2 \rangle$, полученной в наборе базисных функций двумерного вырожденного гармонического осциллятора

$$\psi(x, y) = \sqrt{\frac{\omega}{2^{n_1+n_2} n_1! n_2! \pi}} \exp\left\{-\frac{\omega}{2}(x^2 + y^2)\right\} H_{n_1}(x\sqrt{\omega}) H_{n_2}(y\sqrt{\omega}), \quad (7)$$

где $H_n(t)$ – полиномы Чебышева-Эрмита, ω – варьируемый параметр.

Базисные функции для каждого из неприводимых представлений группы C_{2v} определяются значениями квантовых чисел n_1 и n_2 , как показано в табл. 1.

Таблица 1

Классификация базисных функций (7) в соответствии с неприводимыми представлениями группы симметрии C_{2v} .

Тип симметрии	n_1	n_2	n'_1	n'_2
A_1	<i>чет</i>	<i>чет</i>	<i>чет</i>	<i>чет</i>
A_2	<i>нечет</i>	<i>нечет</i>	<i>нечет</i>	<i>нечет</i>
B_1	<i>нечет</i>	<i>чет</i>	<i>нечет</i>	<i>чет</i>
B_2	<i>чет</i>	<i>нечет</i>	<i>чет</i>	<i>нечет</i>

Явный вид матричных элементов гамильтоновой матрицы $\langle n'_1, n'_2 | \hat{H} | n_1, n_2 \rangle$ приведен в работах [8-10]. При численном решении уравнения Шредингера (6) элементы гамильтоновой матрицы были упорядочены по значению главного квантового числа $N = n_1 + n_2$, $N = 0, 1, \dots, N_{\max}$ и было получено 2211 уровней энергии типа A_1 и 2145 уровней энергии для каждого из типов A_2, B_1, B_2 . Из них около 40% уровней каждого типа вычислены с погрешностью $\Delta < 0,1 \cdot s_{\min}$, где s_{\min} – минимальное расстояние между соседними энергетическими уровнями в рассматриваемом диапазоне энергий $V_{\min} \approx -2,567 < E < 530$, которые были приняты для дальнейшего построения функций распределения $p(s)$.

4. Согласно гипотезе об универсальном поведении флуктуаций энергетических спектров [6], распределение расстояний между соседними энергетическими уровнями и спектральная жесткость Дайсона $\Delta_3(L)$ описываются теоретическими кривыми, различными для регулярных и хаотических систем.

Для анализа статистических свойств энергетического спектра был использован нормализованный спектр, полученный из исходного при помощи процедуры «развертки» [12], а статистика Дайсона $\Delta_3(L)$ вычислена нами при помощи процедуры, описанной в [6,13].

В результате получены подобные результаты для функции $p(s)$ и жесткости $\Delta_3(L)$ для всех типов симметрии исследуемой задачи. На рис. 2 изображены спектральные характеристики, полученные для типов A_1 и B_1 . Сплошной линией обозначены теоретические предсказания для регулярных систем, а пунктирной – для хаотических систем, свойства флуктуирующей составляющей спектра которых описываются гауссовым ортогональным ансамблем матриц со случайными элементами.

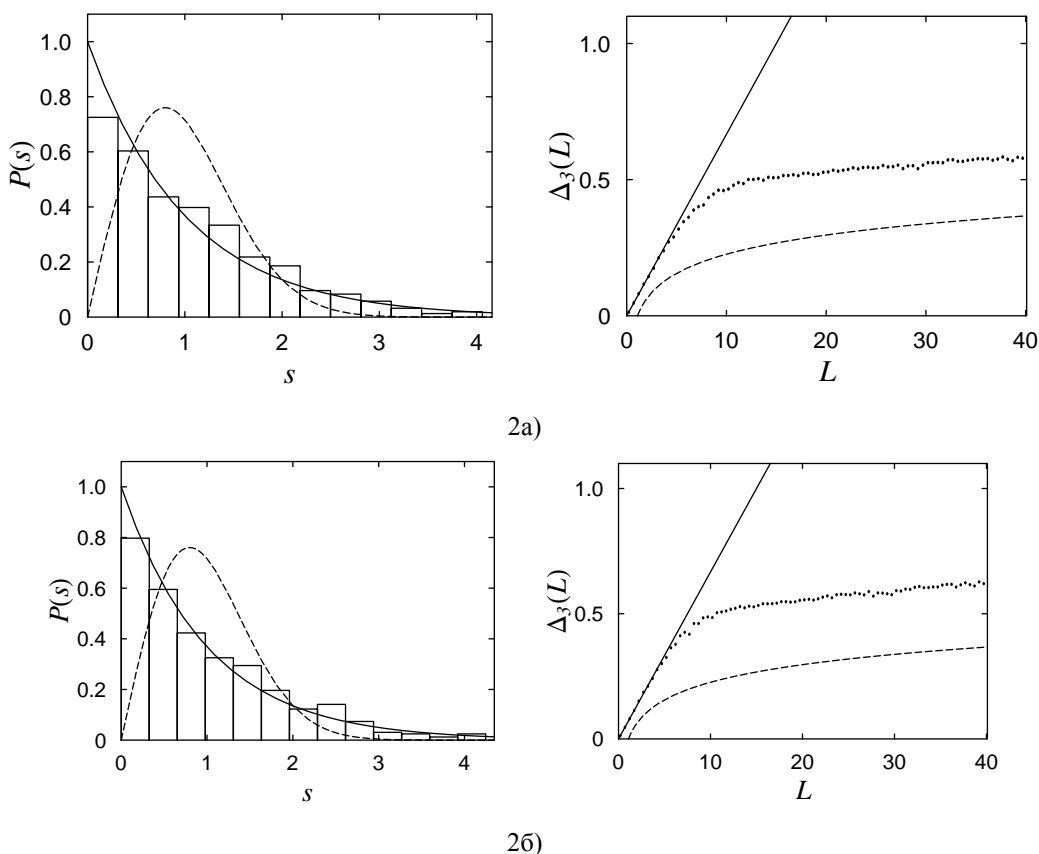


Рис. 2. Распределение расстояний между соседними энергетическими уровнями (слева) и спектральная жесткость Дайсона (справа) для уровней типа A_1 (2а), B_1 (2б).

Проведенный анализ при квантово-механическом рассмотрении показал хорошее согласие статистических свойств спектра уравнения Шредингера (6) с а priori предсказаниями: распределение $p(s)$ хорошо описывается распределением Пуассона, а значения статистики Дайсона $\Delta_3(L)$ лежат на прямой $L/15$ до некоторого значения при $L_{\max} \geq 0$, после чего происходит насыщение статистики $\Delta_3(L)$ в соответствии с квазиклассической теорией [14].

5. Методом диагонализации были вычислены также волновые функции уравнения Шредингера (6) и для некоторых уровней энергии была исследована узловая структура или нодальная картина ($\psi(x, y) = 0$) соответствующей волновой функции.

Узловая структура волновых функций всех типов подобна изображенным на рис. 4 для состояний A_1 – и A_2 – типов. Видно, что нодальные линии расположены вдоль координатных эллиптических координат (4) (см. рис. 3): $u = const$ и $v = const$.

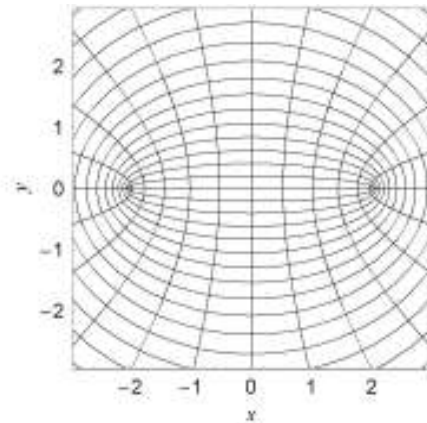


Рис. 3. Координатные линии (софокусные эллипсы и гиперболы) переменных (4)

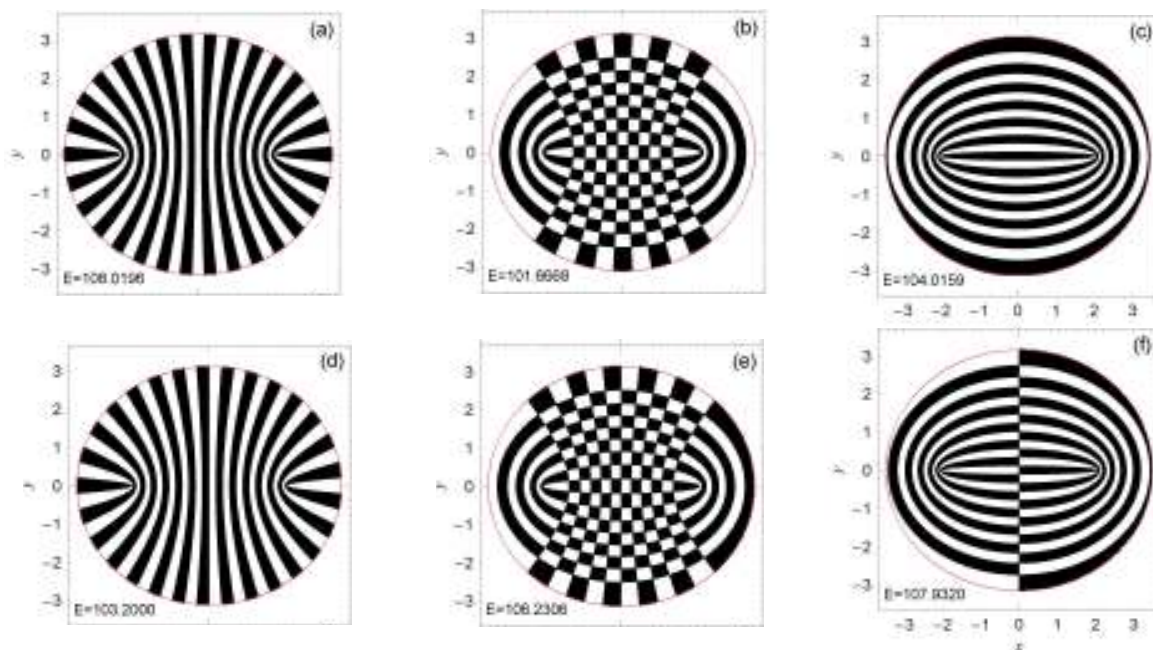


Рис. 4. Структура волновых функций уравнения Шредингера (6) для состояний A_1 – типа (a, b, c) и состояний A_2 – типа (d, e, f). Темные и светлые области отвечают разным знакам волновых функций

6. Таким образом, для рассмотренной системы численно вычисленные квантовые характеристики: функции распределения $p(s)$, спектральная жесткость Дайсона $\Delta_3(L)$ и нодальная картина $\psi(x, y) = 0$ полностью подтверждают их эвристические предсказания, если эта система является интегрируемой и сепарабельной при классическом описании.

Литература

1. Gutzwiller M. C. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. New York: Springer, 1990. – 432 p.
2. М. Табор. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике. – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 318 с.
3. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос.- М.: Физматлит, 2004.- 374 с.
4. Berry M., Tabor M. Level clustering in the regular spectrum// Proc. R. Soc. Lond., v.A365. – 1977. – p.375-394.
5. Дайсон Ф. Статистическая теория энергетических уровней сложных систем. М.: ИЛ. – 1963. – 124с.
6. Bohigas O., Giannoni M.J. Chaotic motion and random-matrix theory. Lecture Notes in Physics. – New-York Springer-Verlag: v. 209. – 1984. – p. 1871-1969.
7. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Тарасов В.Н., Инопин Е.В., Чеканов Н.А. Стохастическая ядерная динамика// Физика элем. частиц и атом. ядра. Т.20, вып.4. – 1989. – с.878-929.



8. Чеканов Н.А., Шевченко Е.В. Статистические свойства спектра и волновых функций двумерного C_{2v} симметричного гамильтониана // Научные ведомости БелГУ, сер.: физико-математические науки, №6(37), вып.13. –2007. – с.116-124.
9. Чеканов Н.А., Шевченко Е.В. Флуктуации спектра и узловая структура собственных функций некоторых двумерных квантовых систем: численное моделирование// Первая международная конференция "Математическое моделирование и дифференциальные уравнения", ред. В.И. Корзюк, С.В. Лемешевский, Е.С. Чуб. Институт математики НАН Беларуси, Минск, 2007. с.61-63.
10. Чеканов Н.А., Шевченко Е.В. Свойства спектра и волновых функций двумерного C_{2v} -симметричного гамильтониана// Вестник ВорГТУ, т. 4, № 7. – 2008. – с.18-21.
11. Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Tarasov V.N., Chekanov N.A. The transition regularity-chaos-regularity and statistical properties of wave function. Phys. Lett., 1990. – v. A144, n. 8, 9. – p. 459-461.
12. T.A. Brody et.al. Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations// Rev. of Mod. Phys. – v.53.No.3. – 1981. – p.385-479.
13. Berry M.V. Classical Chaos and Quantum Eigenvalues. Order and Chaos in nonlinear physical systems (ed. S. Lundquist, N. March and M. Tosti). – New York and London: Plenum Press, 1988. – p. 340-348.
14. Berry M.V. Semiclassical theory of spectral rigidity. Proc. R. Soc. – 1985, v. A400. – p. 229-251.

QUANTUM MANIFESTATION FOR THE CLASSICAL INTEGRABLE TWO-DIMENSIONAL SYSTEM WITH DOUBLE-WELL POTENTIAL

N.A. Chekanov and E.V. Shevchenko

Belgorod State University,
308007, Belgorod, Studencheskaj Str., 14, Russia
chekanov@bsu.edu.ru, eug_shev@mail.ru

For the quantum system with the C_{2v} symmetric Hamiltonian those potential surface energy has two local minima the eigen problem is solved. The distribution function of spacing between the nearest-neighbor energy levels, the Dyson's spectral rigidity and the nodal picture for some wave function are constructed. Results obtained are compared with theoretical predictions for the regular and chaotic classical systems.

Key words and phrases: deterministic chaos, spectrum, wave functions, distribution function of spacing between the nearest-neighbor energy levels, nodal picture of the wave functions.

СИНТЕЗ И АНАЛИЗ ОПТИМАЛЬНЫХ РЕШАЮЩИХ ПРАВИЛ СЕЛЕКЦИИ ЦЕЛЕЙ В ОБЛАКЕ СЛУЧАЙНЫХ РАССЕИВАТЕЛЕЙ ПРИ ПОЛНОМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОМ ЗОНДИРОВАНИИ ПРОСТРАНСТВА

Б.В. Храбростин¹⁾, М.М. Сапов²⁾, Д.Б. Храбростин³⁾

¹⁾ Белгородский государственный университет, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

²⁾ ОАО «Экспериментальный завод», 196143, г. Санкт-Петербург, пр. Ю. Гагарина, 34

³⁾ Белгородский государственный университет, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Проведен синтез решающего правила селекции цели заданного класса в облаке случайных рассеивателей при полностью случайных моделях соответствующих поляризаационных векторов рассеяния (ПВР). Принципиально новым является использование различия рассеивающих свойств цели и пассивной помехи. При этом решающее правило селекции представляет собой фильтр для области локализации распределения ПВР цели заданного класса в поляризаационном пространстве. Получены аналитические выражения для оценки показателей качества селекции и анализа механизма влияния на них различия рассеивающих свойств цели и помехи, а также частотных и энергетических различий отраженных сигналов. Приведены результаты натурального эксперимента, подтверждающие возможность обнаружения и распознавания (селекции) неподвижной наземной цели заданного класса на фоне отражений от ПП и других объектов, находящихся в одном разрешаемом объеме с целью, при отношении сигнал/помеха примерно равных единице.

Ключевые слова: поляризаационное пространство, обнаружение и распознавание, теория, натуральный эксперимент.

Введение

Теория и техника радиолокации в основном построена на использовании временных, пространственных и частотных параметров сигналов [1-4, 9, 21]. В то же время использованию рассеивающих свойств объектов разных классов для повышения информативности и помехозащищенности радиолокационных станций (РЛС) уделяется неоправданно мало внимания.

В статье дано теоретическое обоснование и экспериментальное подтверждение принципиальной возможности селекции, т.е. обнаружения и распознавания, объекта заданного класса в условиях, при которых в традиционной радиолокации практически приемлемое решение неизвестно. В рамках такого обоснования заданный класс объектов определяется [17] представительной выборкой одинаково ориентированных в пространстве подобных по форме объектов с заданным диапазоном изменения размеров и заданным законом распределения проводимости по их отражающим поверхностям. Полагаем, что совместные распределения ортогонально поляризованных компонентов радиолокационных сигналов, принимаемых в процессе полного поляризаационного зондирования объектов, определяются в поляризаационном пространстве [17 – 20, 22], математической моделью которого может служить гильбертово пространство, то есть комплексное (C^n) линейное пространство со скалярным произведением, являющееся полным метрическим пространством [5].

Для осознания роли информации о рассеивающих свойствах объектов селекция цели рассматривается на фоне наиболее изученных случайных рассеивателей в виде облака дипольных отражателей (ОДО) при отсутствии или несущественных доплеровских различиях соответствующих сигналов. Синтез решающего правила селекции, которое носит прикладной характер, проводится на основе дискретной выборки при полностью случайных моделях ПВР цели и ОДО. При анализе подробно рассматрива-



ется селекция по непрерывной реализации полностью известного ПВР, цели заданного класса, т.к. этот случай позволяет наглядно проследить факторы, определяющие качество, а также предельные возможности обнаружения при таком способе радиолокации.

1. Селекция по дискретной выборке фиксированного объема при полностью случайных моделях ПВР цели и ОДО

Решаемую задачу селекции цели заданного класса в ОДО сформулируем как задачу проверки гипотезы о наличии в данном объеме разрешения только дипольной помехи (гипотеза H_0), либо совокупности диполей и обнаруживаемой цели (гипотеза H_1) на протяжении всего времени наблюдения.

Зондирование пространства осуществляется импульсной РЛС так, что за фиксированное время наблюдения T производится N отсчетов ПВР данного объема разрешения. Единичный отсчет ПВР представим в виде комплексного вектора

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{S}(t_i) = \alpha_0 \mathbf{S}_{ц}(t_i) + \mathbf{S}_{д}(t_i) + \mathbf{S}_{ш}(t_i), \quad (1.1)$$

где $\mathbf{S}_{ц}(t_i)$ и $\mathbf{S}_{д}(t_i)$ – выборочные значения ПВР цели и совокупности дипольных отражателей, хаотически расположенных в разрешаемом объеме, в момент времени t_i ; $\mathbf{S}_{ш}(t_i)$ – вектор, компонентами которого являются выборочные значения комплексных амплитуд собственных шумов соответствующих каналов приема РЛС в момент времени t_i (ПВШ – поляризационный вектор шумов приемных каналов);

$$\alpha_0 = \begin{cases} 0, & \text{в случае справедливости гипотезы } H_0; \\ 1, & \text{в случае справедливости гипотезы } H_1. \end{cases}$$

Решающее правило для проверки гипотез в данном случае будет определяться отношением условной плотности вероятности распределения суммарного ПВР в случае наличия цели (гипотеза H_1) к условной плотности вероятности распределения суммарного ПВР в случае отсутствия цели (гипотеза H_0).

При определении законов распределения слагаемых в (1.1) и соответствующих условных распределений целесообразно учесть следующее. Предыдущие исследования [6, 10, 17 – 20] закономерностей рассеяния электромагнитных волн на объектах с различными электрофизическими характеристиками позволяют (для данной работы) сделать два важных вывода:

- распределения ПВР различных, представляющих практический интерес, классов объектов, включая пассивные и активные помехи, локализуются в компактных подпространствах различных размерностей (областях локализации) поляризационного пространства [10, 17], вероятностная мера пересечения которых равна нулю;

- поскольку области локализации определяются первыми двумя моментами распределений и не пересекаются, а моменты более высоких порядков определяют лишь степень концентрации распределений ПВР внутри областей, то при решении большинства практических задач обнаружения, селекции, оценки координат и распознавания целей на фоне помех моменты более второго порядка не учитывать не только можно, но и целесообразно.

Принимая во внимание эти выводы, законы распределения слагаемых в выражении (1.1) и соответствующих условных плотностей вероятностей будем полагать обобщенными нормальными [25, 26] (имея в виду и вырожденный случай). Кроме того, считаем, что соседние по времени отсчеты ПВР (1.1) некоррелированы. Зная период корреляции обрабатываемых сигналов, это обеспечить несложно. Можно показать, что математические ожидания ПВР (1.1) для случаев $\alpha_0 = 0$ и $\alpha_0 = 1$ будут равны нулю. Кроме того, слагаемые, входящие в (1.1), можно полагать независимыми, поэтому ус-

ловные плотности распределения вероятностей ПВР для случаев $\alpha_0 = 0$ и $\alpha_0 = 1$ будут равны произведениям плотностей распределения вероятностей соответствующих слагаемых. Поляризационно-ковариационные матрицы (ПКМ) соответствующих ПВР для рассматриваемых условий селекции цели представляются в виде:

$$\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}_д + \mathbf{M}_ш; \quad \mathbf{M}_1 = \mathbf{M}_ц + \mathbf{M}_д + \mathbf{M}_ш, \quad (1.2.)$$

где $\mathbf{M}_ц$, $\mathbf{M}_д$, $\mathbf{M}_ш$ – ПКМ ПВР цели заданного класса, совокупности диполей, находящихся в разрешаемом объеме, и ПВШ приемных каналов.

ПКМ (1.2) считаем априори известными. В частности, ПКМ ПВР целей могут быть определены расчетным или экспериментальным путем, а ПКМ ПВР помех могут быть оценены в процессе обзора пространства. Методика и результаты таких оценок обсуждаются в работах [10, 15- 20].

При определении закона распределения выборки для каждой из рассматриваемых гипотез будем полагать, что отношение сигнал/помеха и сигнал/шум подчиняются следующим условиям:

$$q_{сп}^2 = \frac{Sp\mathbf{M}_ц}{Sp\mathbf{M}_д} \ll 1; \quad q_{сш} = \frac{Sp\mathbf{M}_ц}{Sp\mathbf{M}_ш} \gg 1 \quad (1.3)$$

где $Sp\mathbf{M}$ – след матриц $\mathbf{M}_ц$, $\mathbf{M}_д$, $\mathbf{M}_ш$.

Учитывая результаты анализа свойств ПКМ ПВР различных классов целей и помех, полученные в работах [6, 10, 15 – 21], а также условия (1.3) можно утверждать, что ПКМ \mathbf{M}_0 и \mathbf{M}_1 будут плохо обусловленными, т.е. $|\mathbf{M}_0| \cong 0$, $|\mathbf{M}_1| \cong 0$, так как истинный ранг:

$$rg \mathbf{M}_д = rg (\mathbf{M}_д + \mathbf{M}_ц) \leq 3 \quad (1.4)$$

в силу симметрии поляризационных матриц рассеяния, из элементов которых составлены соответствующие ПВР.

Известен и достаточно разработан в настоящее время общий метод решения плохо обусловленных задач – метод регуляризации [12]. Идея этого метода состоит в построении регуляризованного семейства приближенных решений, зависящих от значения некоторого малого параметра α_{01} , такого, что при его стремлении к нулю приближенное решение стремится к нормальному решению. Чем меньше α_{01} , тем ближе приближенное решение к искомому, но тем слабее устойчивость. При каком-то значении α_{01} , (хороших методов для его определения нет, несмотря на многочисленные рекомендации) решение получается удовлетворительным по точности, а способ его получения достаточно устойчивым. Однако применение этого метода в данном случае связано с неизбежной потерей качества обнаружения, т.к. устойчивость решения достигается за счет искусственного дополнения размерности области локализации случайного вектора (в данном случае ПВР объектов заданного класса) до размерности исходного пространства при этом имеющиеся различия распределений соответствующих случайных векторов частично нивелируются. Другими словами, использование известного метода регуляризации [13] при решении рассматриваемой задачи радиолокации приводит к погрешностям, которые являются методическими.

Можно использовать в данном случае метод прямого сведения ПКМ к сингулярной матрице [25, 16], непосредственно вытекающей из рассмотренных ранее результатов исследования областей локализации ПВР объектов различных классов. Суть этого метода состоит в следующем [25].

Предположим, что найдены все собственные числа η_i и нормированные собственные векторы b_i , матрицы \mathbf{M} . Отбросив $(n-r)$ векторов b_i , соответствующих наимень-

шим η_i , получим r – плоскость $L(\mathbf{M})$, проекция совокупности $\mathbf{S}(t_i)$ в которую будет иметь невырожденную ковариационную матрицу $\widehat{\mathbf{M}}$ — сингулярный скелет матрицы \mathbf{M} .

В рассматриваемом случае проверки гипотез ПКМ \mathbf{M}_0 и \mathbf{M}_1 различны, обе плохо обусловлены, имеют размерность (4x4) и одинаковые ранги (1.4). Поэтому построение сингулярного скелета целесообразно проводить [25] для матрицы

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_0 + \mathbf{M}_1.$$

Предположим, что, действуя указанным выше образом, мы получили матрицу \mathbf{B} , составленную из r нормированных собственных векторов, соответствующих r наибольшим собственным значениям матрицы \mathbf{M} . Применяя преобразование

$$\mathbf{Y} = \mathbf{B}^{*T} \mathbf{S} \quad (1.5)$$

получим ПВР $\mathbf{Y} \in L(\widehat{\mathbf{M}})$, ПКМ которого будет невырожденной. Условные плотности распределения \mathbf{Y} для любой из проверяемых гипотез естественно полагать нормальными.

Проведенные рассуждения позволяют получить выражения для распределений каждого из выборочных значений ПВР, соответствующих гипотезам H_0 и H_1 , в следующем виде [15, 19, 20]:

$$W_0(Y) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} |\mathbf{T}_0|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{Y}^{*T} \mathbf{T}_0^{-1} \mathbf{Y} \right\}; \quad (1.6)$$

$$W_1(Y) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} |\mathbf{T}_1|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{Y}^{*T} \mathbf{T}_1^{-1} \mathbf{Y} \right\}; \quad (1.7)$$

где $\mathbf{T}_0 = \mathbf{B}^{*T} \mathbf{M}_0 \mathbf{B}$ и $\mathbf{T}_1 = \mathbf{B}^{*T} \mathbf{M}_1 \mathbf{B}$.

При известных законах распределения выборочных значений для обеих рассматриваемых гипотез оптимальное решающее правило состоит в определении отношения правдоподобия и сравнении его с порогом. Величина порога определяется выбранным критерием оптимальности [1, 3, 4]. Для нормально распределенной выборки, отношение правдоподобия будет иметь вид:

$$l = \prod_{i=1}^N \left[\frac{|\mathbf{T}_{0i}|}{|\mathbf{T}_{1i}|} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{Y}_i^{*T} (\mathbf{T}_{1i}^{-1} - \mathbf{T}_{0i}^{-1}) \mathbf{Y}_i \right\}. \quad (1.8)$$

Здесь \mathbf{T}_{0i} , \mathbf{T}_{1i} , \mathbf{Y}_i — соответственно, ПКМ и ПВР $\mathbf{Y} \in L(\widehat{\mathbf{M}})$ при отсутствии и наличии цели заданного класса в обрабатываемом элементе разрешения РЛС на i – й отсчет времени.

Путем логарифмирования выделяем достаточную статистику удобную для вычислений

$$\eta = \sum_{i=1}^N \mathbf{Y}_i^{*T} (\mathbf{T}_{1i}^{-1} - \mathbf{T}_{0i}^{-1}) \mathbf{Y}_i. \quad (1.9)$$

Учтем в (1.9) однородность выборки, т.е. постулированную независимость \mathbf{M}_{0i} , \mathbf{T}_{0i} и \mathbf{M}_{1i} , \mathbf{T}_{1i} от i . Если решающую матрицу обозначим

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{T}_1^{-1} - \mathbf{T}_0^{-1}; \quad (1.10)$$

то решающая статистика (1.9) будет иметь вид:

$$\eta = \sum_{i=1}^N \mathbf{Y}_i^{*T} \mathbf{\Lambda} \mathbf{Y}_i. \quad (1.11)$$

Полученное оптимальное решающее правило будет справедливым лишь для $\mathbf{S} \in L(\widehat{\mathbf{M}})$, но распространить его на все поляризационное пространство \mathbf{C}^4 [5, 9, 18]

можно в принципе произвольным образом [23], т.к. по сути дела нас удовлетворяет почти любое из возможных решений.

Решающие статистики (1.9), (1.11) путем подстановки в них (1.5), (1.6) и (1.7) могут быть пересчитаны в исходный базис и представлены в следующем виде:

$$\eta = \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i^{*T} [\mathbf{B}(\mathbf{B}^{*T} \mathbf{M}_1 \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^{*T} - \mathbf{B}(\mathbf{B}^{*T} \mathbf{M}_0 \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^{*T}] \mathbf{S}_i \quad (1.12)$$

или, вводя новые обозначения, для (1.12) получим

$$\eta = \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i^{*T} (\mathbf{M}_1^+ - \mathbf{M}_0^+) \mathbf{S}_i, \quad (1.13)$$

где \mathbf{M}_1^+ и \mathbf{M}_0^+ – соответствующие обобщенные матрицы (матрицы Мура).

Однако, для оценки показателей качества селекции цели заданного класса в ОДО, нет необходимости возвращаться в исходную систему координат, поэтому воспользуемся более простым выражением решающей статистики в виде (1.11). Качество селекции будем оценивать на основе следующих показателей: D – вероятности правильного обнаружения-распознавания (селекции) цели заданного класса в ОДО; F – вероятности ложной тревоги; N – объема выборки, необходимого для получения заданных значений D и F .

Анализ показателей качества обнаружения связан с вычислением закона распределения решающей статистики η . Обращаясь к (1.11) и учитывая достаточно большую величину N (при высоком уровне помех), приходим к выводу о нормальном распределении статистики. Задача, таким образом, теперь сводится к расчету среднего $\bar{\eta}$ и дисперсии σ^2 статистики η для обеих гипотез (H_0 и H_1).

Для решения этой задачи выделим из (1.11) одно из статистически независимых слагаемых

$$\eta_i = \mathbf{Y}_i^{*T} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{Y}_i. \quad (1.14)$$

Вычисление характеристической функции величины η_i приводит к результату

$$\Theta_i(\mathcal{G}) = |\mathbf{I} - j2\mathcal{G}\boldsymbol{\Lambda}|^{-\frac{1}{2}} \quad (1.15)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица, $\boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{T}_0$ для гипотезы H_0 и $\boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{T}_1$ для гипотезы H_1 .

Для всей суммы (1.11) путем перемножения одинаковых выражений (1.15) имеем:

$$\Theta_0(\mathcal{G}) = \left| \mathbf{I} - j2\mathcal{G}(\mathbf{T}_0 \mathbf{T}_1^{-1} - \mathbf{I}) \right|^{-\frac{N}{2}}; \quad (1.16)$$

$$\Theta_1(\mathcal{G}) = \left| \mathbf{I} - j2\mathcal{G}(\mathbf{I} - \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_0^{-1}) \right|^{-\frac{N}{2}}. \quad (1.17)$$

Путем дифференцирования характеристических функций $\Theta_0(\mathcal{G})$ и $\Theta_1(\mathcal{G})$ находим средние значения и дисперсии достаточной статистики для обеих проверяемых гипотез. Расчеты дают:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\eta}_0 &= -NSp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_0 \mathbf{T}_1^{-1}); \\ \bar{\eta}_1 &= NSp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_0^{-1}); \\ \sigma_0^2 &= 2NSp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_0 \mathbf{T}_1^{-1})^2; \\ \sigma_1^2 &= 2NSp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_0^{-1})^2. \end{aligned} \right\} \quad (1.18)$$



Обозначим порог обнаружения, при котором обеспечивается вероятность ложной тревоги F , символом X_{1-F} . Величина X_{1-F} является решением трансцендентного уравнения

$$F = 1 - \Phi\left(\frac{x_{1-F} - \bar{\eta}_0}{\sigma_0}\right), \quad (1.19)$$

где

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

– интеграл вероятностей.

При этом вероятность правильного обнаружения может быть рассчитана аналогично

$$D = 1 - \Phi\left(\frac{x_{1-F} - \bar{\eta}_1}{\sigma_1}\right). \quad (1.20)$$

Обозначим через $\xi_\alpha - \alpha$ – процентную точку отклонения (квантиль) нормального распределения. Зададимся значениями вероятностей D и F и определим объем выборки, необходимый для обеспечения заданных показателей качества селекции D и F . Из (1.19) и (1.20) имеем систему из двух уравнений

$$\left. \begin{aligned} \xi_{1-F} &= \frac{x_{1-F} - \bar{\eta}_0}{\sigma_0}, \\ \xi_{1-D} &= \frac{x_{1-F} - \bar{\eta}_1}{\sigma_1} \end{aligned} \right\}, \quad (1.21)$$

исключая из которых значение порога x_{1-F} , приходим к уравнению относительно требуемого числа отсчетов ПВР N в виде:

$$\sigma_1(N)\xi_{1-D} + \bar{\eta}_1(N) = \sigma_0(N)\xi_{1-F} + \bar{\eta}_0(N). \quad (1.22)$$

Подставляя (1.18) в (1.22) и решая его относительно N , окончательно получим

$$N = \left[\frac{\xi_{1-F} \sqrt{2Sp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_0 \mathbf{T}_1^{-1})^2} - \xi_{1-D} \sqrt{2Sp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_0^{-1})^2}}{Sp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_0 \mathbf{T}_1^{-1}) + Sp(\mathbf{I} - \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_0^{-1})} \right]^2. \quad (1.23)$$

Выражения (1.18 – 1.23), с учетом равенств $\mathbf{T}_0 = \mathbf{B}^{*T} \mathbf{M}_0 \mathbf{B}$ и $\mathbf{T}_1 = \mathbf{B}^{*T} \mathbf{M}_1 \mathbf{B}$, а также с учетом выражения (1.2), позволяют оценить значения показателей качества селекции D , F и N в каждой конкретной ситуации.

Представляет определенный интерес исследование «механизма» влияния частотных, энергетических различий и различий рассеивающих свойств целей заданных классов и помех на показатели качества селекции, а также "вклад" каждого из указанных факторов в результат решения задачи селекции. Как показывает опыт предыдущих исследователей [1 – 3, 9], подобные вопросы могут быть выяснены на примере синтеза и анализа решающего правила (в данном случае) селекции при детерминированной модели ПВР цели, который рассматривается ниже в п.2.

2. Селекция по непрерывной реализации при детерминированной модели поляризационного вектора рассеяния цели

Будем полагать, что селектируемый на фоне отражений от диполей сигнал цели заданного класса, априори достоверно известен как непрерывная вектор-функция вре-

мени восьми компонентов – по числу квадратур элементов ПВР [11]. Распределение ПВР диполей, находящихся в заданном разрешаемом объеме ОДО, будем полагать стационарным и нормальным с нулевым математическим ожиданием [14 – 19]. Полагаем также, что можно пренебречь собственными шумами приемных каналов радиолокатора. Теоретический интерес к такой идеализированной ситуации связан с тем, что абстрагирование от реальных случайных параметров полезного сигнала позволяет наглядно проследить факторы, определяющие качество и предельные возможности селекции цели заданного класса на фоне отражений от случайных рассеивателей.

Методика решения задачи обнаружения полностью известного сигнала на фоне коррелированной гауссовской помехи с известной ковариационной матрицей общеизвестна [1, 9]. Она сводится к вычислению весового интеграла:

$$\eta = \int_{t_0}^{t_0+T} \mathbf{Y}^T(t) \mathbf{r}(t) dt \quad (2.1)$$

и сравнению его с порогом. Весовой вектор-функция $\mathbf{r}(t)$ является решением интегрально-матричного уравнения вида:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{R}(t-\tau) \mathbf{r}(\tau) d\tau = \mathbf{Y}_{ц}(t) \quad (2.2)$$

с симметричным ядром $\mathbf{R}(\tau)$, т.к. помеха полагается стационарной, а $\mathbf{Y}_{ц}(t)$ – известный ожидаемый сигнал, отраженный от цели.

Теперь от известных зависимостей перейдем к решению задачи селекции цели заданного класса в облаке диполей с использованием информации о рассеивающих свойствах цели и хаотической совокупности диполей. Обозначим через $\mathbf{S}_g(t)$ вектор-функцию размерностью 8×1 , компонентами которой являются квадратурные составляющие соответствующих комплексных элементов ПВР ОДО. Поскольку поляризационная матрица рассеяния (ПМР), из столбцов которой образован ПВР ОДО, является симметрической, то определитель поляризационно – ковариационной матрицы (ПКМ) ПВР ОДО.

$$|\mathbf{M}_0| = \left| \frac{1}{2} \langle \mathbf{S}_g(t) \mathbf{S}_g^T(t) \rangle \right| = 0,$$

где T – знак транспонирования вектора, а $\langle \cdot \rangle$ – знак статистического усреднения.

Из этого следует, что закон распределения вероятностей ПВР ОДО может существовать в данном случае лишь в подпространстве $r < n = 8$. Определим r собственных чисел ПКМ \mathbf{M}_0 , отличных от нуля, и соответствующие им нормированные собственные векторы b_i , $i = 1 \dots r$, из которых составим матрицу \mathbf{B} – матрицу преобразования базиса исходного поляризационного пространства. Положим, что по принимаемым сигналам определяется ПВР $\mathbf{S}(t)$. Используя известное преобразование, определим вектор-функцию $\mathbf{Y}(t) = \mathbf{B}^T \mathbf{S}(t)$, ПКМ которой $\mathbf{R}(t)$ уже не будет вырожденной.

В этом случае в соотношениях (2.1 и 2.2):

$\mathbf{Y}_{ц}(t) = \mathbf{B}^T \mathbf{S}_{ц}(t)$ – известный ожидаемый сигнал, причем $\mathbf{Y}_{ц}(t) \in L(\mathbf{R})$ является проекцией ПВР $\mathbf{S}_{ц}(t)$ в подпространство локализации распределения ПВР ОДО;

– матричное ядро интегрального уравнения (2.2) по определению будет равно

$$\mathbf{R}(\tau) = \langle \mathbf{Y}(t) \mathbf{Y}^T(t + \tau) \rangle = \mathbf{B}^T \langle \mathbf{S}_g(t) \mathbf{S}_g^T(t + \tau) \rangle \mathbf{B}.$$

В выражении для весового интеграла (2.1) общеприняты бесконечные пределы интегрирования. В то же время, учитывая финитность реального ПВР $\mathbf{S}(t)$ и, следовательно – $\mathbf{Y}(t)$, форма записи (2.1), где t_0 момент начала наблюдения, а T – его продолжительность, также приемлема.

Для получения оценок вероятностей правильного обнаружения-распознавания D и ложной тревоги F определим параметры условных распределений решающей статистики η (2.1). Решающая статистика η представляет собой линейное преобразование нормального случайного процесса $\mathbf{Y}(t)$ и, следовательно, сама распределена нормально.

Для помехи среднее $\langle \eta \rangle = 0$ по условию задачи, а для смеси сигналов помехи и цели получим:

$$\langle \eta \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_{\Pi}^T(t) \mathbf{r}(t) dt = q_{СП}^2, \quad (2.3)$$

то есть равно параметру обнаружения.

Расчет дисперсий дает следующие результаты:

для гипотезы H_0 (принимается только сигнал помехи): $\langle \eta^2 \rangle = q_{СП}^2$, а для гипотезы H_1 (принимается смесь полезного сигнала с помехой): $\langle \eta^2 \rangle = q_{СП}^4$.

При этом искомые показатели качества обнаружения определяются по известным формулам [9]:

$$F = \int_c^{\infty} W_{\Pi}(\eta) d\eta = 1 - \Phi\left(\frac{c}{q_{СП}}\right), \quad (2.4)$$

$$D = \int_c^{\infty} W_{СП}(\eta) d\eta = 1 - \Phi\left(\frac{c - q_{СП}^2}{q_{СП}^2}\right), \quad (2.5)$$

где $W_{\Pi}(\eta)$ и $W_{СП}(\eta)$ – условные плотности распределения решающей статистики в случаях наличия только помехи (ПВР ОДО) или смеси полезного сигнала и помехи (ПВР цели и ПВР ОДО) соответственно; c – порог обнаружения.

Задавая квантили ξ_{1-F} и ξ_{1-D} соответствующих условных распределений η для заданных значений D и F при использовании методики, которая уже рассматривалась в п.1 данной статьи, получим

$$q_{СП} = \frac{\xi_{1-F}}{(\xi_{1-D} + 1)}. \quad (2.6)$$

При этом время накопления T , необходимое для обеспечения требуемых значений D и F , является корнем трансцендентного уравнения вида

$$\int_{t_0}^{t_0+T} \mathbf{r}^T(t) \mathbf{Y}_{\Pi}(t) dt = \left[\frac{\xi_{1-F}}{(\xi_{1-D} + 1)} \right]^2. \quad (2.7)$$

Итак, аналитические выражения для определения показателей качества (D , F , T), которые исчерпывающе характеризуют эффективность решающего правила селекции (обнаружения-распознавания) цели в ОДО получили.

Выражения (2.4), (2.5) позволяют сделать вывод о том, что при оптимальном приеме вероятности D и F определяются лишь параметром обнаружения $q_{СП}^2$, то есть отношением сигнал/помеха на выходе линейной части приемного устройства.

Однако, показатели качества обнаружения (D , F , T) должны определяться:

- отношением мощностей отраженных полезного и мешающего сигналов, то есть отношением сигнал/помеха на входе оптимального приемника Q^2 ;
- спектральными различиями полезного сигнала и помехи;
- различиями рассеивающих свойств объектов, которые описываются поляризационно-статистическими параметрами сигналов, отраженных от цели и диполей, находящихся в одном разрешаемом объеме с целью. Другими словами, должна иметь место некоторая функциональная зависимость вида:

$$q_{СП}^2 = q_{СП}^2(Q^2, \gamma_\phi), \quad (2.8)$$

где γ_ϕ – коэффициент фильтрации, характеризующий возможности приемника по выделению сигнала на фоне помехи с учетом их спектральных и поляризационных различий.

Введем нормированный весовой вектор, как решение интегрально-матричного уравнения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{Sp\mathbf{R}(0)} \mathbf{R}(t-\tau) \mathbf{r}_H(\tau) d\tau = \frac{\mathbf{Y}_Ц(t)}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_Ц^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt}}, \quad (2.9)$$

Нетрудно видеть, что оно совпадает с обычным уравнением весового вектора (2.2), но записанным для сигнала и помехи единичных мощностей.

В (2.9) $Sp\mathbf{R}(0)$ – мощность помехи, вычисляемая по следу ПКМ $\mathbf{R}(\tau)$ при $\tau=0$. Из (2.9) находим, что обычный весовой вектор выражается через нормированный вектор следующим образом:

$$\mathbf{r}(t) = \left(\frac{\mathbf{1}}{Sp\mathbf{R}(0)} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_Ц^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt} \right) \mathbf{r}_H(t). \quad (2.10)$$

Используя выражения (2.3), (2.9) и (2.10), параметр обнаружения представим в следующем виде:

$$q_{СП}^2 = \int_{t_0}^{t_0+T} \mathbf{r}^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt = \left(\frac{1}{Sp\mathbf{R}(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_Ц^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt \right) \int_{t_0}^{t_0+T} \mathbf{r}_H^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt = Q^2 \gamma_\phi, \quad (2.11)$$

где $\mathbf{Y}_{ЦН}(t) = \mathbf{Y}_Ц(t) / \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_Ц^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt}$ – нормированный по мощности ожидаемый полезный сигнал;

$Q^2 = \frac{1}{Sp\mathbf{R}(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_Ц^T(t) \mathbf{Y}_Ц(t) dt$ – отношение сигнал/помеха на входе оптимального приемника;

$\gamma_\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{r}_H^T(t) \mathbf{Y}_{ЦН}(t) dt$, т. е. коэффициент фильтрации γ_ϕ представляет собой параметр

обнаружения при оптимальном приеме и при условии, что на вход системы линейной обработки поступают нормированные значения полезного сигнала и помехи.

Из выражения (2.11) следует, что параметр обнаружения может быть представлен в виде произведения двух сомножителей. Первый из них – Q^2 , характеризует только энергетические различия сигнала и помехи, а второй (γ_ϕ) – спектральные различия и поляризационные различия (или различия рассеивающих свойств) объектов. Чтобы это увидеть явно, выразим γ_ϕ через спектры полезного сигнала и помехи.

Если $\mathbf{F}_H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}_{ЦН}(t) e^{-j\omega t} dt$ – векторная спектральная плотность ожидаемого сигнала и $\mathbf{K}_H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{R}_H(\tau) e^{-j\omega\tau} d\tau$ – матрица энергетических спектров помехи, то решение интегрального – матричного уравнения принимает вид [7]:

$$\mathbf{r}_H(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{K}_H^{-1}(\omega) \mathbf{F}_H(\omega) e^{j\omega t} d\omega.$$

При этом имеем

$$q_{СП}^2 = \frac{Q^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}_H^T(\omega) \mathbf{K}_H^{-1}(\omega) \mathbf{F}_H^*(\omega) d\omega,$$

где * – знак комплексного сопряжения.

Откуда, с учетом (2.11) получаем

$$\gamma_\Phi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}_H^T(\omega) \mathbf{K}_H^{-1}(\omega) \mathbf{F}_H^*(\omega) d\omega. \quad (2.12)$$

Таким образом, спектральные различия и различия рассеивающих свойств объектов в комплексе определяют подынтегральную эрмитову форму

$$\mathbf{F}_H^T(\omega) \mathbf{K}_H^{-1}(\omega) \mathbf{F}_H^*(\omega). \quad (2.13)$$

В задаче селекции цели заданного класса в ОДО естественно полагать, что спектральные свойства отраженных сигналов определяются динамикой движения рассеивающих объектов относительно РЛС. Возможности селекции целей в ОДО при существенном различии радиальных скоростей движения цели и средней радиальной скорости движения диполей в ОДО изучены достаточно подробно. Эти различия позволяют условно разделить (с определенными показателями качества) все классы объектов на две группы: на движущиеся и относительно неподвижные. Другими словами, спектральные различия полезных и мешающих сигналов, в данном случае, могут явиться лишь вспомогательными признаками для принятия решения о селекции цели заданного класса. В случаях отсутствия или при несущественных различиях радиальных скоростей движения цели и диполей облака спектральные различия полезных и мешающих сигналов практически отсутствуют.

Обсудим механизм влияния различия рассеивающих свойств целей заданного класса и совокупности диполей, находящихся в одном разрешаемом объеме с целью, на возможности селекции цели заданного класса в ОДО при отсутствии различия радиальных скоростей движения цели и диполей облака.

Векторный характер величин, входящих в выражение (2.13), позволяет «увидеть» этот механизм. Действительно, анализ статистических свойств ПВР объектов различных классов, проведенный в работах [17 – 20], показывает, что распределения ПВР объектов различных классов, представляющих практический интерес, локализуются в компактных подпространствах (областях локализации) исходного (в данном случае 8-мерного) поляризованного пространства. Эти области локализации ПВР различных классов объектов отличаются расположением и ориентацией в исходном поляризованном пространстве, размерностями подпространств локализации и размерами. Вероятностная мера пересечения областей локализации распределений ПВР объектов таких классов равна нулю. В частности, размерности областей локализации ПВР ОДО и цели, имеющей, например, форму тела вращения или тела с плоскостью симметрии, различны, причем ПВР цели локализуется в подпространстве меньшей размерности, чем ПВР

ОДО. Это значит, что существует некоторый базис с такими измерениями, по которым помеху можно просто не учитывать, ввиду отсутствия полезного сигнала. Другими словами, из всего пространства квадратур ПВР можно «вырезать» только ту область, в которой локализуется полезный сигнал, что по существу и представляет собой поляризационно-пространственную фильтрацию. Факт такой поляризационно – пространственной фильтрации помехи в равной мере относится к любому другому базису, т.к. размерности подпространств есть инварианты относительно любой группы невырожденных преобразований базиса. В эрмитовой форме (2.13) такая поляризационно-пространственная фильтрация осуществляется автоматически.

Обсудим пути получения аналитического выражения для оценки потенциальных возможностей селекции цели заданного класса в ОДО. Поскольку главной предпосылкой селекции цели заданного класса в ОДО при отсутствии (в среднем) доплеровских различий сигналов является различие их рассеивающих свойств, то относительное движение цели в первом приближении учитывать не будем, считая полезный сигнал постоянным в течение времени наблюдения T . Тогда спектр квадратурных составляющих ПВР будет определяться соотношением

$$\mathbf{F}(\omega) = \mathbf{Y}_{\text{ц}} T \frac{\text{Sin } \omega \tau / 2}{\omega \tau / 2}, \quad (2.14)$$

где $\mathbf{Y}_{\text{ц}}$ – постоянный за время наблюдения вектор квадратур ПВР цели.

При небольшом диапазоне угловых скоростей и относительных скоростей поступательного движения диполей временная корреляционная функция помехи имеет вид, близкий к закону $\text{Sin } x/x$, т.е. энергетический спектр помехи приблизительно постоянен в некоторой полосе частот ($-\Omega_{\text{макс}} \dots + \Omega_{\text{макс}}$). При этом для нормированного энергетического спектра помехи может быть получено следующее выражение [14]:

$$\mathbf{K}_H(\omega) = \frac{2\pi}{\Omega_{\text{макс}}} \mathbf{R}_{gH}, \quad (2.15)$$

где \mathbf{R}_{gH} – нормированная ПКМ квадратур элементов ПВР помехи.

Подставляя (2.14) и (2.15) (после предварительной нормировки) в выражение для коэффициента фильтрации (2.12), получим

$$\gamma_{\phi} = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathbf{Y}_{\text{ц}}^T \mathbf{K}_H^{-1} \mathbf{Y}_{\text{ц}}}{\mathbf{Y}_{\text{ц}}^T \mathbf{Y}_{\text{ц}}} T^2 \int_{-\Omega_{\text{макс}}}^{\Omega_{\text{макс}}} \frac{\text{Sin}^2 \varpi T / 2}{(\varpi T / 2)} d\varpi. \quad (2.16)$$

Полагая ширину спектра помехи существенно большей ширины спектра полезного сигнала, пределы интегрирования в (2.16) можно устремить к бесконечности, что приводит к δ – функции. Используя фильтрующее свойство δ – функции, получим приближенное выражение для оценки коэффициента фильтрации в следующем виде:

$$\gamma_{\phi} \cong \frac{\mathbf{Y}_{\text{ц}}^T \mathbf{K}_H^{-1} \mathbf{Y}_{\text{ц}}}{\mathbf{Y}_{\text{ц}}^T \mathbf{Y}_{\text{ц}}} T.$$

При этом с учетом (2.15) параметр обнаружения (2.11) может быть представлен [14] в виде

$$q_{\text{СП}}^2 \approx Q^2 \frac{\mathbf{Y}_{\text{ц}}^T \mathbf{K}_H^{-1} \mathbf{Y}_{\text{ц}}}{\mathbf{Y}_{\text{ц}}^T \mathbf{Y}_{\text{ц}}} \frac{T \Omega_{\text{макс}}}{2\pi}. \quad (2.17)$$

Если интервал корреляции помехи по времени полагать равным $\tau_K = 2\pi/\Omega_{\text{макс}}$, то, приравнявая правые части (2.6) и (2.17) и решая полученное уравнение, относительно времени наблюдения, получим:



$$\mathbf{T} \approx \left(\frac{\xi_{1-F}}{\xi_{1-D} + 1} \right)^2 \frac{\tau_K}{\mathbf{Y}_{ЦН}^T \mathbf{M}_{gH}^{-1} \mathbf{Y}_{ЦН}}. \quad (2.18)$$

Аналитические выражения (2.10) – (2.18) могут быть использованы для оценки и исследования эффективности селекции цели заданного класса в облаке случайных рассеивателей, в частности, в облаке дипольных отражателей.

Учитывая новизну использования различий рассеивающих свойств объектов в интересах повышения информативности и помехозащищенности радиолокаторов, обсудим ряд результатов натуральных экспериментов по селекции неподвижных наземных целей заданных классов на фоне подстилающей поверхности (ПП) и других мешающих объектов при отношениях сигнал/помеха близких к единице. Известно [1, 9, 21], что в рамках методов современной теории и практики радиолокации такая задача не имеет практически приемлемого решения.

3. Фрагменты натурального эксперимента по селекции неподвижных наземных целей заданных классов

Натурные эксперименты проводились на действующем макете Радиолокационного комплекса с полным поляризационным зондированием пространства (РЛК с ППЗП), который был создан в 2003 – 2004 гг. совместными усилиями ЗАО НПП «Многомерные электронные системы» (г. Белгород) и Центра радиоэлектроники Белгородского государственного университета. Авторы статьи с благодарностью и светлой памятью отмечают, что созданию действующего макета РЛК с ППЗП они обязаны всесторонней поддержке Лауреата Государственной Премии СССР Заместителя Генерального директора ОАО «НИИ приборостроения им. В.В. Тихомирова» по научной работе, Главного конструктора РЛК истребителя СУ-27 Гришина Виктора Константиновича (г. Жуковский Московской обл.).

Обсуждаемые ниже фрагменты натурального эксперимента включает две группы результатов:

- результаты, которые подтверждают теоретически обоснованные предпосылки [6, 17, 18, 20] повышения информативности и помехозащищенности РЛК с ППЗП при наличии пассивных помех;

- результаты экспериментальной проверки работоспособности разработанного решающего правила при селекции неподвижных наземных целей заданных классов на фоне отражений от подстилающей поверхности и мешающих объектов.

Возможности повышения информативности и помехозащищенности РЛК с ППЗП при наличии пассивных помех и при условии, что возможности энергетических и спектральных различий сигналов исчерпаны, естественно, определяются степенью различия рассеивающих свойств целей и помех заданных классов. При наиболее полном анализе различия распределений ПВР объектов отдельных классов обычно сравнивают их математические ожидания, ПКМ, собственные числа и собственные вектора ПКМ, наконец, определяют ошибки распознавания объектов одного класса на фоне объектов другого [21]. Путь этот достаточно строгий, но трудоемкий и не наглядный. Учитывая, что обсуждаемый фрагмент эксперимента используется в статье для демонстрации новых предпосылок и возможностей радиолокации, предлагается другой [17, 18, 20] более оперативный и наглядный, хотя и менее строгий путь, в большей мере, качественной оценки различия распределений ПВР объектов разных классов. Суть его состоит в проектировании многомерных областей распределения ПВР (эллипсоидов разброса ПВР) объектов соответствующих классов в трехмерное действительное пространство с последующим наглядным качественным сравнением проекций. Это допустимо, поскольку размерности областей локализации не меньше

размерностей их проекций, а увеличение размерности пространства признаков не ухудшает различимости сигналов [2].

Обсудим фрагменты натурального эксперимента.

Фрагмент 1. Радиолокационной целью заданного класса объектов являлся человек (ПВР Ч), а помехой служили отражения случайных рассеивателей распределенных на подстилающей поверхности (ПП). Отношение сигнал/помеха, оцениваемое как отношение следа матрицы вторых начальных моментов ПВР Ч на фоне отражений от ПП к следу матрицы вторых начальных моментов ПВР ПП, составляло 0,6 дБ. Априорная информация в виде математических ожиданий и ПКМ ПВР объектов соответствующих классов была получена до эксперимента путем обработки реальных отраженных сигналов.

Проекции областей локализации ПВР Ч и ПП в трехмерное действительное пространство приведены на рис. 1 и не пересекаются.

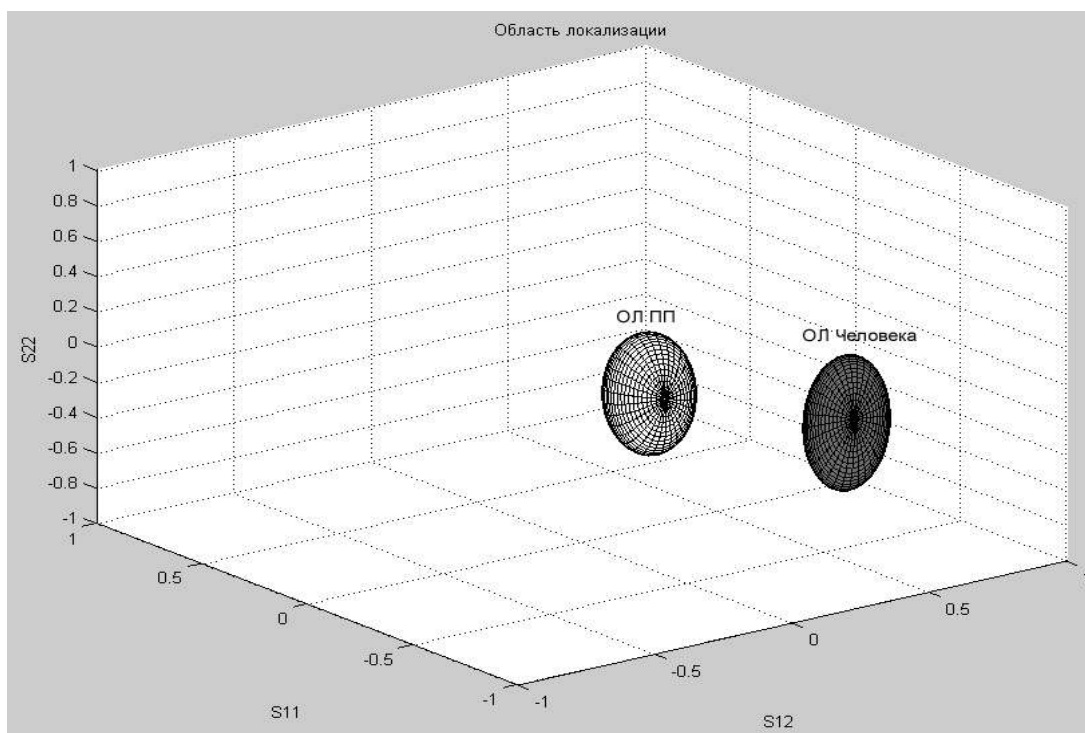


Рис. 1. Проекция областей локализации ПВР Ч и ПВР ПП в трехмерное действительное пространство

Результаты работы двух вариантов алгоритма селекции (обнаружения – распознавания) цели заданного класса на фоне ПП, в виде фотографий экрана монитора РЛК, представлены: на рис. 2 (при использовании усеченного критерия Вальда), и на рис. 3 (при использовании критерия Неймана-Пирсона).

На фотографиях экрана монитора (рис. 2 и рис. 3) светлое пятно определяет координаты объекта заданного класса. Все остальные сигналы, отраженные от ПП и мешающих объектов, в секторе по азимуту от 145 град. до 165 град. и в диапазоне дальностей от 400 м до 1000 м алгоритмами подавлены, как объекты других классов.

Пороги обнаружения – распознавания определялись из условия обеспечения вероятности ложной тревоги не более 0,001. Вероятность правильного обнаружения равная 0,95 оценивалась экспериментально по результатам статистических испытаний. При этом объем выборки, необходимый для получения указанных вероятностей селекции, не превышал 10 ПВР (или 20 периодов зондирования, т.к. в РЛК был реализован последовательный во времени метод измерения ПВР).

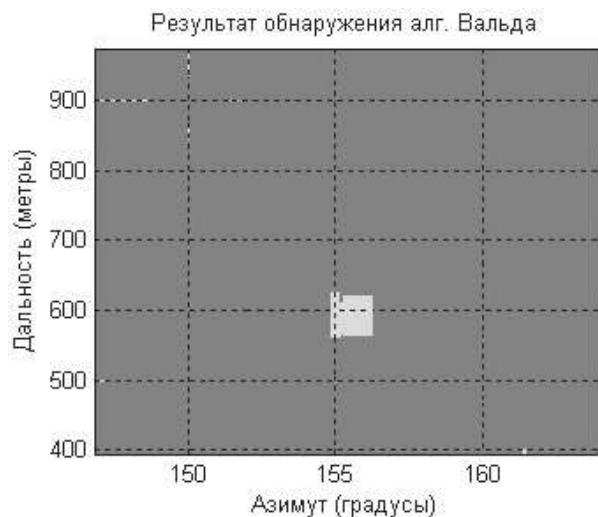


Рис. 2

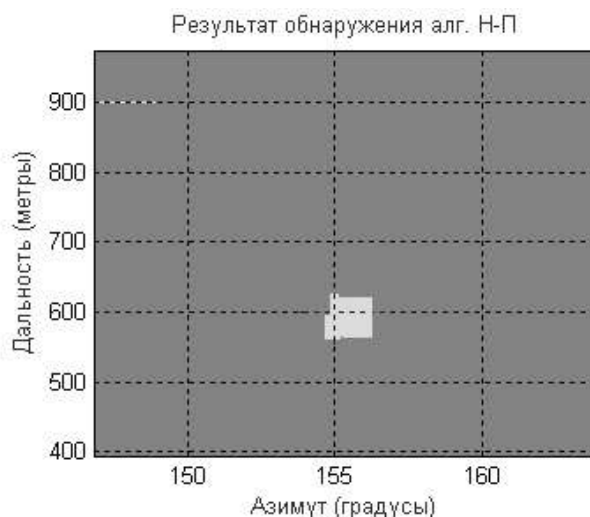


Рис. 3

Фрагмент 2. Радиолокационной целью заданного класса являлся автомобиль А1 (снегоочиститель), находившийся на взлетно-посадочной полосе аэродрома в одном элементе разрешения с другим автомобилем – А2 (заправщик самолетов топливом), который использовался в качестве мешающего объекта. Отношение сигнал/помеха, оцениваемое как отношение следа матрицы вторых начальных моментов ПВР автомобиля А1 на фоне отражений от ПП к следу матрицы вторых начальных моментов ПВР автомобиля А2 также на фоне отражений от той же ПП, составляло примерно 0,0 дБ. Априорная информация об объектах в форме математических ожиданий и поляризационно – ковариационных матриц как функций курса цели относительно РЛС имела в базе данных.

Трехмерные проекции (рис.4) областей локализации распределений ПВР полезного сигнала (ПВР А1) на фоне ПП и ПВР помехи (А2) на фоне той же ПП не пересекаются, следовательно [2], соответствующие области локализации также не пересекаются, т.е. различия сигналов существенные и результаты селекции (обнаружения – распознавания) следует ожидать положительными.

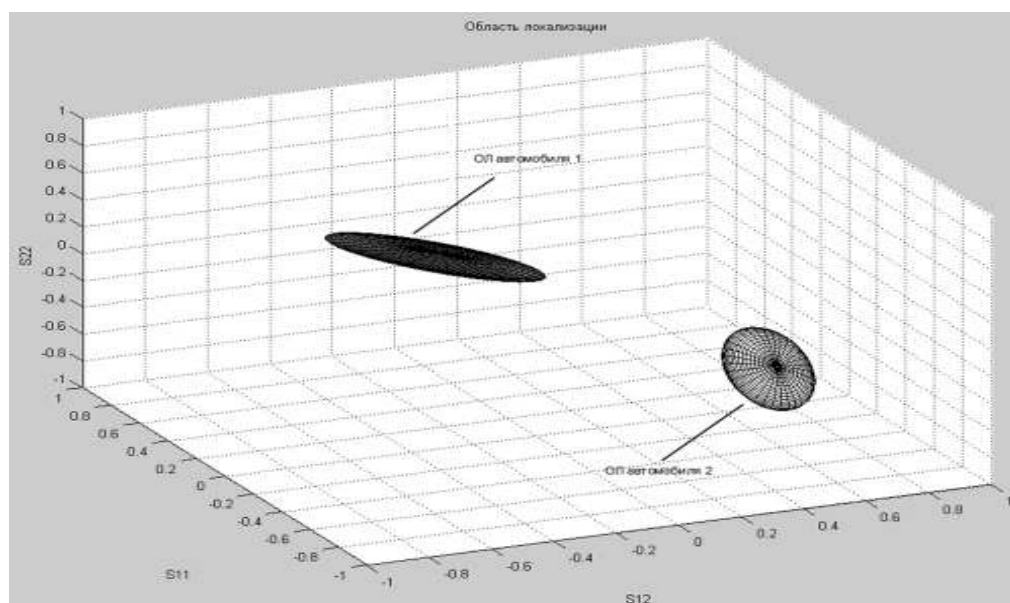


Рис. 4. Проекция областей локализации ПВР А1 и А2 в трехмерное действительное пространство

Радиолокационные карты сектора (рис. 5), в пределах которого находились селектируемые цели, представлена в координатах: азимут, дальность, напряжения на выходах соответствующих каналов приемника. По основной диагонали экрана расположены основные (вертикально – U11) и (горизонтально – U22), а по дополнительной диагонали – перекрестные ортогонально поляризованные составляющие сигналов, отраженных от подстилающей поверхности и, находящихся на ней, объектов при поочередном излучении сигналов вертикальной и горизонтальной поляризации. Уместно заметить, что традиционная радиолокация использует только одну из основных ортогонально поляризованных составляющих отраженных сигналов (U11 или U22). Цели неподвижны и, следовательно, спектральные (доплеровские различия) сигналов отсутствуют. Становится понятно (см. рис. 5), что обнаружение, а тем более, распознавание объектов заданных классов на основе только U11 или U22, т.е. энергетических различий, практически невозможно.

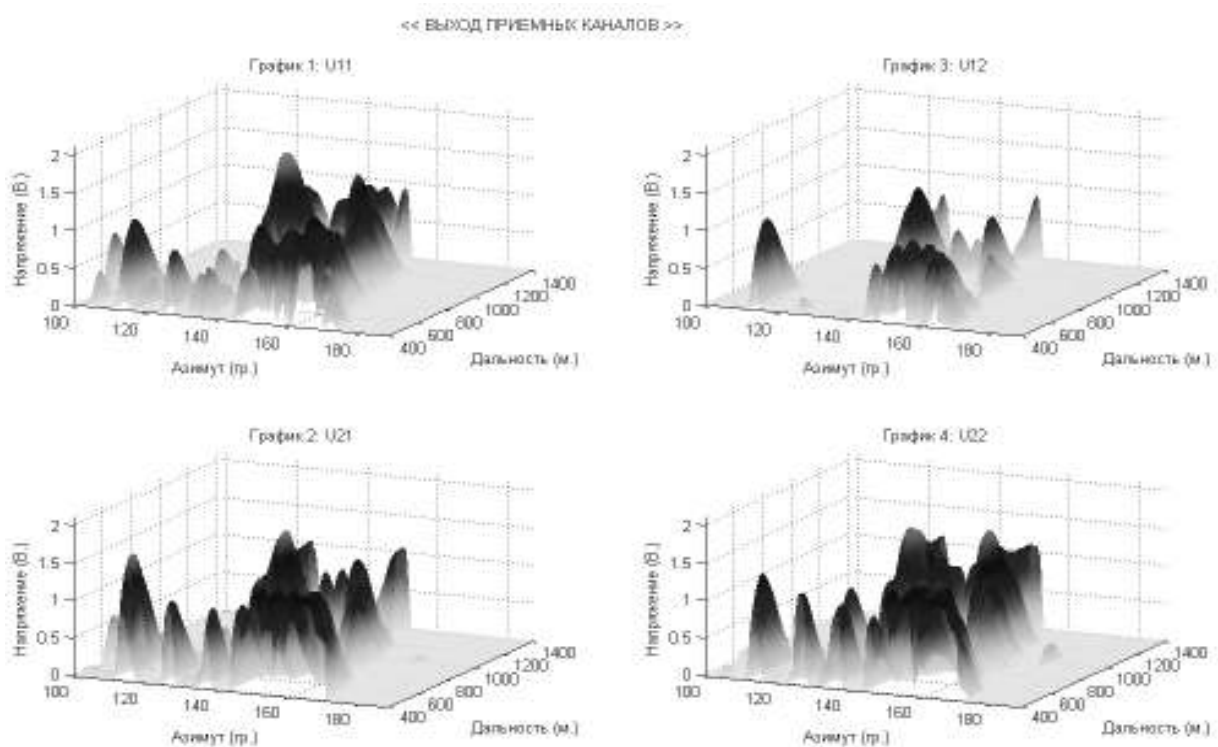


Рис. 5. Амплитуды ортогонально поляризованных составляющих сигналов, отраженных от участка сектора обзора, на котором находились селектируемые объекты

На фотографиях экрана монитора (рис. 6 и рис. 7) светлое пятно определяет координаты объекта (A1) заданного класса. Все остальные отраженные сигналы (см. рис. 5) в секторе по азимуту от 145 град. до 165 град. и в диапазоне дальностей от 400 м до 1000 м алгоритмами подавлены, как объекты других классов.

Пороги обнаружения – распознавания определялись из условия обеспечения вероятности ложной тревоги не более 0,001. Вероятность правильного обнаружения равная 0,93 оценивалась экспериментально по результатам статистических испытаний. Селекция цели заданного класса на фоне отражений от мешающего объекта и подстилающей поверхности осуществлялось в режиме обзора. При этом решение о наличии или отсутствии цели заданного класса в каждом конкретном обзоре принималось на

основе объема выборки, который не превышал 10 отсчетов ПВР (или 20 периодов зондирования).

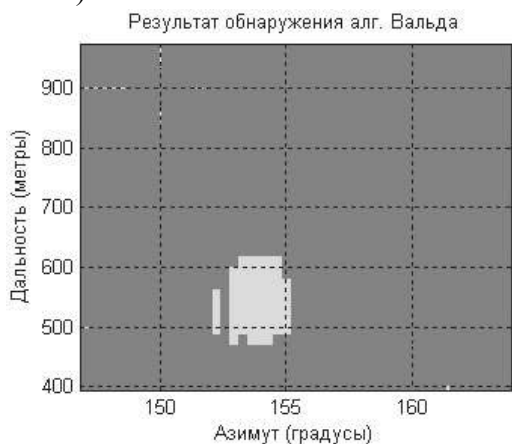


Рис. 6

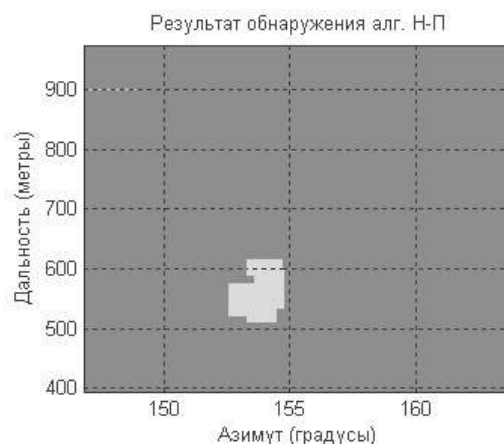


Рис. 7

Приведенные результаты показывают, что в процессе натурного эксперимента на действующем макете РЛС при ошибках измерения амплитуд в пределах 20% и ошибках измерения фаз компонентов ПВР до 15 град. (к сожалению, аппаратура 70-х годов) были получены следующие результаты. При заданной вероятности ложной тревоги не более 0,001 и отношениях сигнал/помеха примерно 0,0 дБ экспериментальные оценки вероятности правильного обнаружения-распознавания цели заданного класса были не хуже 0,9.

Если оценивать энергетический выигрыш, принятый в традиционной радиолокации, то при обнаружении неподвижных наземных целей, по результатам обсуждаемых фрагментов эксперимента, он составил не менее 13 дБ. Цифра невелика, хотя в традиционной радиолокации в этих условиях и такая цифра считается недостижимой. Однако, в данном случае, дело не столько в выигрыше при обнаружении неподвижной цели, сколько в одновременном обнаружении и распознавании цели заданного класса при отношении сигнал/помеха примерно равном единице. Другими словами, к выигрышу при обнаружении необходимо добавить не менее 20 дБ выигрыша на распознавание [21]. Так что совокупный выигрыш обсуждаемого метода радиолокации по сравнению с методами традиционной радиолокации может составить не менее 30 дБ. Это свидетельствует о возможности существенного расширения функциональных возможностей радиолокатора на основе использования различий рассеивающих свойств целей и пассивных помех с различными электрофизическими характеристиками.

Заключение

В работе проведен синтез решающих правил селекции, т.е. обнаружения и распознавания, цели заданного класса в облаке случайных рассеивателей в предположении полностью случайных моделей ПВР цели и пассивной помехи, а также в случае детерминированной модели ПВР цели.

Работоспособность решающего правила селекции цели заданного класса проверена в натурном эксперименте, результаты которого свидетельствуют о существенном расширении функциональных возможностей РЛС при учете рассеивающих свойств целей и, в частности, пассивных помех.

Литература

1. Бакут П.А., Курикша А.А. и др. Вопросы статистической теории радиолокации. Под ред. Тартаковского Р.П., т. 1. – М.: Сов. радио, 1963.

2. Ярушек В.Е. Некоторые вопросы различимости сигналов на фоне помех. - Харьков: АРТА, 1963.
3. Канарейкин Д.Б., Потехин В.А., Павлов Н.Ф. Поляризация радиолокационных сигналов. - М.: Сов. радио. 1966.
4. Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники. – М.: Сов. радио, кн. 1, 1966.
5. Шилов Г.Е. Математический анализ. (Конечномерные линейные пространства). – М.: Наука, 1969.
6. Храбростин Б.В. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. – Харьков: ВИРТА ПВО.1972.
7. Краснов М.Л. Интегральные уравнения. – М.: Наука. 1975.
8. СССР. А.С. № 97365, 1976г. Бурканов В.М., Храбростин Б.В. Устройство определения геометрических характеристик объекта.
9. Ширман Я.Д., Манжос В.Н. Теория и техника получения и обработки информации и защита от помех. – М.: Радио и связь, 1981.
10. Храбростин Б.В. Методика аналитической оценки показателей качества распознавания радиолокационных объектов по информации о их рассеивающих свойствах. Депонированная рукопись. ЦИВТИ МО СССР, Р11493, 1982.
11. СССР. А.С. №.208117, 1984. Толкачев А.А., Храбростин Б.В., Сапов М.М. Устройство для измерения элементов поляризационных матриц рассеяния (моноимпульсный измеритель ПМР).
12. Радиолокационные характеристики летательных аппаратов. Под ред. проф. Тучкова Л.Т. – М: Радио и связь, 1985.
13. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1986.
14. Сапов М.М. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. – Харьков: ВИРТА ПВО, 1986.
15. СССР. А.С. № 269071, 1988. Храбростин Б.В., Поздышев В.Ю., Сапов М.М. Устройство для обнаружения целей в облаках диполей (параметрический поляризационно-доплеровский обнаружитель).
16. Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. Под редакцией С.А. Айвазяна. – М.: Финансы и статистика, 1989.
17. Храбростин Б.В. Основные статистические свойства поляризационных векторов рассеяния радиолокационных объектов различных классов. Сб. НММ, вып. 26. –Харьков: ВИРТА ПВО. 1990. – с. 344-353.
18. Толкачев А.А., Храбростин Б.В. Возможности повышения информативности и помехозащищенности РЛС на основе полного поляризационного зондирования. Сб. трудов 41 ВНК ВИРТА ПВО.- Харьков: ВИРТА ПВО.1991.
19. СССР. А.С. № 329666, 1991. Храбростин Б.В., Кутузов А.С. и др. Устройство для обнаружения целей в облаках диполей (комбинированный поляризационно-доплеровский обнаружитель).
20. Храбростин Б.В. Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук. – Харьков: ВИРТА ПВО.1992.
21. Ширман Я.Д. и др. Справочник по радиолокационным системам. /Под ред. Я.Д. Ширмана. – М.: МАКВИС, 1998.
22. Храбростин Б.В. Метод полного поляризационного зондирования пространства. Научные ведомости БелГУ, серия Информатика, прикладная математика, управление, т.1, вып. 1 (19). Белгород 2004, с. 111- 130.
23. Храбростин Б.В., Артамонов П.И., Гольцов В.В. и др. Анализ поляризационно – статистических свойств типовых классов радиолокационных целей. Сб. докладов XVIII НТК НИИП им. В.В. Тихомирова, Жуковский, 2005, с. 247- 259.
24. Храбростин Б.В., Лучин А.А., Храбростин Д.Б. и др. Распознавание целей по результатам радиолокационных измерений в сложной помеховой обстановке. Радиотехника. № 11, 2005, с. 34 – 39.
25. Либенсон М.Н. Линейный дискриминантный анализ в случае сингулярных или плохо обусловленных ковариационных матриц. – «Адаптивные системы», вып. 4, – Рига: «Зинатне», 1973.
26. Basu D. A note on multivariate extension of some theorems related to univariate normal distribution. – «Sankhya». 1956, v. 17, p. 221-224.



**SYNTHESIS AND THE ANALYSIS OF OPTIMUM SOLVING RULES
OF SELECTION OF THE PURPOSES IN THE CLOUD CASUAL DIFFUSERS
AT FULL POLARIZING SOUNDING SPACE**

B.V. Khrabrostin¹⁾, M. M.Sapov²⁾, D.B. Khrabrostin³⁾

1) Belgorod State University, Pobedi St., 85, Belgorod, 308015, Russia

2) OSS "Experimental factory", Y.Gagarin Boul., 34, St.-Petersburg, 196143, Russia

3) Belgorod State University, Pobedi St., 85, Belgorod, 308015, Russia

In article essentially new is use of distinction of disseminating properties of the purpose and a passive handicap for detection and recognition of the purpose. Thus the solving rule of selection represents the polarization -spatial filter in polarizing space for area of localization of the signals reflected from the purpose of the set class. Analytical expressions for an estimation of parameters of quality of selection and the analysis of the mechanism of influence on them of distinction of disseminating properties of the purpose and a handicap, and also frequency and power distinctions of the reflected signals are received. The results of the natural experiment confirming an opportunity of detection and recognition (selection) of the motionless ground purpose of the set class on a background of reflections from the spreading surface and other objects, being in one resolved volume with the purpose are resulted.

Key words: polarizing space, detection and recognition, theory, natural experiment.

ОЦЕНКА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВЕЙВЛЕТОВ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ В КОГЕРЕНТНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ВИХРЯ

А.М. Логвинов, Ю.Е. Поленова, Г.А. Травин

Белгородский государственный университет,
308007, г. Белгород, пр. Победы, 85
pruslan@list.ru

Цель этого исследования заключается в оценке использования биортогонального вейвлет-преобразования второго поколения для пространственного разложения в когерентном моделировании вихря турбулентных течений. Свойства биортогонального вейвлет-преобразования второго поколения и ортогонального вейвлет-преобразования Добеши с тем же самым числом вырожденных моментов сравниваются в априорных тестах, используя прямое спектральное числовое моделирование (ПСЧМ) на базе данных изотропных областей турбулентности: 256^3 и 512^3 ПСЧМ сильной гомогенной турбулентности ($Re_\lambda = 168$) и 256^3 и 512^3 ПСЧМ затихающей гомогенной турбулентности ($Re_\lambda = 55$). Определено, что биортогональное вейвлет-преобразование второго поколения может использоваться для последовательного извлечения вихря. Результаты априорных тестов показали, что вейвлеты второго поколения обладают лучшим сжатием с остаточной областью близкой к гауссовой. Однако было найдено, что использование вейвлетов второго поколения приводит к совокупной длине масштаба для некогерентной части, большей чем при использовании ортогональных вейвлетов. Предложен способ преодоления этой трудности.

Ключевые слова: биортогональные вейвлет-преобразования, вейвлет-преобразования Добеши, вихрь, априорные тесты.

Введение

Новый адаптивный метод коллокации вейвлетами второго поколения для ПСЧМ турбулентных течений был развит в 2000-м году Васильевым, Бауманом и другими учеными [8, 12]. Адаптивный метод коллокации вейвлетами подходит для больших чисел турбулентности Рэйнолда, что делает вейвлеты (которые ограничены в пространстве и масштабе) естественными кандидатами для решения этих задач, поскольку они адаптируют числовое разрешение прерывистой структуры турбулентности в мелких масштабах. Следовательно, метод вейвлетов позволяет вычислять турбулентные течения с очень сокращенным количеством мод с небольшой потерей точности. Кроме того, вычислительные затраты алгоритма независимы от размерности задачи и составляют $O(N)$, где N — общее число точек коллокации фактически используемых в моделировании.

Эффективность адаптивного метода коллокации вейвлетами может быть значительно увеличена путем комбинирования его с недавно развитым подходом когерентного моделирования вихря (КМВ) [5], который тесно связан со стандартным методом моделирования большого вихря (МБВ). В отличие от МБВ, в котором скоростная область делится на большие и небольшие области, в КМВ скоростная область анализируется в когерентных (отфильтрованных) и некогерентных (остаточных) областях. Отфильтрованные масштабы, представляющие когерентную негауссову часть потока, получают в цифровой форме из фильтрующего уравнения движения турбулентности, в то время как результат остаточных масштабов, которые представляют некогерентную гауссову часть потока, нуждается в моделировании. Успех применения КМВ зависит от того, насколько близка остаточная область к гауссову белому шуму и как много степеней свободы требуется для представления отфильтрованной области. В 1993 г. Донохо показал, что пороговая обработка коэффициентов вейвлетов представляет со-

бой оптимальный метод для отделения гауссова белого шума от сигнала. Таким образом, может быть проведена фильтрация в области вейвлетов пороговой обработкой их коэффициентов, которую можно рассматривать как нелинейную фильтрацию в зависимости от каждой реализации потока. Такая фильтрация вейвлеватами достигается выполнением следующих шагов:

1. Выполнение прямого вейвлет-преобразования от ω .
2. Обнуление коэффициентов вейвлетов, амплитуда которых ниже заданного априорно порога, т.е. $\|\tilde{\omega}\|_2 \leq \varepsilon$, где $\tilde{\omega}$ — вейвлет-преобразование от ω .
3. Применение обратного вейвлет-преобразования.

В результате этой операции отфильтрованная область турбулентности может быть представлена небольшим числом коэффициентов вейвлетов. Ожидаемые преимущества КМВ по описанному методу заключаются, во-первых, в использовании вейвлет-базисов для значительного сжатия области турбулентности, требующей моделирования только малой части степеней свободы (те, которые содержат существенное количество энергии и энтропии), и во-вторых, можно по-видимому смоделировать исключаемые степени свободы более точно, чем в МБВ, так как они ближе к гауссову белому шуму чем получаемые из линейных низкочастотных фильтров МБВ. Первая работа [5], посвященная двумерному КМВ, демонстрирует его существенный потенциал. Ожидается, что применение КМВ к трехмерным турбулентным течениям по рассмотренным в работе методам, обеспечит существенное увеличение скорости вычислений и точности.

Конечная цель нашей работы состоит в развитии трехмерного КМВ, пригодного для моделирования реальных научных и технических задач в комплексной области. Будет использован адаптивный вычислитель коллокации вейвлетами для решения в цифровой форме уравнения КМВ на адаптивной сетке. Адаптивный вычислитель коллокации вейвлетами использует второе поколение биортогональных вейвлетов, что позволяет решать задачи в комплексной области. Было бы логично использовать те же самые вейвлеты, как для фильтрации области турбулентности, так и для вычислителя коллокации вейвлетами. Однако использование биортогональных вейвлетов второго поколения для извлечения когерентной области не исследовано до сих пор. Поэтому, цель этого исследования состоит в том, чтобы исследовать в априорных тестах использование этих вейвлетов только для фильтрации области турбулентности для когерентного извлечения вихря.

Вейвлеты второго поколения

Вейвлеты представляют собой базисные функции, ограниченные, как в физическом пространстве (благодаря конечному носителю), так и в спектральном (например, как на рис. 1). Напротив, преобразование Фурье, основанное на функциях синус и косинус, хорошо ограничено в частотной области, но не обеспечивает локализацию в физическом пространстве из-за глобальности его носителя. Благодаря локализации пространство/масштаб вейвлет-преобразование обеспечивает, как пространственную, так и масштабную (частотную) информацию, в то время как преобразование Фурье предоставляет только информацию о частоте.

Хотя вейвлет-преобразование с его локализацией пространство/масштаб представляет собой привлекательный метод для решения задач с ограниченными структурами, такими как моделирование турбулентных течений, традиционное вейвлет-преобразование имеет сложности, связанными с краевыми эффектами. Традиционно вейвлеты ψ_k^j определяются как смещения и расширения одного материнского вейвлета

ψ , т.е. $\psi_k^j = \psi_k^j(x) = \psi(2^j x - k)$. Такие вейвлеты первого поколения определены или в бесконечных или в периодических областях [3, 9].

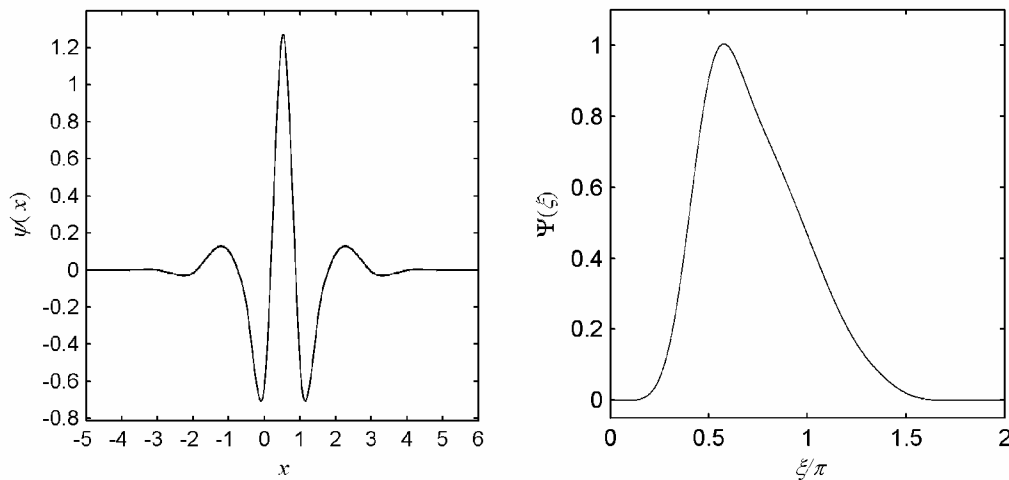


Рис. 1. Смещенный интерполирующий вейвлет ψ и его преобразование Фурье $\Psi(\xi)$

Вейвлеты второго поколения, введенные в [10, 11], являются обобщением вейвлетов первого поколения и предоставляют необходимую свободу при работе с комплексной геометрией, произвольными граничными условиями, и нерегулярными интервалами осуществления выборки. Вейвлеты второго поколения формируют базис Риса для некоторого пространства функций, локальны в пространственной и частотной областях, часто имеют много полиномиальных вырожденных моментов, но не имеют понятий задержки и расширения в отличие от вейвлетов первого поколения. Несмотря на потерю этих двух фундаментальных свойств базисов вейвлетов, вейвлеты второго поколения сохраняют многие полезные свойства вейвлетов первого поколения, включая быстрое $O(N)$ преобразование.

Построение вейвлетов второго поколения основано на схеме подъема, подробно описанной в [10, 11]. Здесь мы только укажем главные их:

1. Вейвлеты построены в пространственной области и могут быть по желанию разработаны для комплексных многомерных областей и нерегулярных интервалов осуществления выборки.

2. Не требуется никакой внешней памяти, и исходный сигнал может быть заменен его вейвлет-преобразованием.

3. Вейвлет-преобразование второго поколения по степени два работает быстрее вейвлетов первого поколения.

4. Обратное вейвлет-преобразование по схеме подъема осуществляется просто изменением направления операций с переменной вычитания и сложения.

5. Программирование алгоритмов вейвлет-преобразования значительно проще.

6. Вейвлеты второго поколения являются естественно подходящими для методов коллокации вейвлетами, превосходя вейвлет-подход Галеркина при обработке общих граничных условий и нелинейностях в уравнениях.

В этом исследовании мы использовали ряд вейвлетов второго поколения по методу, известному в литературе как интерполяционный подъем (ИП) или вейвлеты Додоно [10, 12]. В частности, были проведены априорные тесты с использованием вейвлет-интерполяции по схеме подъема, обозначаемой далее ИПЗ, имеющей пять полиномиальных вырожденных момента. Вейвлет ИПЗ и его Фурье-преобразование показаны на рис. 1. Более всестороннее рассмотрение разработки вейвлетов этого класса можно найти в [10, 11, 12].

Когерентное моделирование вихря

В КМВ область турбулентности разделяется на две части с использованием пороговой фильтрации вейвлетами:

$$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_> + \boldsymbol{\omega}_\leq, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\omega}_>$ — отфильтрованная часть потока, определенного на адаптивной сетке; $\boldsymbol{\omega}_\leq$ — область локализованных остаточных масштабов (ЛОМ), приведенная к гауссову белому шуму насколько возможно. Термин «локализованные остаточные масштабы» используется с целью подчеркнуть тот факт, что нет никакого конкретного масштаба, связанного с остаточной областью, т.е. спектральное содержимое ЛОМ изменяется во времени и по положению в отличие от гомогенного потока МБВ.

Формулирование КМВ начинается с уравнения движения турбулентности:

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = -(\mathbf{V} \cdot \nabla)\boldsymbol{\omega} + (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla)\mathbf{V} + \nu \nabla^2 \boldsymbol{\omega}. \quad (2)$$

Аналогично МБВ после применения вейвлет-фильтра мы получаем следующее уравнение КМВ, описывающее развитие отфильтрованной области:

$$\frac{d\boldsymbol{\omega}_>}{dt} = -(\mathbf{V}_> \cdot \nabla)\boldsymbol{\omega}_> + (\boldsymbol{\omega}_> \cdot \nabla)\mathbf{V}_> + \nu \nabla^2 \boldsymbol{\omega}_> + \mathbf{f}, \quad (3)$$

где

$$\mathbf{f} = [(\mathbf{V} \cdot \nabla)\boldsymbol{\omega}]_> - [(\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla)\mathbf{V}]_> - (\mathbf{V}_> \cdot \nabla)\boldsymbol{\omega}_> + (\boldsymbol{\omega}_> \cdot \nabla)\mathbf{V}_> \quad (4)$$

представляет собой ЛОМ, которые должны быть смоделированы. Локализованную природу ЛОМ необходимо рассмотреть в определении моделей остаточного масштаба для использования с КМВ. Было показано, что когда нелинейный фильтр пороговой вейвлет-обработки применяется к изотропной области турбулентности с относительно большим числом Рэйнольда, остаточная область статистически ближе к гауссовой, чем при использовании отсекающего Фурье-фильтра с тем же самым числом степеней свободы. Это было показано в [5] для двумерного случая, а мы далее покажем это для трехмерного случая. Таким образом ожидается, что ЛОМ могут быть смоделированы более точно чем при фильтрации Фурье, но это не было доказано и является темой последующих исследований.

Решение уравнения фильтрации турбулентности на адаптивной сетке может быть получено с использованием любого соответствующего метода решения. Двумерный метод КМВ реализован в [5] с использованием адаптивного алгоритма вейвлет-неопределенности [6]. В нашей работе мы осуществили трехмерный метод КМВ, используя адаптивный метод коллокации вейвлетами, описанный в [12], который, как было показано в указанной работе, хорошо работает в двумерных потоках и может быть расширен на трехмерный случай с небольшой модификацией. Этот вычислитель использует биортогональные ИП вейвлеты второго поколения, обсуждавшиеся выше, и пригоден для решения задач в комплексной области.

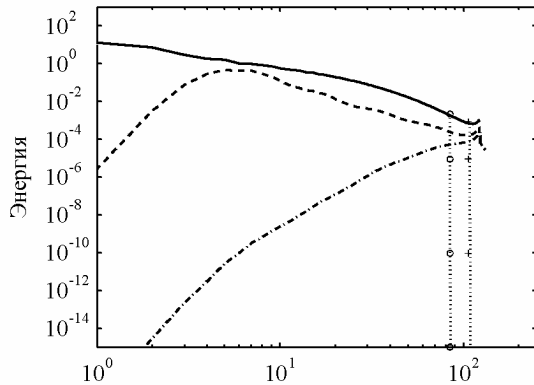
Адаптивный метод коллокации вейвлетами идеально подходит для КМВ турбулентных течений, так как каждый вейвлет однозначно связан с точкой коллокации. Таким образом, адаптация сетки может быть основана на том же самом критерии как в когерентном извлечении вихря, т.е. в любой момент времени вычислительная сетка состоит из точек, соответствующих вейвлетам, коэффициенты которых выше оптимального порога КМВ, а точки коллокации, коэффициенты вейвлетов которых при

операции вейвлет-фильтрации были обнулены, не сохраняются. С такой стратегией адаптации решение получается на сетке, которая «отслеживает» когерентные вихри.

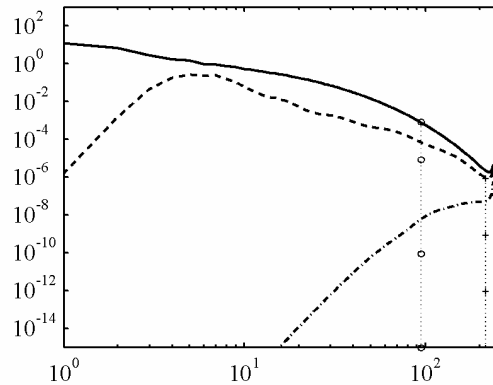
Метод КМВ требует, по крайней мере, двух основных операций на каждом временном шаге:

1. Применение пороговой вейвлет-фильтрации для определения адаптивной сетки.
2. Нахождение численными методами решения уравнения (3) на адаптивной сетке.

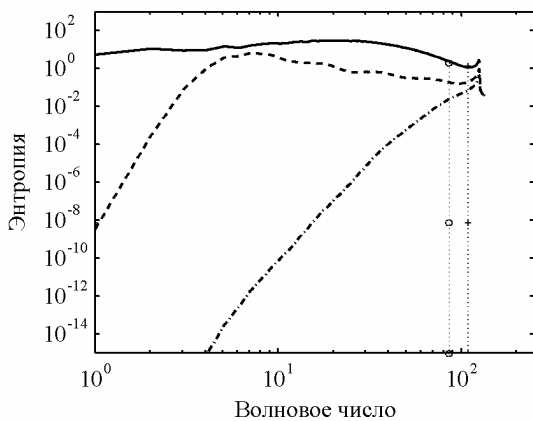
Использование одинаковых вейвлетов на этих двух шагах было бы наиболее эффективно с точки зрения вычислений. Это является причиной нашего интереса к исследованию использования биортогональных вейвлетов второго поколения для когерентного извлечения вихря.



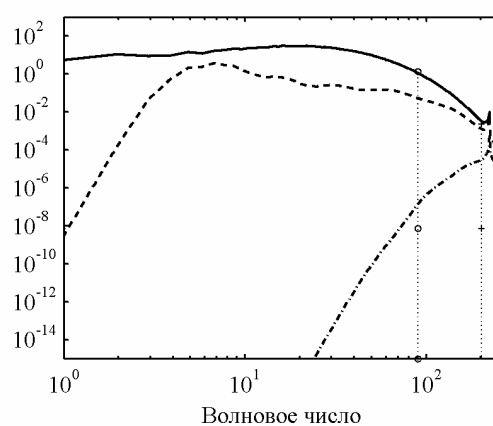
а) спектры сильной изотропной турбулентности для набора данных F_{256} , $Re_\lambda = 168$



б) спектры сильной изотропной турбулентности для набора данных F_{512} , $Re_\lambda = 168$



в) энтропия сильной изотропной турбулентности для набора данных F_{256} , $Re_\lambda = 168$



г) энтропия сильной изотропной турбулентности для набора данных F_{512} , $Re_\lambda = 168$

Рис. 2. Спектры энергии и энтропии сильной гомогенной турбулентности для наборов данных F_{256} и F_{512} . Спектр всей области: (—). Спектр области ЛОМ после оптимального сжатия вейвлетом DB6: (---) и ИПЗ: (----). Отсекающий фильтр Фурье со сжатием, эквивалентным оптимальному вейвлет-фильтру DB6: (--+--) и оптимальному вейвлет-фильтру ИПЗ (·····)

Хотя в этой статье мы не обсуждаем решение уравнения фильтрации турбулентностей вейвлетами (3), хотелось бы указать, что, так как уравнения КМВ решаются на



адаптивной сетке, мы не можем использовать спектральные методы решения уравнения Пуассона, связывающее область турбулентности со скоростной областью. Развитие эффективного, основанного на коллокации вейвлетами, метода решения уравнения Пуассона на адаптивной сетке в настоящее время является предметом исследования.

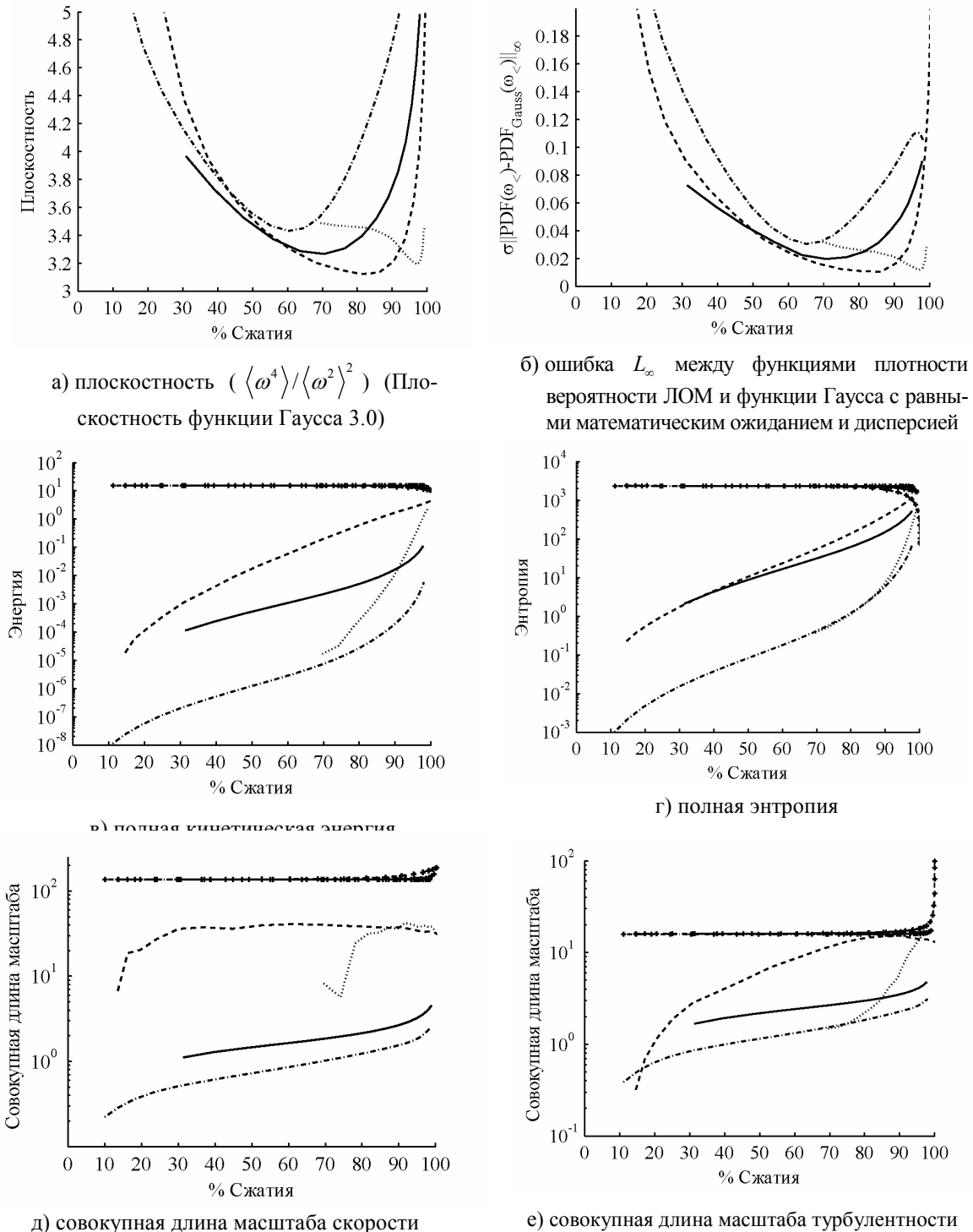


Рис. 3. Статистика отфильтрованных и ЛОМ областей для изотропных турбулентных областей с F_{256} и F_{512} после пороговой фильтрации вейвлетами ИПЗ и DV6. Статистика ЛОМ области F_{256} после обработки вейвлетами DV6 для: (—) и ИПЗ: (-----). Статистика ЛОМ области F_{512} после обработки вейвлетами DV6 для: (—) и ИПЗ: (.....). На графиках в-е линии с (+) — те же статистики для отфильтрованных областей

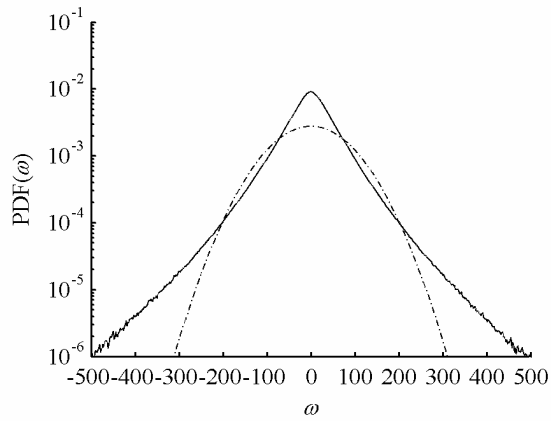
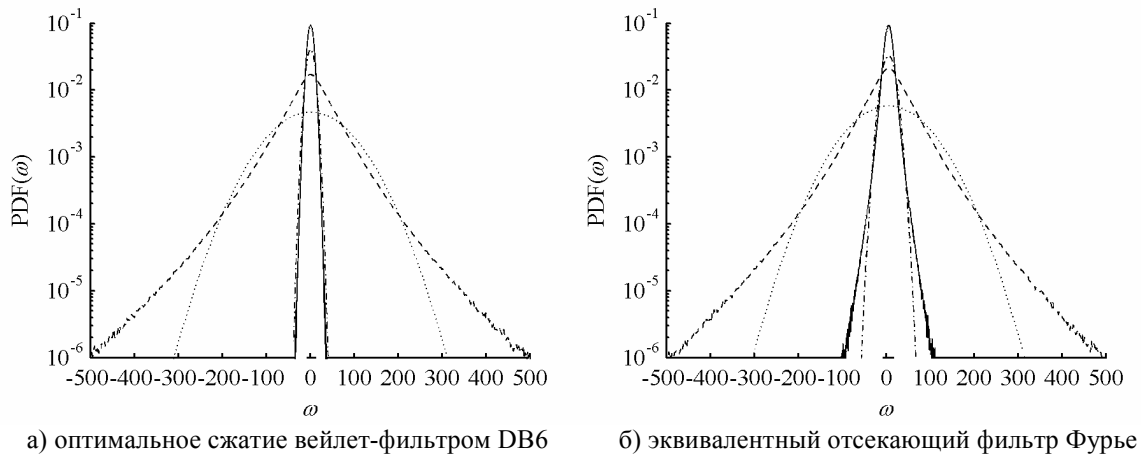
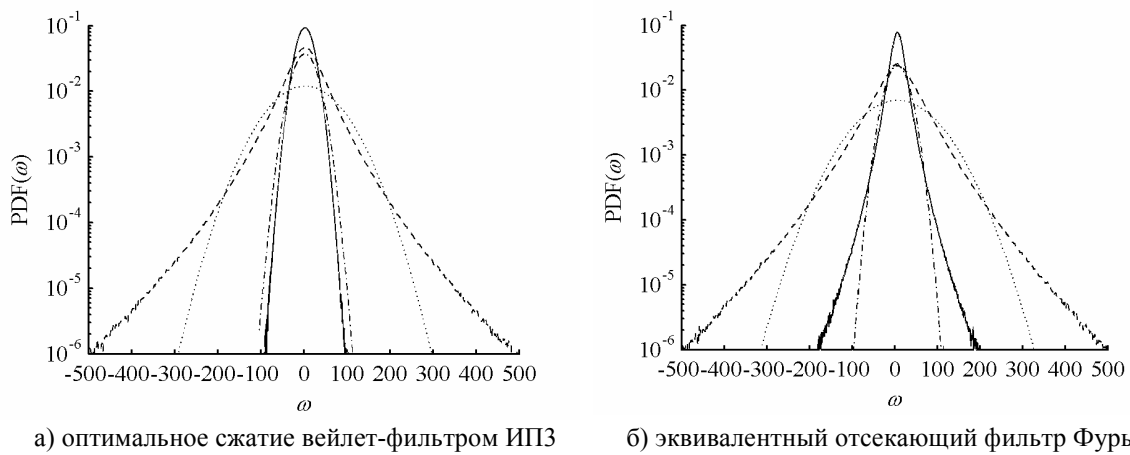


Рис. 4. Функция распределения вероятности, $PDF(\omega)$, для сильной изотропной турбулентности F_{256} : (—). Гауссова функция распределения вероятности с тем же математическим ожиданием и дисперсией (---)



а) оптимальное сжатие вейлет-фильтром DB6 б) эквивалентный отсекающий фильтр Фурье

Рис. 5. Функция распределения вероятности для области сильной изотропной турбулентности F_{256} при сжатии 50% вейвлетами DB6 и отсекающего фильтра Фурье для эквивалентного сжатия. Отфильтрованная область: (---) и связанная с ней гауссова: (····). Область ЛОМ: (—) и связанная с ней гауссова: (—·—)



а) оптимальное сжатие вейлет-фильтром ИПЗ б) эквивалентный отсекающий фильтр Фурье

Рис. 6. Функция распределения вероятности для области сильной изотропной турбулентности F_{256} при сжатии 86% вейвлетами ИПЗ и отсекающего фильтра Фурье для эквивалентного сжатия. Отфильтрованная область: (---) и связанная с ней гауссова: (····). Область ЛОМ: (—) и связанная с ней гауссова: (—·—)

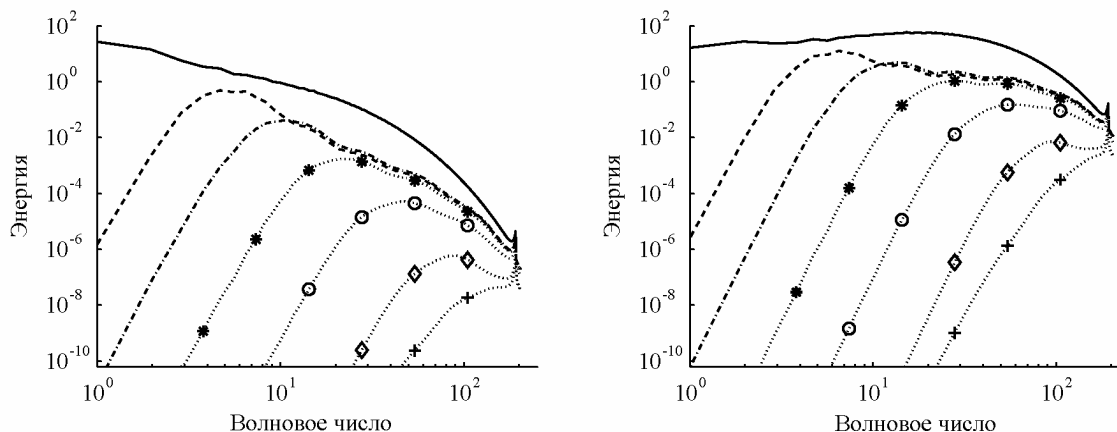


Рис. 7. Спектры энергии и энтропии для сильной изотропной турбулентности набора данных F_{512} , $Re_\lambda = 168$. Спектр всей области: (—). Спектр области ЛОМ после оптимальной декомпозиции вейвлетами DB6 с 6 уровнями ($\cdots\circ\cdots$). Другие кривые соответствуют спектрам области ЛОМ после оптимальной декомпозиции вейвлетами ИПЗ для различных уровней разложения. 2 уровня: ($\cdots\diamond\cdots$); 3 уровня: ($\cdots\circ\cdots$); 4 уровня: ($\cdots*\cdots$); 5 уровней: (— —); 6 уровней: (— · —)

Полученные результаты

Для использования метода КМВ мы хотим найти оптимальное значение ε таким образом, чтобы декомпозиция области турбулентности вейвлет-фильтра в отфильтрованную область содержала все когерентные вихри со значительной энергией и области ЛОМ, которые так близки к гауссову белому шуму насколько возможно. Один способ найти оптимальное значение ε заключается в использовании теоремы шумоподавления Донохо [4], которая утверждает, что, если в области турбулентности присутствует компонент гауссова шума, и известна его дисперсия, можно найти это значение пороговой обработкой ортогональными вейвлетами. Теорема шумоподавления Донохо гласит, что порог, необходимый для извлечения компоненты гауссова белого шума, равен $\varepsilon_{\text{Donoho}} = \sqrt{2\sigma^2 \log(N)}$, где σ^2 — дисперсия гауссова белого шума, а N — число точек области. Однако, дисперсия компоненты гауссова белого шума области турбулентности не известна. Один из способов найти максимально подобную гауссовой области ЛОМ заключается в выполнении итераций $\varepsilon_{n+1} = \sqrt{2\sigma_n^2 \log(N)}$, где σ_n^2 — дисперсия, определяемая по всей области [5]. Если в ней существует область ЛОМ, которая является гауссовым белым шумом, то итерационный процесс должен сходиться к $\varepsilon_{\text{Donoho}}$. Однако, так как теорема Донохо не относится непосредственно к биортогональным вейвлетами, необходимо найти другой способ определения оптимального ε .

Чтобы доказать существование оптимального значения ε для вейвлетов второго поколения и, возможно, найти эффективный способ его определения, был выполнен ряд параметрических исследований с изменением ε , чтобы достигнуть диапазона сжатия от 0% до 100%. Результаты для биортогонального (ИП) вейвлета второго поколения сравнивались с ортогональным вейвлетом Добеши DB6 [2]. У обоих вейвлетов есть пять вырожденных моментов и эффективная длина фильтра 12. Мы выполнили эти параметрические исследования, используя несколько сильных и затихающих изотропных областей турбулентности из базы данных спектрального ПСЧМ. Детально будут представлены только две соответствующие ограниченные области, представляющие области сильной изотропной турбулентности, — F_{256} и F_{512} ($Re_\lambda = 168$). Мы также рассмотрим две об-

ласти затихающей изотропной турбулентности,— CBC_{256} и CBC_{512} ($Re_\lambda = 55$). Подробную информацию об этих наборах данных можно найти в [7].

Энергия и энтропия спектров наборов данных F_{256} и F_{512} приведены на рис. 2. Рис. 3 отражает различные статистические величины (как функции сжатия) отфильтрованных и ЛОМ областей после пороговой обработки вейвлетами DB6 и ИПЗ. Мы определяем сжатие как $\frac{N_{>}}{N} \times 100\%$, где $N_{>}$ — число сохраненных коэффициентов вейвлетов для данного порога ε . Из рис. 3а видно, что в каждом случае для областей существует минимум, интерпретирующийся как оптимальное сжатие области вейвлетами в терминах подобия области ЛОМ гауссовой. На рис. 3б изображена масштабированная ошибка L_∞ между плотностями распределения вероятности ЛОМ и гауссовым распределением с одинаковыми математическим ожиданием и дисперсией. Можно заметить, что минимумы на рис. 3а и рис. 3б совпадают, показывая, что плоскостность — хороший индикатор подобия области гауссову распределению. По графикам также можно заметить, что оптимальное сжатие обеих областей лучше для вейвлетов ИПЗ, чем для вейвлетов DB6. Однако это не отражает всей картины. На рис. 3в видно, что полная кинетическая энергия в области ЛОМ больше для обеих областей, когда используются вейвлеты ИПЗ, в то время как различие намного меньше, если рассматривать общее значение энтропии на рис. 3г. Существенно, что совокупная длина масштабов областей ЛОМ скорости (рис. 3д) и турбулентности (рис. 3е) значительно больше для вейвлетов ИПЗ. Это указывает на то, что вейвлеты ИПЗ извлекают более подобную гауссовой области ЛОМ с более высокой оптимальной степенью сжатия, но эта область ЛОМ является более когерентной, чем при использовании вейвлетов DB6. Так как цель подхода КМВ заключается в извлечении некогерентного гауссова белого шума, можно отнести такие области ЛОМ к недостаткам использования вейвлетов ИПЗ.

Также интересно отметить, что для вейвлетов ИПЗ оптимальное сжатие значительно больше для набора данных F_{512} по сравнению с F_{256} (см. рис. 2а и рис. 2б). Фактически, число вейвлетов для представления отфильтрованных областей приблизительно одинаково для набора данных F_{256} и F_{512} , а это означает, что дополнительные масштабы аппроксимации практически не вносят никаких дополнительных затрат. Однако это не верно для вейвлет-фильтра DB6.

На рис. 4 изображены функции плотности вероятности турбулентности для набора данных F_{256} и функции Гаусса с одинаковыми математическим ожиданием и дисперсией. Рис. 5 отражает функцию плотности вероятности для набора данных F_{256} отфильтрованных областей турбулентности и областей ЛОМ при оптимальном сжатии вейвлетами DB6 в сравнении с отсекающим фильтром Фурье, имеющим такое же число вырожденных моментов. Различие в гауссовом подобии области ЛОМ двух фильтров может наиболее ясно быть замечено на концах графиков.

При пороговой обработке, как вейвлетами ИПЗ, так и вейвлетами DB6, область ЛОМ более приближена к гауссовой на концах, чем остаточная область, полученная отсекающим фильтром Фурье. В обоих случаях есть значительное отличие в районе ноля между плотностью распределения вероятности области ЛОМ и соответствующим гауссовым распределением; это различие доминирует в ошибке L_∞ .

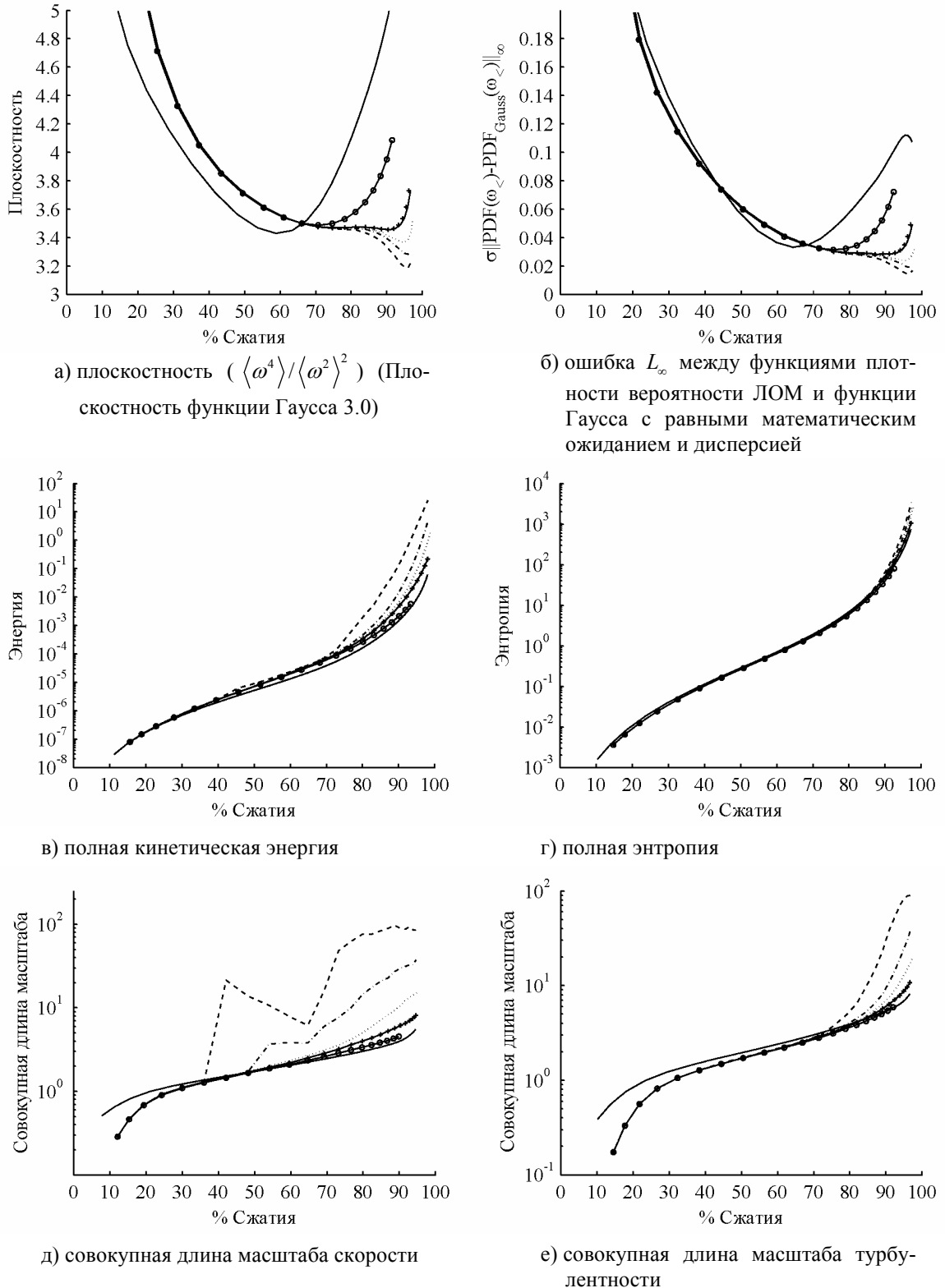


Рис. 8. Статистика отфильтрованных и ЛОМ областей для изотропных турбулентных областей F_{512} , $Re_\lambda = 168$. Статистика области ЛОМ приводится обработки вейвлетами DB6 с 6 уровнями: (—). Другие кривые соответствуют спектрам области ЛОМ после оптимальной декомпозиции вейвлетами ИПЗ для различных уровней разложения. 2 уровня: (—●—); 3 уровня: (—+—); 4 уровня: (—·—); 5 уровней: (—·—·—); 6 уровней: (—·—·—·—)

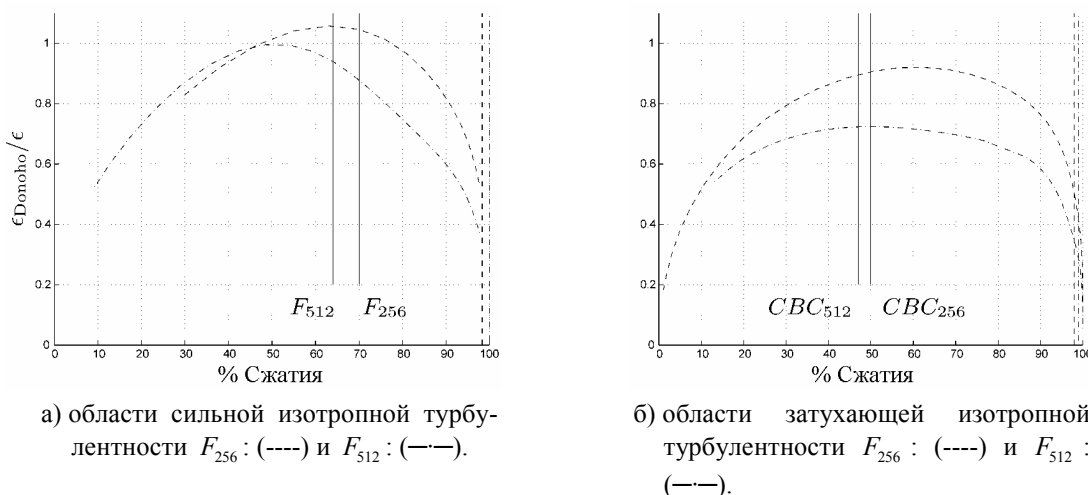


Рис. 9. Пороговая обработка по теореме шумоподавления Донохо, отмасштабированная на основе реальной пороговой обработки вейвлетами DB6. Процент сжатия при минимальной плоскостности отмечен для каждой области сплошными вертикальными линиями. Результирующее сжатие при применении теоремы Донохо ко всей области турбулентности отмечено вертикальными линиями — 256^3 : (----), 512^3 : (—)

Как возможный способ улучшения работы вейвлетов ИПЗ для последовательного извлечения вихря, мы изучили эффект уменьшения числа используемых уровней преобразования. В случае вейвлетов ИПЗ и DB6 для разрешения 512^3 максимальное число уровней, используемых перед началом поддержки масштабирующих функций, для обеспечения наложения на самом грубом уровне, равно 6 [2]. На рис. 7 показаны спектры энергии и энтропии для набора данных F_{512} и областей ЛОМ после оптимального сжатия вейвлетами DB6 с 6 уровнями преобразования, как и на рис. 3. Также показаны спектры энергии и энтропии для областей ЛОМ после оптимального сжатия вейвлетами ИПЗ с 2–6 уровнями разрешения. Заметим, что при уменьшении числа уровней разрешения, используемых в вейвлет-преобразовании ИПЗ, область ЛОМ содержит меньше энергии и приближается к энергии, сохраняемой вейвлет-фильтром DB6. На рис. 8 проводится сравнение тех же самых статистических характеристик, что и на рис. 3, для вейвлет-преобразований с различным числом уровней разрешения для вейвлетов DB6 и ИПЗ. На рис. 8а и рис. 8б можно легко заметить, что с уменьшением числа уровней вейвлет-преобразования область ЛОМ становится менее гауссовой. Можно также заметить, что вейвлет-преобразование ИПЗ с четырехуровневыми результатами в области ЛОМ более гауссова (по сравнению с вейвлет-фильтром DB6) с оптимальной степенью сжатия 96% против 60% для вейвлет-фильтра DB6. Сравнение полной энергии и энтропии (рис. 8в и рис. 8г) для четырехуровневого вейвлет-преобразования ИПЗ с DB6 показывает, что различие в полной кинетической энергии минимально, а полная энтропия почти идентична. Интересная тенденция может быть замечена в совокупной длине масштаба скорости (рис. 8д) и турбулентности (рис. 8е): использование меньшего числа уровней вейвлет-преобразования ИПЗ приводит к меньшей когерентности области ЛОМ.

Наконец, обсудим применение теоремы шумоподавления Донохо для поиска оптимального сжатия вейвлетами с использованием ортогональных вейвлетов DB6. На рис. 9 показан нормализованный пороговый коэффициент ($\varepsilon_{Donoho} / \varepsilon$), полученный по теореме шумоподавления Донохо для области ЛОМ в зависимости от процента сжатия области. Напомним, что ε_{Donoho} данной области турбулентности, являющийся функцией



ей дисперсии области ЛОМ, однозначно определяется величиной ε , используемой в вейвлет-фильтре. Сплошные вертикальные линии показывают оптимальное сжатие, определяемое минимальной плоскостностью и ошибкой L_∞ . Можно заметить, что поскольку области ЛОМ никогда не являются полностью гауссовым белым шумом, оптимальное сжатие и точки, где $\varepsilon_{\text{Donoho}}/\varepsilon = 1$ не совпадают. Фактически, для затухающей изотропной турбулентности наборов данных *CBC256* и *CBC512*, имеющих более низкое Re_λ ($Re_\lambda = 55$), $\varepsilon_{\text{Donoho}}/\varepsilon$ никогда не достигает 1. На графике также нанесены вертикальные линии, соответствующие оптимальной степени сжатия, полученной по теореме шумоподавления Донохо для различных полных областей. Можно заметить, что это приводит к намного более высокой степени сжатия, чем в точке максимального подобия гауссову распределению (см. рис. 3).

Заключение

Было проведено сравнение работы биортогонального вейвлета второго поколения и ортогонального вейвлета Добеши с тем же самым числом вырожденных моментов по априорным тестам, используя спектральную базу данных ПСЧМ областей изотропной турбулентности: 256^3 и 512^3 ПСЧМ сильной гомогенной турбулентности ($Re_\lambda = 168$); 256^3 и 512^3 ПСЧМ затихающей гомогенной турбулентности ($Re_\lambda = 55$). Результаты этих априорных тестов показали, что интерполяция методом подъема с использованием биортогонального вейвлета второго поколения в состоянии извлечь более гауссову область ЛОМ с более высокой оптимальной степенью сжатия, чем ортогональные вейвлеты DB6. Однако извлеченная область ЛОМ является более когерентной, чем при использовании ортогональных вейвлетов DB6. Эта проблема может быть преодолена сокращением числа уровней разрешения при вейвлет-преобразовании. Кроме того, было определено, что оптимальное сжатие вейвлетами не совпадает с теоретическим сжатием, определенным по теореме шумоподавления Донохо. Самое вероятное объяснение этого состоит в том, что область ЛОМ никогда фактически не является гауссовым белым шумом.

Литература

1. A. Cohen, I. Daubechies, J. Feauveau, "Bi-orthogonal bases of compactly supported wavelets," *Coram. Pures and Appl. Math.*, 45, pp. 485–560, 1992.
2. I. Daubechies, "Orthonormal bases of compactly supported wavelets," *Comm. Pure and Appl. Math.*, 41, pp. 909–996, 1988.
3. I. Daubechies, *Ten Lectures on Wavelets*, no. 61 in CBMS-NSF Series in Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia, 1992.
4. D. Donoho, "Unconditional bases are optimal bases for data compression and for statistical estimation," *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, 1, pp. 100–115, 1993.
5. M. Farge, K. Schneider, N. Kevlahan, "Non-Gaussianity and coherent vortex simulation for two-dimensional turbulence using an adaptive orthogonal wavelet basis," *Phys. Fluids.*, 11(8), pp. 2187–2201, 1999.
6. J. Frohlich, K. Schneider, "An adaptive wavelet-vaguelette algorithm for the solution of pdes," *J. Comput. Phys.*, 130, pp. 174–190, 1997.
7. J. Jimenez, A.A. Wray, "The structure of intense vorticity in isotropic turbulence," *J. Fluid Mech.*, 255, pp. 65–90, 1993.
8. N.K.R. Kevlahan, O.V. Vasilyev, A. Cherhabili, "An adaptive wavelet method for turbulence in complex geometries," In *Proceedings of the 16th IMACS World Congress 2000*, 411-39.pdf, IMACS, 2000.
9. S.G. Mallat, *A Wavelet Tour of Signal Processing*. Academic Press, Paris, 1999.
10. W. Sweldens, "The lifting scheme: A custom-design construction of biorthogonal wavelets," *Appl. Comput. Harmon. Anal.* 3(2), pp. 186–200, 1996.
11. W. Sweldens, "The lifting scheme: A construction of second generation wavelets," *SIAM J. Math. Anal.* 29(2), pp. 511–546, 1998.
12. O.V. Vasilyev, C. Bowman, "Second generation wavelet collocation method for the solution of partial differential equations," To appear in *J. Comp. Phys.*, 2000.

EVALUATION OF THE USE OF SECOND GENERATION WAVELETS IN THE COHERENT VORTEX SIMULATION APPROACH

A.M. Logvinov, Y.E. Polenova, G.A. Travin

Belgorod State University, Pobedy, 85, Belgorod, 308015, Russia
pruslan@list.ru

The objective of this study is to investigate the use of the second generation bi-orthogonal wavelet transform for the field decomposition in the Coherent Vortex Simulation of turbulent flows. The performances of the bi-orthogonal second generation wavelet transform and the orthogonal wavelet transform using Daubechies wavelets with the same number of vanishing moments are compared in *a priori* tests using a spectral direct numerical simulation (DNS) database of isotropic turbulence fields: 256^3 and 512^3 DNS of forced homogeneous turbulence ($Re_\lambda = 168$) and 256^3 and 512^3 DNS of decaying homogeneous turbulence ($Re_\lambda = 55$). It is found that bi-orthogonal second generation wavelets can be used for coherent vortex extraction. The results of *a priori* tests indicate that second generation wavelets have better compression and the residual field is closer to Gaussian. However, it was found that the use of second generation wavelets results in an integral length scale for the incoherent part that is larger than that derived from orthogonal wavelets. A way of dealing with this difficulty is suggested.

Key words: bi-orthogonal wavelet transforms, Daubechies wavelets, coherent vortex, *a priori* tests.

РАССЕЯНИЕ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В ОРИЕНТИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

В.С. Малышевский, Д.А. Трухов

Южный Федеральный университет, факультет физики,
344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5
e-mail: vmalysh@phys.rsu.ru

Проведено численное моделирование процесса рассеяния ускоренных многозарядных ионов при осевом каналировании в кристаллах. Исследованы угловые распределения коллимированных пучков ионов после прохождения кристаллов вдоль осевого направления. Установлена ориентационная зависимость среднего угла многократного рассеяния многозарядных ионов на атомных цепочках от угла влета частиц в кристалл. Показано, что угол многократного рассеяния ионов при осевом каналировании превосходит угол многократного рассеяния при движении в соответствующей аморфной среде. Исследовано влияние процессов перезарядки на угловые распределения коллимированных и квазиизотропных пучков многозарядных ионов после прохождения ориентированных кристаллов и дана интерпретация обнаруженным недавно эффектам охлаждения и нагрева пучков ионов.

Ключевые слова: многозарядные ионы, каналирование, многократное рассеяние, математическое моделирование.

Введение

Пристальное внимание к исследованиям электромагнитных взаимодействий заряженных частиц с кристаллами обусловлено предсказанием и обнаружением ряда неизвестных ранее физических эффектов, которые открыли новые возможности не только в изучении фундаментальных закономерностей во взаимодействии частиц с веществом, но и в области прикладной физики. История открытия и изучения многих из них насчитывает уже не один десяток лет и к настоящему времени накоплен большой теоретический и экспериментальный материал в этой области физики (см., например, [1]).

В связи с появившимися в последнее время техническими возможностями получать и ускорять до высоких энергий тяжелые многозарядные ионы интерес к проблеме использования пучков таких ионов в ядерной физике и физике конденсированных состояний значительно возрос. Взаимодействие ускоренных многозарядных ионов с ориентированными кристаллами приводит к ряду новых эффектов, которые требуют дополнительного теоретического изучения. Это связано с тем, что при проникновении многозарядного иона в твердое тело его зарядовое состояние быстро изменяется благодаря обмену электронами между ионом и твердым телом, что в свою очередь изменяет характер взаимодействия иона со средой. Интерес к этому явлению был впервые проявлен Н. Бором [2] и не ослабевает до сих пор.

На сегодняшний день наиболее надежным способом количественного описания таких режимов движения ионов через кристаллы является математическое моделирование процессов ион-атомных соударений, в том числе сопровождающихся перезарядкой ионов. В настоящей работе методами математического моделирования рассмотрены некоторые особенности каналирования многозарядных ионов в кристаллах.

1. Осевое каналирование многозарядных ионов

Рассмотрим особенности осевого каналирования многозарядных ионов в кристалле кремния. Структура осевых каналов $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ показана на рис. 1.

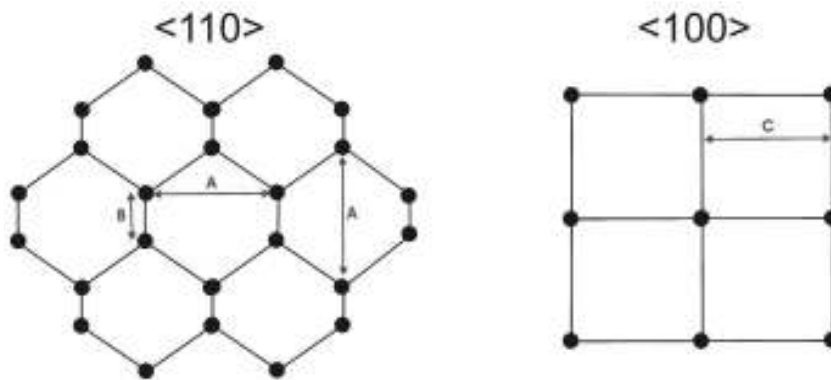


Рис.1. Структура осевых каналов кремния вдоль направления <110> и <100>, A = 4Å, B=1.5Å, C=1.9 Å

Основная идея, существенно упрощающая теоретический анализ эффекта каналирования в целом, состоит в замене истинного потенциала атомов кристалла потенциалом, усредненным по координатам вдоль кристаллографического направления [3]. Такое приближение особенно эффективно, если угол падения частицы на ось или плоскость достаточно мал. Основа непрерывного приближения заключается в предположении, что в отклонение траектории дают вклад много последовательных атомов. При этом закономерности движения частицы в кристалле будут отличаться от закономерностей ее движения в аморфном веществе. При движении вдоль атомных цепочек в непрерывном приближении вводится средний потенциал на расстоянии r от оси цепочки, т.е.

$$U(r) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} V(R = \sqrt{z^2 + r^2}) dz, \tag{1}$$

где $V(R)$ – ионно-атомный потенциал и d – расстояние между атомами в цепочке.

Уравнения движения, описывающие поперечное движение каналированных нерелятивистских ионов в осевом канале кристалла, имеют вид:

$$\begin{aligned} dp_x / dt &= F_x(x, y), & dp_y / dt &= F_y(x, y), \\ dx / dt &= p_x / M_1, & dy / dt &= p_y / M_1, \end{aligned} \tag{2}$$

где p_x и p_y компоненты поперечного импульса, $F_x(x, y)$ и $F_y(x, y)$ - компоненты силы, действующей на ион массой M_1 в канале, $F_x(x, y) = -\partial U(x, y) / \partial x$, $F_y(x, y) = -\partial U(x, y) / \partial y$. Потенциальная энергия не зависит от продольной координаты z , поэтому соответствующая компонента импульса сохраняется.

Потенциальную энергию иона в поле отдельной атомной цепочки на расстоянии r от нее будем аппроксимировать формулой Дойля-Тёрнера [4]:

$$U(r) = \frac{Z_1 e^2}{a_0} \frac{2a_0^2}{d} \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{B_i + u_{\perp}^2} \exp\left[-\frac{r^2}{B_i + u_{\perp}^2}\right] \tag{3}$$

где Z_{1e} – заряд каналированного иона, a_0 – Борковский радиус, u_{\perp}^2 – среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла в поперечном направлении, d – продольный период атомов в цепочке. Константы a_i и $B_i = b_i/(2\pi)^2$ зависят от типа кристалла. Параметры потенциала для кристалла кремния (размерность величин: $[a_i]=\text{Å}$, $[b_i]=\text{Å}^2$, $[\sqrt{u_{\perp}^2}]=\text{Å}$) приведены в таблице:

a_1	b_1	a_2	b_2	a_3	b_3	a_4	b_4	$\sqrt{\langle u_{\perp}^2 \rangle}$
2.1293	57.7748	2.5373	16.4756	0.8349	2.8796	0.3216	0.3860	0.075

Потенциальная энергия иона в канале является суперпозицией потенциальных энергий в поле отдельных цепочек и для направления $\langle 110 \rangle$ в кристалле кремния показана на рис. 2.

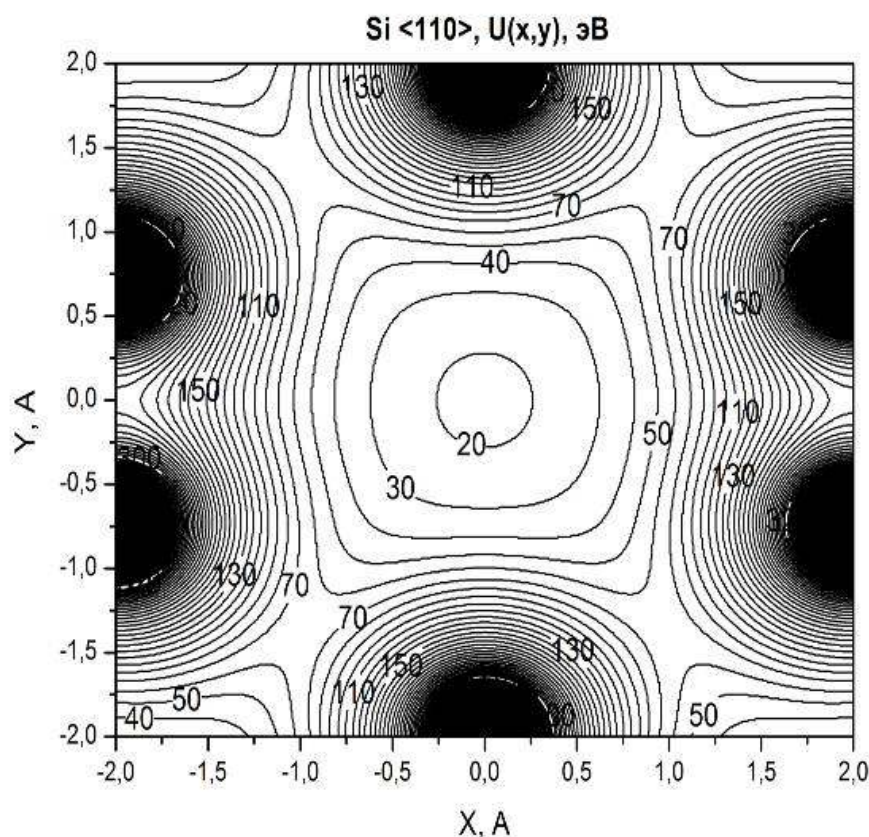


Рис. 2. Распределение потенциала в поперечной плоскости осевого канала $\langle 110 \rangle$ кремния

Система уравнений (2) в потенциальном поле, образованном отдельными цепочками (3), решалась численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка. При решении системы уравнений начальные условия задавались в виде координаты точки влета и начального угла относительно атомных цепочек. При моделировании прохождения пучка ионов через ориентированный кристалл координаты начальной точки генерировались случайным образом. При анализе прохождения квазиизотропных пучков через кристалл начальный угол влета также генерировался случайным образом. В зависимости от задаваемых начальных условий в канале реализуются различные по характеру траектории. Траектории могут быть финитными, т.е. ограниченными в пределах одно-

го канала, или нерегулярными, т.е. пересекающими несколько каналов при движении через кристалл. Пример таких траекторий показан на рис. 3 и 4.

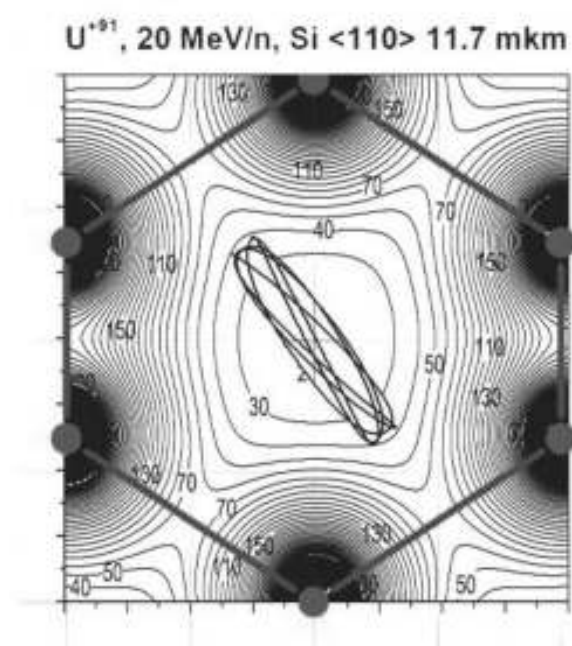


Рис.3. Поперечная траектория иона при нулевом угле влета вдоль осевого канала $\langle 110 \rangle$ кремния и точке влета вблизи центра канала

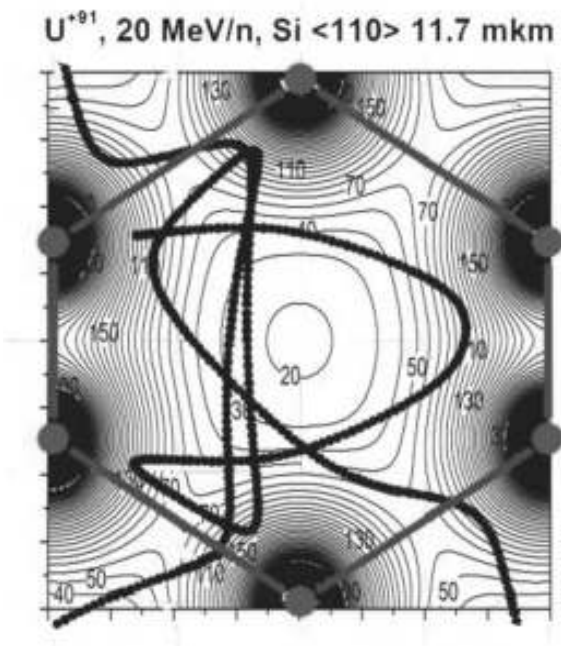


Рис.4. Поперечные траектории ионов при нулевом угле влета вдоль осевого канала $\langle 110 \rangle$ кремния и точке влета вблизи атомной цепочки

2. Моделирование процессов перезарядки

Исследованию равновесных зарядовых состояний ускоренных ионов при их прохождении через аморфные твердые тела посвящено достаточно много работ [например, 5-7], в которых достигнут значительный прогресс в понимании наблюдаемых закономерностей. К сожалению, детальные расчеты динамики каналирования многозарядных ионов с учетом эффектов перезарядки упираются в знание сечений соответствующих процессов и их зависимости от прицельного параметра. Существующая теория ион-атомных столкновений, хотя и развивается интенсивно в настоящее время, тем не менее, еще не дает надежных данных относительно вероятностей перезарядки ионов в кристаллах и их зависимости от прицельного параметра. Поэтому для оценок зависящих от текущего заряда иона q сечений захвата $\sigma_c(q)$ и потери $\sigma_l(q)$ электронов можно использовать аппроксимацию Бора и Линдхарда [8]. С учетом эмпирических поправок, приведенных в работе [9], указанные формулы неплохо согласуются с имеющимися экспериментальными данными в широком диапазоне энергий.

Значения сечений определяют характерный прицельный параметр захвата $\rho_c(q) = \sqrt{\sigma_c(q)}/\pi$ или потери $\rho_l(q) = \sqrt{\sigma_l(q)}/\pi$ электрона. Для различных энергий и ионов соответствующие сечения и прицельные параметры приведены на рис. 5 и 6. Предлагаемый алгоритм, который позволяет промоделировать влияние процессов одноклеточной перезарядки на рассеяние многозарядных ионов в кристалле, состоит в следующем: если в процессе движения иона сближение с какой-либо атомной цепочкой становится меньше чем $\rho_c(q)$, то заряд иона уменьшается на единицу, если же сближение с атомной цепочкой становится меньше чем $\rho_l(q)$, то заряд иона увеличи-

вается на единицу. При этом проверка значения прицельного параметра на выполнение того или иного условия происходит на шаге равном времени пролета между двумя соседними атомами в цепочке.

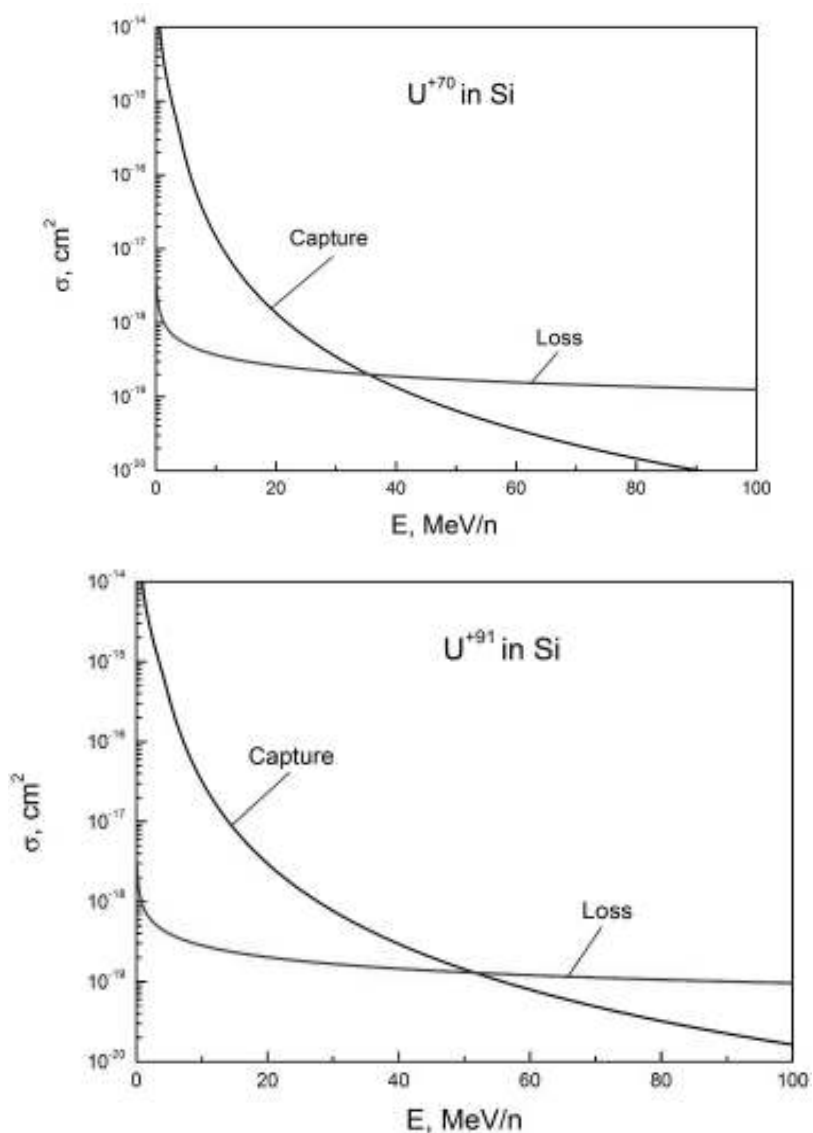


Рис.5. Зависимость от энергии ионов урана сечения захвата и потери электрона для двух различных зарядовых состояний.

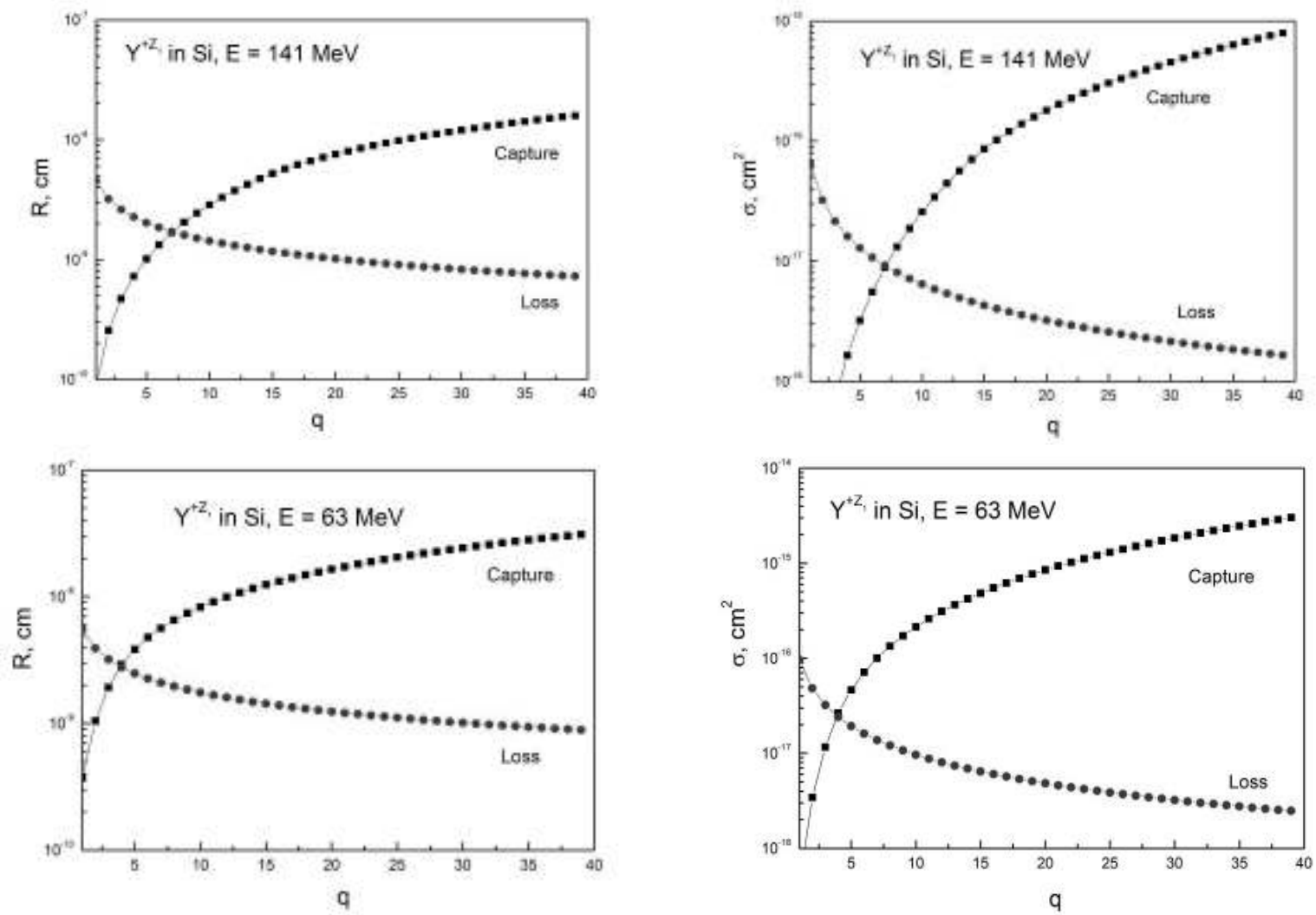


Рис.6. Зависимость от текущего зарядового состояния сечений и характерных прицельных параметров перезарядки для двух различных энергий ионов иттрия.

3. Рассеяние коллимированных пучков многозарядных ионов

Исследование зарядовых распределений коллимированных пучков многозарядных ионов высокой энергии показало, что при углах меньше критического в зарядовых распределениях присутствует так называемый «замороженный заряд», т.е. начальное зарядовое состояние. Причем доля его почти на порядок превышает вклад остальных зарядовых состояний. Увеличение угла влета до значений, превосходящих критический угол каналирования в несколько раз, приводит к смещению максимума в зарядовом распределении в область, соответствующую равновесному заряду при хаотическом движении. Такое поведение распределения по зарядовым состояниям при различных углах влета показано на рис.7.

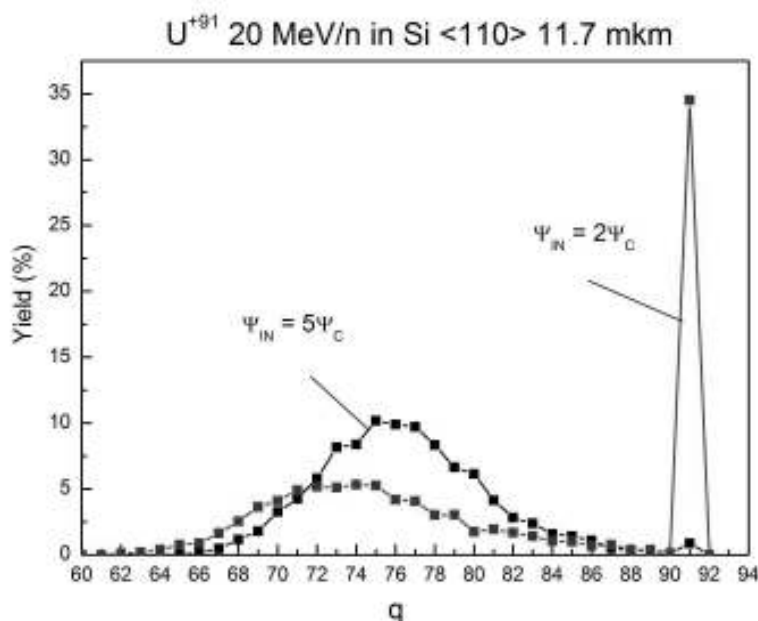


Рис.7. Распределение по зарядовым состояниям ионов урана с энергией 20 МэВ/н после прохождения кристалла кремния при различных ориентациях вдоль осевого направления <110>

Угловые распределения коллимированного пучка ионов, прошедшего кристалл вдоль осевого направления, имеют интересную особенность. Во-первых, в силу сделанного выше замечания, влияние перезарядки на угловые распределения каналированного пучка незначительно. Во-вторых, пучок, падающий вдоль оси канала, на выходе имеет угловое распределение близкое к распределению Гаусса. Если же угол влета не равен нулю, то прошедшие частицы формируют за кристаллом кольцеобразные распределения, обусловленные эффектом радужного рассеяния ионов на отдельных атомных цепочках. На рис.8 показаны рассчитанные угловые распределения многозарядных ионов урана, прошедших тонкий кристалл кремния вдоль осевого направления <110>. Полученные результаты позволяют построить статистическое распределение по углам отклонения ионов от первоначального направления и определить ориентационную зависимость среднеквадратичного угла рассеяния ионов от угла влета в кристалл относительно осевого направления. Результаты такого анализа приведены на рис. 9. Среднеквадратичный угол отклонения каналированных ионов от первоначального направления при углах влета близких к критическому к углу каналирования превышает среднеквадратичный угол рассеяния в аналогичной аморфной среде. При меньших углах влета многократное рассеяние подавлено. Этот результат находится в соответствии с полученными ранее данными для каналирования электронов и позитронов в работе [10].

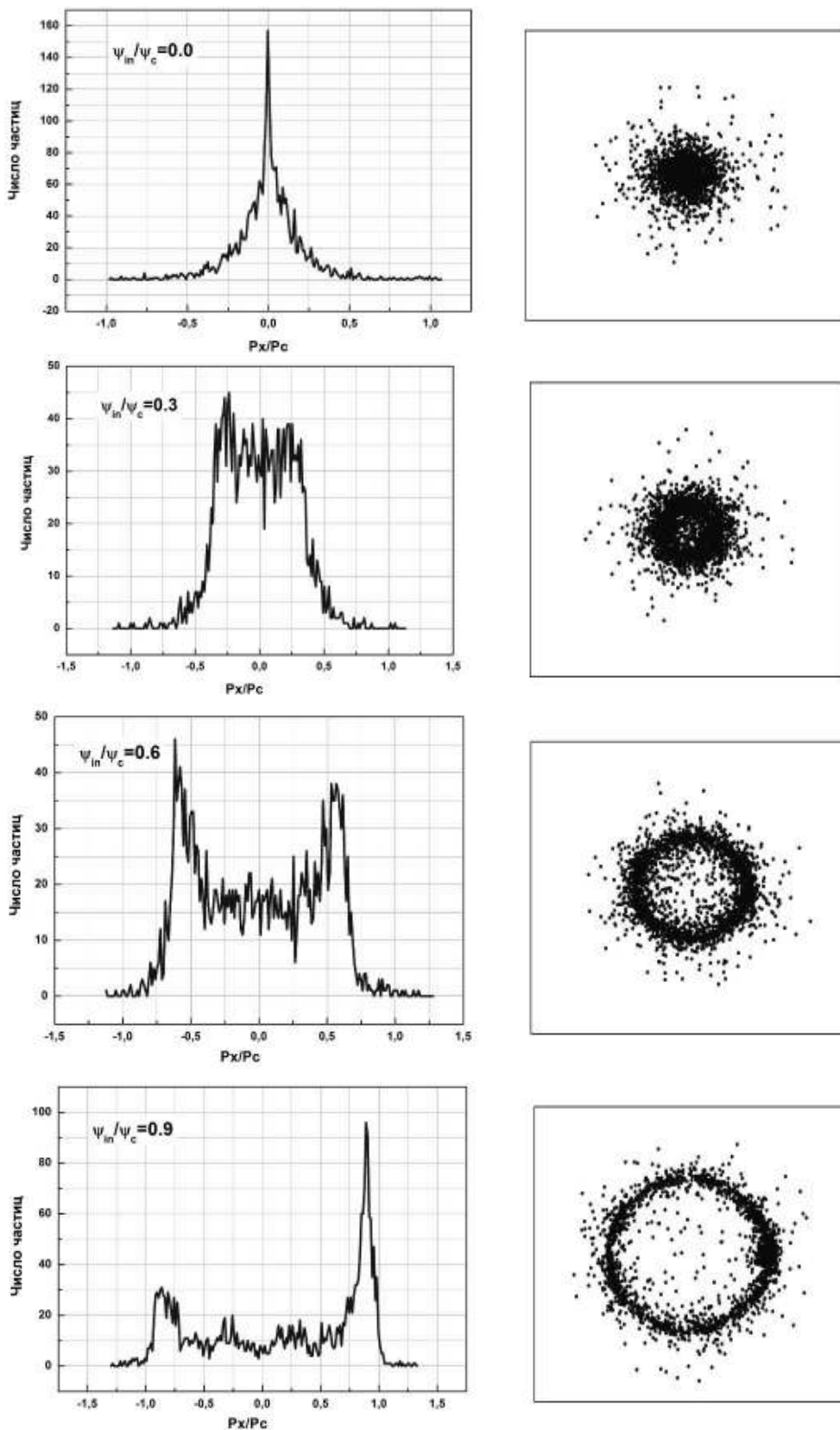


Рис. 8. Угловые распределения ионов U^{+91} с энергией 20 МэВ/н, прошедших кристалл кремния толщиной 11.7 мкм вдоль осевого канала $\langle 110 \rangle$ при различных начальных углах влета Ψ_{in} , выраженных в единицах критического угла каналирования Ψ_c . Распределение моделировалось расчетом 2500 траекторий

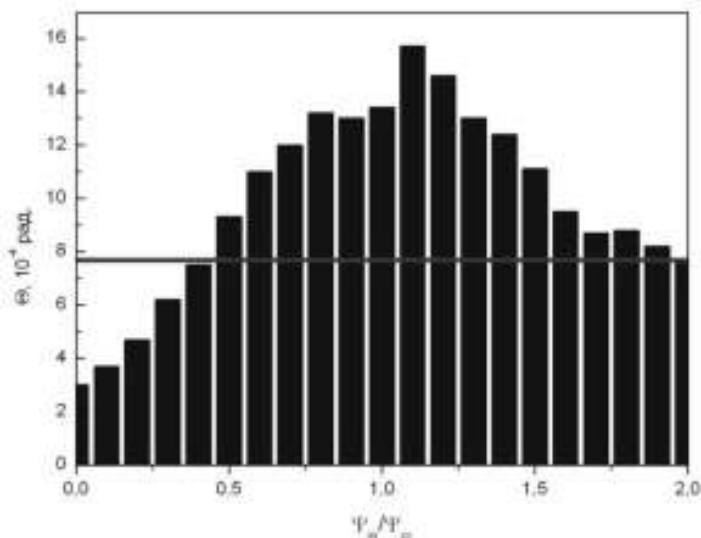


Рис. 9. Среднеквадратичное отклонение ионов U^{+91} с энергией 20 МэВ/н, прошедших кристалл кремния толщиной 11.7 мкм вдоль осевого канала $\langle 110 \rangle$ при различных начальных углах влета. Прямой линией показан угол многократного рассеяния в соответствующей аморфной среде. Распределение моделировалось расчетом 2500 траекторий

4. Рассеяние квазиизотропных пучков многозарядных ионов

Недавно в работах [11-13] было сообщено об экспериментальном обнаружении нарушения правила обратимости при каналировании и блокировании многозарядных ионов. Согласно этому правилу, в частности, первоначально изотропное угловое распределение ионов должно сохранять изотропность и после прохождения ионов через кристалл. Авторы [11-13] направляли на разные кристаллы пучки многозарядных ионов различных энергий с квазиизотропным распределением по углам (аналог экспериментов по блокировке с точечным изотропным источником α -частиц) и наблюдали анизотропию выходного пучка. В одних случаях, вдоль кристаллографических плоскостей или осей наблюдается увеличение выхода в угловом распределении (поперечное «охлаждение»), в других случаях – уменьшение количества частиц в этих направлениях (поперечный «нагрев»). При низкой энергии наблюдается так называемая «лунка» в угловом распределении (нагрев), а при высокой имеет место пик (охлаждение), т.е. переход от охлаждения к нагреву происходит при уменьшении энергии пучка ионов. Очевидно, что объяснение этого явления следует искать в особенностях эффекта перезарядки каналированных ионов, а именно в зависимости вероятности обмена зарядом между ионом и атомами кристалла от прицельного параметра.

Результаты моделирования для квазиизотропного пучка ионов иттрия с различными энергиями показаны на Рис.10. Как видно из приведенных результатов, в соответствии с экспериментальными данными [12] при уменьшении энергии ионов со 141 МэВ до 63 МэВ происходит значительное уменьшение числа частиц, прошедших кристалл вдоль кристаллографического направления, т.е. наблюдается эффект «нагрева». При энергии 141 МэВ в число частиц прошедших вдоль оси несколько больше, чем при отличных от нуля углах вылета (эффект «охлаждения»). Физическую причину наблюдаемых явлений можно понять, если проанализировать распределение по зарядовым состояниям прошедшего кристалл пучка ионов (Рис.11). Средний заряд ионов иттрия при энергии 63 МэВ равен, примерно, $\bar{q} \approx 5$. Как видно из Рис.6 при этом $\rho_l(\bar{q}) \leq \rho_c(\bar{q})$. При энергии же 141 МэВ средний заряд $\bar{q} \approx 7$ и, как следует из того же рис. 6, наоборот $\rho_l(\bar{q}) \geq \rho_c(\bar{q})$. Это обстоятельство является решающим для понимания эффектов нагрева и охлаждения.

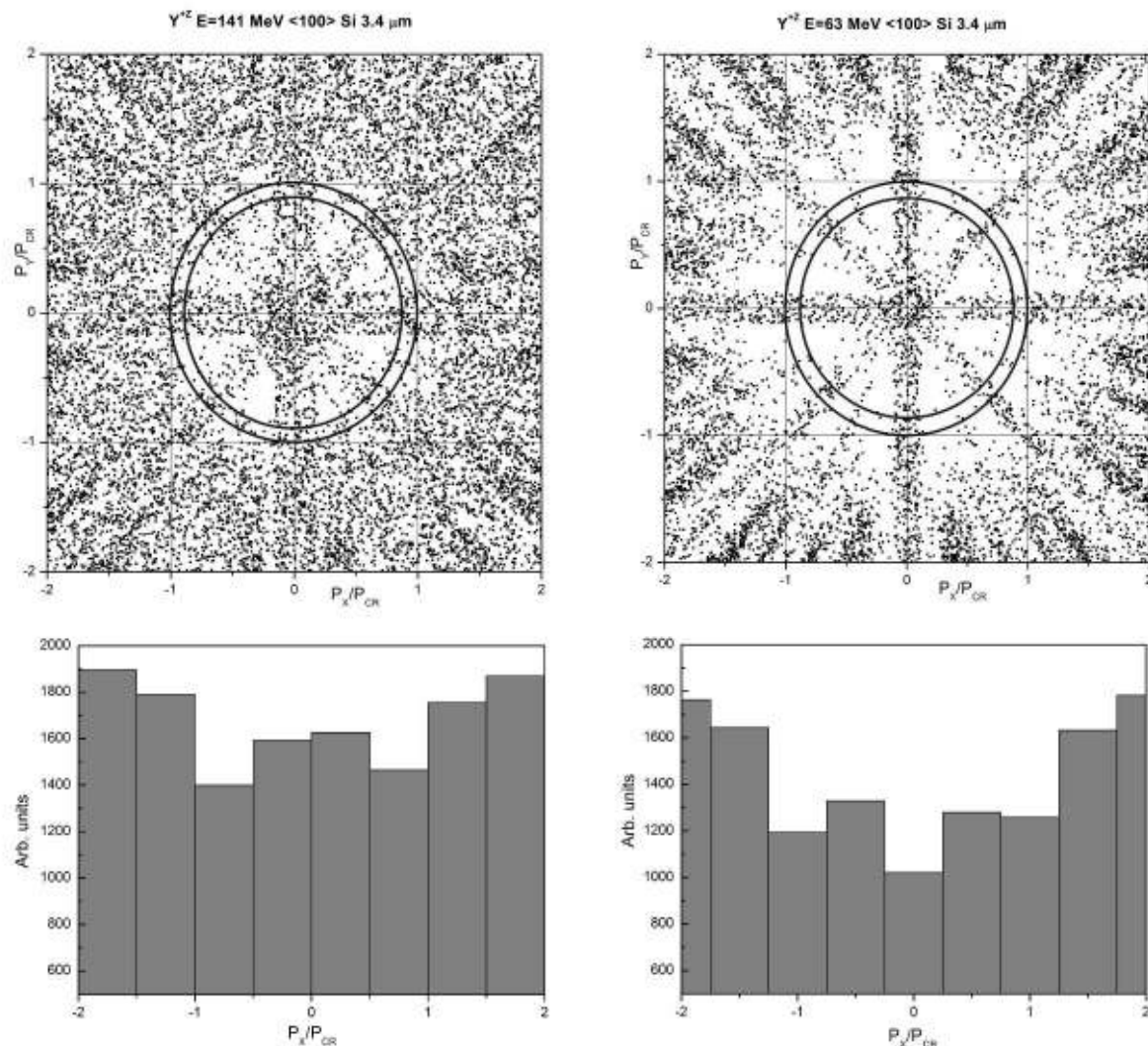


Рис. 10. Угловые распределения квазиизотропного пучка ионов иттрия, прошедшего кристалл кремния толщиной 3.4 мкм вдоль осевого канала <100> при различных начальных энергиях. Распределение моделировалось расчетом 15000 траекторий

Действительно, рассмотрим, например, ион с заданным зарядом и с заданной поперечной энергией. Его поперечное движение управляется цепочечным потенциалом, отнесенным к единичному заряду $u(\rho)$, который является убывающей функцией ρ . Если на расстоянии ρ произойдет изменение заряда (потеря или захват одного электрона), поперечная энергия иона изменяется на $+u(\rho)$ при потере электрона и на $-u(\rho)$ при захвате. Для качественного объяснения эффекта введем в рассмотрение средние радиусы захвата и потери ρ_c и ρ_l , соответственно. Когда достигается равновесие в зарядовом распределении ионов, то в среднем происходит одинаковое число потерь и захватов электронов. Рассмотрим ситуацию, в которой ион проходит через цикл, состоящий из равного числа n захватов и потерь электронов. В результате цикла процессов захвата и потери поперечная энергия иона изменится по абсолютной величине и станет равной $n[u(\rho_l) - u(\rho_c)]$. Таким образом, в соответствии с результатами

нашего моделирования, если $\rho_l > \rho_c$, то в этом случае $u(\rho_l) < u(\rho_c)$, и цикл приведет к уменьшению поперечной энергии, т.е. к охлаждению и, наоборот, если $\rho_l < \rho_c$, то $u(\rho_l) > u(\rho_c)$, что приведет к увеличению поперечной энергии, т.е. к нагреву. Эффективность нагрева или охлаждения будет высока, если, во-первых, величины ρ_c и ρ_l сильно отличаются друг от друга а, во-вторых, если велики сечения обмена зарядами, что справедливо в случае каналирования тяжелых ионов при средних скоростях.

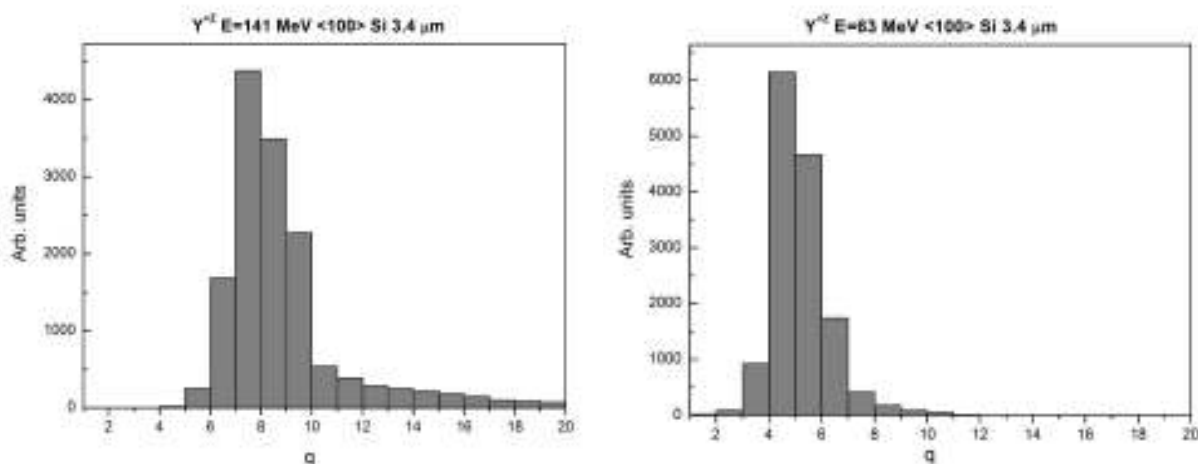


Рис. 11. Распределение по зарядовым состояниям квазиизотропного пучка ионов иттрия, прошедшего кристалл кремния толщиной 3.4 мкм вдоль осевого канала <100> при различных начальных энергиях. Распределение моделировалось расчетом 15000 траекторий

Заключение

Проведенное численное моделирование прохождения ускоренных многозарядных ионов через ориентированные кристаллы позволяет сделать следующие выводы:

- при углах влета в кристалл меньше критического в зарядовых распределениях коллимированных пучков присутствует «замороженный заряд», т.е. начальное зарядовое состояние. Причем доля его значительно превышает вклад остальных зарядовых состояний;
- увеличение угла влета до значений, превосходящих критический угол каналирования в несколько раз, приводит к смещению максимума в зарядовом распределении в область, соответствующую равновесному заряду при хаотическом движении;
- при ненулевых углах влета в кристалл прошедшие ионы формируют за кристаллом кольцеобразные распределения, обусловленные эффектом радужного рассеяния на отдельных атомных цепочках;
- среднеквадратичный угол отклонения каналированных ионов от первоначального направления при углах влета близких к критическому углу каналирования превышает среднеквадратичный угол рассеяния в аналогичной аморфной среде;
- предложенная ступенчатая модель одноэлектронной перезарядки адекватно описывает наблюдаемые особенности прохождения квазиизотропных пучков многозарядных ионов через кристаллы и позволяет объяснить эффекты «охлаждения» и «нагрева»;
- проявление эффектов охлаждения или нагрева квазиизотропных пучков тяжелых многозарядных ионов определяется зависимостью вероятностей захвата и потери электронов от прицельного параметра при взаимодействии ионов с атомными цепочками, что и изменяет характер их углового распределения.

Итак, мы видим, что процессы перезарядки существенно сказываются на динамике прохождения многозарядных ионов через кристаллы. Дальнейшее развитие теории ион-атомных столкновений в кристаллах позволит не только получить надежные данные о вероятностях перезарядки ионов в кристаллах, но и развить теорию каналирования многозарядных ионов. Исследования в этой области, несомненно, помогут найти ответы на многие вопросы современной электродинамики многозарядных ионов в кристаллах и дадут ключ к созданию новых технологий в экспериментальной и прикладной физике.

Литература

1. Cohen C., Dauvergne D. High energy ion channeling. Principles and typical applications. // Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. – 2004. – V. B 225 – P. 40-71.
2. Bohr N. The penetration of atomic particles through matter. // Det. Kgl. Dan. Vid. Sel. Mat. Fys. Medd. – 1948. – V. XVIII. – P. 425-569.
3. Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles. // Kgl. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. – 1965. – V. 34, #14. – 64 p.
4. Doyle P.A., Turner P.S. Relativistic Hartree-Fock X-ray and Electron Scattering Factors. // Acta Cryst. – 1968. – V. A24. –P. 390-397.
5. Betz H.D. Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media. // Rev. Mod. Phys. – 1972. – V. 44. – P. 465-539.
6. Shima K., Kuno N., Yamanouchi M. Systematic of equilibrium charge distributions of ions passing through a carbon foil over the ranges $Z=4-92$ and $E=0.02-6$ MeV/u. // Phys. Rev. – 1987. – V. A 40. – P. 3557 – 3570.
7. Shima K., Kuno N., Yamanouchi M., Tawara H. Equilibrium Charge Fractions of Ions of $Z = 4-92$ Emerging from a Carbon Foil. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1992 – V. 51. – C. 173-241.
8. Bohr N., Lindhard J. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.. -1954. V. – 28. № – 7.
9. Knudsen H., Haugen H.K., Hvelplund P. Single-electron-capture cross section for medium- and highly charged ions colliding with atoms. // Phys.Rev. – 1981. – V. A23. C. – 597-610.
10. А.И. Ахиезер, Н.Ф.Шульга. Излучение релятивистских частиц в монокристаллах. // Успехи физических наук. – 1982 – Т. 137. С – 561-604..
11. Assmann W. et al. Transversal cooling or heating of channeled ions by electron capture and loss. / W. Assmann, H. Huber, S.A. Karamian, F. Gruner, H.D. Mieskes, J.U. Andersen, M. Posselt, B. Schmidt // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 83, #9. – P. 1759 – 1762.
12. Schubert M. et al. Cooling and heating of channeled ions and corresponding charge state distributions. / M. Schubert, F. Gruner, W. Assmann, F. Bell, A. Bergmaier, L. Goergens, O. Schmelmer, G. Dollinger, S. Karamian // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. – 2003 – V. B 209. – P. 224-232.
13. Gruner F. Transverse cooling and heating in ion channeling. / F. Gruner, W. Assmann, F. Bell, M. Schubert, J.U. Andersen, S. Karamian, A. Bergmaier, G. Dollinger, L. Gorgens, W. Gunther, M. Toulemonde. // Phys. Rev. – 2003. – V. B 68. – P. 174104-1–174104-12.

SCATTERING OF THE MULTIPLY CHARGED IONS IN THE ORIENTED CRYSTALS

V.S. Malyshevsky, D.A. Trukhov

Southern Federal University, Department of Physics,
344090, Rostov-on-Don, Zorge Str., 5
e-mail: vmalysh@phys.rsu.ru

A numerical simulation of the accelerated multi-charged ions scattering in the axial channeling in crystals have been carried out. The angular distributions of collimated beams of ions after passing through the crystals along the axial direction are investigated. An orientation dependence of the average angle of multiple scattering of multi-charged ions by the atomic chains is established. The angle of multiple scattering of ions in the axial channeling is higher than angle of multiple scattering in the amorphous matter. The occurrence of cooling or heating effects and the detailed structure of the angular distribution depend on the impact parameter dependence of the probabilities for electron capture and loss.

Key words: multi-charged ions, channeling, multiple scattering, numerical simulation.

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ СИСТЕМ ТВЕРДЫХ ДИСКОВ

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева

Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14
Bondarev@bsu.edu.ru

Предложена имитационная модель, предназначенная для изучения структуры плотноупакованных систем твердых дисков. Основываясь на физических механизмах, ответственных за формирование плотноупакованных систем частиц: базовый слой, случайный выбор и пристенный эффект, разработан новый метод «близкие соседи» и алгоритм, позволяющий управлять формированием структуры случайной упаковки. Проведены компьютерные эксперименты, с целью анализа зависимости структурных характеристик, таких как интегральная плотность упаковки и среднее координационное число от вероятности выбора позиций устанавливаемых частиц. Выявлено новое состояние RCP-упаковки, получившее название полусвязанного состояния.

Ключевые слова: случайная упаковка, система частиц, плотность упаковки, координационное число.

Введение

Случайные упаковки однородных твердых частиц (random close packing, RCP), взаимодействующих контактным путем и обладающие неограниченными парными силами отталкивания, представляют большой интерес как полезные модели физических систем, таких как простые жидкости, стекла и аморфные материалы [1-3]. Кроме этого, данные объекты имеют фундаментальный характер и для исследований в области гранулированных порошков и пористых материалов [4]. Подходы, основанные на результатах изучения случайных упаковок, также вносят определенный вклад и в понимание закономерностей возникновения беспорядка в твердых телах. Так, например, выявлено, что плотноупакованные системы могут находиться в двух различных состояниях: связанном (dense random packing, DRP), а также в виде случайной свободной упаковки (random loose packing, RLP) [5]. Здесь, под DRP-упаковкой мы будем понимать наиболее плотную случайную упаковку системы частиц, а под RLP-упаковкой – систему частиц, находящуюся в состоянии, которому соответствует наименьшая плотность упаковки.

В двух измерениях, экспериментальные данные для случайных упаковок практически отсутствуют. В основном принято оперировать данными по компьютерному моделированию двумерных случайных упаковок (табл. 1). В данном направлении было проведено достаточное большое число попыток построения плотноупакованных систем частиц, главным образом, путем разработки алгоритмов, основанных на методах их имитационного моделирования [6-8]. Результаты компьютерных экспериментов по определению плотности η RCP-упаковок позволили получить значения, расположенные в диапазоне $0,80 < \eta < 0,89$ [9]. При этом ряд авторов считают, что $\eta = 0,82 \pm 0,02$ является только верхним пределом для плотности RCP-упаковки, другие же утверждают, что это значение также является и нижним пределом. Наличие двух состояний, таких как RLP и DRP для 2D-упаковок, было показано авторами данной статьи еще в 2005 году [11]. В тоже время других данных, подтверждающих возможность существования двух состояний для 2D-упаковок, в научной литературе не обнаружено, что указывает на необходимость проведения дальнейших исследований в данном направлении.

Таблица 1

Плотность упаковки η_{RCP} случайной системы жестких дисков

№ п/п	Плотность упаковки	Год	Ссылка	Авторы
1.	0,81±0,02	1964	[14]	F.H. Stillinger et al.
2.	0,821±0,002	1971	[6]	H.H. Kausch et al.
3.	0,82	1972	[10]	W.M. Visscher, M. Bolsterli
4.	0,830±0,015	1974	[16]	T.J. Quickenden, G.K. Tan
5.	0,82	1977	[40]	D. N. Sutherland
6.	0,85	1980	[41]	K. Kanatani
7.	0,84	1980	[42]	M. Sugiyama
8.	0,866-0,874	1982	[17]	W. Schreiner, K.W. Kratky
9.	0,846	1982	[43]	M. Shahinpoor
10.	0,81±0,02	1983	[9]	J.G. Berryman
11.	0,8180±0,0001	1987	[44]	P.Meakin, R. Jullien
12.	0,795±0,01	1993	[45]	M. Acharyya
13.	0,842	2002	[46]	C.S. O'Hern et al.
14.	0,817±0,004 (RLP) 0,823±0,004 (DRP)	2005	[11]	В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль

В ряде работ большой интерес вызывает исследование мезоструктуры двумерных случайных упаковок, особенно идентификации регулярных областей. Так, Кауш (Kausch) и др. [6], при моделировании процесса роста упаковки под влиянием центральной силы, нашел небольшие треугольные регулярные области. После устранения этих областей им была получена плотность упаковки $\eta_{RCP} \approx 0,82$. Висшер (Visscher) и Болстерли (Bolsterli) [10] моделировали рост двумерных случайных упаковок под влиянием гравитационной силы, и нашли большие области почти квадратной структуры наклоненными на угол приблизительно в 45° от вертикального положения. Увеличение плотности упаковки от $\eta = \pi/4 = 0,785$ для квадратной упаковки до наблюдаемого значения $\eta = 0,82$ ими объясняется более высокой плотностью в граничной области. Они также считают, что и Кауш должен “видеть” эти области для больших кластеров, так как действие центральной силы аналогично одноосному сжатию.

Несмотря на все проведенные исследования, множество вопросов о механизмах и поведении случайных упаковок пока не имеют однозначного ответа. Острота этих проблем, по нашему мнению, связана с отсутствием общего подхода к построению случайных упаковок. Именно по этой причине целью данной работы является создание имитационной модели, основанной на анализе механизмов физических процессов, протекающих при формировании структуры случайной упаковки.

Механизмы формирования плотноупакованных систем

Анализ поведения RCP-упаковок, находящихся в различных структурных состояниях, позволил предложить ряд механизмов формирования плотноупакованных систем частиц. В качестве таких механизмов принято рассматривать механизмы, описывающие возникновение пристенного эффекта [12], наличия затравки, являющейся основой на начальной стадии подготовки к построению упаковки [8], а также механизмы, описывающие способы поиска оптимального расположения частиц [13]. Однако во многих ранее проведенных исследованиях не имеется удовлетворительного описания физических закономерностей, возникающих при действии указанных выше механизмов. Отсутствие адекватного описания структурных механизмов формирования упаковок обусловлено, в первую очередь, тем, что до сих пор так и не выяснено, какие про-



цессы отвечают за изменение структурных свойств случайных упаковок, какова природа образования структуры плотноупакованной системы частиц [13].

В процессе изучения плотноупакованных систем частиц, с целью описания их свойств, авторами были выдвинуты ряд гипотез о структурных механизмах наблюдаемых процессов в исследуемой RCP-упаковке. По нашему мнению, процессы формирования RCP-упаковки протекают в результате комплексного воздействия трех механизмов, таких как (1) построения затравочной области, (2) приоритетности выбора позиций устанавливаемых частиц, (3) возникновения пристенного эффекта.

При формировании случайной упаковки необходимо выбрать определенный вид затравочной области [8], в качестве которой может рассматриваться кластерное образование определенной формы и размера. Форма затравочной области может быть представлена, в случае действия вертикальной однонаправленной силы, в виде «цепочки» частиц, расположенных в некоторой начальной полосе. Концепцию наличия затравочной области в данном случае можно сформулировать следующим образом. Частицы, включенные в состав затравочной области, располагаются в позициях, расстояния между которыми с одной стороны не позволяют иметь перекрывающиеся частицы в самой затравочной области, а с другой стороны – частицам последующего слоя перекрываться с ранее установленными частицами. При этом необходимо выполнение ряда условий, заключающихся в определенных требованиях по ширине полосы установки частиц, а также некоторых ограничений по выбору координат позиций частиц, исключающих возникновение пустот между частицами, которые могут быть больше, чем размер самих частиц. Генерируя различные последовательности позиций частиц, при построении затравочной области, мы также можем выполнять варьирование конечных значений структурных характеристик плотноупакованных систем частиц.

Вторым механизмом, отвечающим за формирование случайной упаковки, нами предлагается механизм приоритетности выбора возможных позиций устанавливаемых частиц. Организация DRP-упаковки требует учета, в качестве основного критерия – принципа минимума потенциальной энергии. В этом случае, приоритетом будут обладать позиции устанавливаемых частиц, которые имеют наименьшие y -координаты. Однако, при переходе к RLP-упаковке, возможные позиции устанавливаемых частиц будут иметь одинаковый приоритет, что можно оценить, используя параметр, который мы будем в дальнейшем называть вероятностью ν выбора позиции устанавливаемой частицы. Задавая различные значения вероятности выбора позиции, мы можем проводить управление структурными характеристиками создаваемой упаковки. Так, для получения DRP-упаковки необходимо выбрать численное значение вероятности равное единице, а для RLP-упаковки – значение, равное: $\nu = 1/2$. Кроме того, возможно построение случайной упаковки, используя и более низкие значения вероятности выбора позиций частиц. Состояние, при котором вероятность выбора позиций частиц будет принимать значение равное нулю, в дальнейшем, мы будем называть полусвязанным состоянием случайной упаковки (*semiconnected random packing, SRP*). Однако в этом случае, для реального управления RCP-упаковкой, мы должны включить в рассмотрение, кроме однонаправленной вертикальной силы (например, гравитационной), дополнительную внешнюю силу, имеющую противоположную направленность. В качестве такой силы можно рассматривать газовый или жидкостной поток, препятствующий частицам занимать позиции с минимальной y -координатой. Важной особенностью такого потока является его пульсирующий характер, позволяющий выполнять фиксацию установленных частиц в выбранных позициях.

При формировании случайной упаковки имеет место и третий механизм возникновения случайного процесса, получивший название пристенного эффекта [12]. Пристенный эффект выполняет роль дополнительного фактора, позволяющего вносить ис-

кажения в структуру создаваемой случайной упаковки. При этом важную роль играют форма и положение (например, угол наклона) границы установочной области. Однако при исследовании механизма, ответственного за возникновение пристенного эффекта, необходимо очень тщательно изучить структурные свойства упаковки в приграничной области, поэтому в данной статье мы исключим из нашего рассмотрения анализ данного механизма.

Компьютерные методы генерирования случайных упаковок

Все методы формирования случайных упаковок можно разделить на два класса: динамические методы сжатия случайной свободной конфигурации или расширения системы частиц, а также методы последовательного заполнения некоторого пространства в центральном или одноосном силовом поле при формировании упаковки с наличием затравочной области.

Динамические методы. В большинстве исследований, в качестве основы для динамического метода, принято использовать метод дискретного элемента DEM как непосредственно для подготовки начального расположения частиц, так и для генерации упаковок [14-19]. Обзоры основных динамических методов можно найти в [20-22].

Общий подход, при применении динамических методов, состоит в том, чтобы поместить необходимое число частиц, с диаметрами, намного меньшими, чем их конечный размер, в область установки. Затем диаметры частицы постепенно увеличивают до тех пор, пока не будет достигнуто плотное расположение частиц. Другой вариант подобного подхода, состоит в назначении конечного размера частиц, помещенных в установочную область, стенки которой медленно смещаются внутрь до тех пор, пока необходимая плотность не будет достигнута. Оба способа приводят к практически одинаковым конфигурациям систем частиц. В ряде случаев принято использовать подход, который состоит в моделировании некоторого гравитационного смещения частиц начальной затравки. При этом, частицы определенного размера, попадая в установочную область, находят позицию равновесия, находясь под воздействием гравитационной силы.

В динамических методах движение каждой частицы должно моделироваться с учетом многократных столкновений частиц в течение всего процесса уплотнения, что приводит к большим временным затратам. Кроме того, данные методы также не позволяют выполнять управление состоянием плотноупакованной системы частиц.

Методы последовательного заполнения. Другая группа подходов, названных методами последовательного заполнения, рассматривает системы, подготовленные путем геометрических вычислений, без моделирования динамики частиц [6, 10, 15, 23, 24]. Все методы последовательного заполнения можно, в свою очередь, подразделить на методы перестановок и роста.

В научной литературе описаны несколько методов перестановок, используемых при формировании случайных упаковок одно- и многокомпонентных систем частиц. Обзоры таких методов можно найти в работах Д. Стояна (Stoyan) [25, 26]. Самыми известными из них являются: модель Стиенена, модель прудовых лилий, простая модель последовательного запрета и алгоритм Метрополиса-Гастинга.

В модели Стиенена (Stienen) [25] процесс подготовки упаковки начинается со случайного размещения центров частиц в 2D или 3D-мерной области установки. Каждая частица в упаковке определена с радиусом, равным половине расстояния между ней и ее ближайшим соседом. Полученные частицы системы в этом случае могут об-

ладать либо одним контактом с соседней частицей, либо вообще не иметь каких-либо контактов.

Модель «водоем лилий» [27] также основана на генерации ряда беспорядочно расположенных центров частиц. Частицы первоначально определены с нулевым радиусом. Радиусы частиц постепенно увеличивают и рост определенной частицы останавливается, когда она входит в контакт с другой частицей. Здесь уже каждая частица имеет, по крайней мере, хотя бы один контакт с соседней частицей.

Распределение размера частицы в представленных моделях не может быть заранее определено, можно оказывать влияние только в начальный момент, при определении местоположения генерируемых центров частиц. Также данные модели нельзя применять для моделирования моносистем частиц.

Простая модель последовательного запрета SSI (Simple Sequential Inhibition) [28] определена следующим образом. Частицы одинакового диаметра помещаются случайным образом в область установки. Если новая частица, помещенная таким способом, пересекается с ранее установленной, то данная частица будет отклонена. Процесс останавливается, когда вся установочная область будет заполнена частицами. Отметим, что данный метод генерирует системы частиц, которые практически не имеют никаких контактов друг с другом.

Алгоритм Метрополиса-Гастинга [29, 30] или его различные версии [31] является более эффективным, чем рассмотренные ранее. Сущность метода следующая. Рассмотрим начальное случайное расположение частиц в области установки. Возможно, что при этом, несколько частиц оказались расположены далеко друг от друга в установочной области. Следующее состояние упаковки достигается путем вставки, удаления или перемещения частиц, с определенными вероятностями, которые могут быть предписаны пользователем. Расположения принимаются с вероятностями, названными отношениями Гастинга, которые отличны для операций вставки, удаления и перемещения частиц. В случае отклонения расположение частиц системы остается неизменным. Все вышеупомянутые методы приводят к упаковкам с довольно низкими плотностями упаковки и координационными числами.

В заключение можно также отметить различные коллективно-перестановочные методы [33, 34]. В данных методах число частиц заранее определено в течение процесса подготовки. Первоначально частицы помещены беспорядочно в установочную область. Наложения разрешаются, но их величина уменьшается в течение процесса, путем перемещения, а иногда и изменением размера частиц. При каждом шаге смещения частиц вычисляется от значений величины наложений с её соседями, подобно динамическим методам. Следовательно, эти алгоритмы также являются довольно затратные по времени.

Методы роста, например [7, 32], позволяют получить более плотные расположения. Типичное выполнение производится следующим образом [20]. Упаковки моделируются очень медленной установкой твердых частиц в беспорядочно упакованный слой. Частицы вводятся по одной в потенциальной области падения или перекачивания. Каждый последующий шаг помещает новую частицу в область установки, и переводит ее вниз, пока она не занимает один из доступных ей участков. Позиция поступающей частицы вычисляется чисто геометрически, без анализа динамики системы. Периодические граничные условия устраняют воздействие пристенного эффекта, а начальный слой задает случайность расположения частиц на первом этапе формирования упаковки. Сохранение координат частиц упрощает последующий анализ для близко установленных соседей. В методах роста диаметры частиц могут быть одинаковыми, или могут определяться на основе любого распределения.

Развитием данного метода можно считать метод послойной упаковки, предложенный авторами данной статьи [11]. Предложенный вариант метода несколько отличается от ранее рассмотренного, так как он базируется на методе формирования случайной упаковки частиц, расположенных в виде отдельных цепочек. На первом этапе случайным образом подготавливается начальная цепочка частиц. На втором этапе, после установки частиц нижней цепочки, определяются вакантные места для центров частиц следующей, верхней цепочки. Затем, основываясь на понятии графа-дерева, производится поиск всех возможных ветвей, состоящих из последовательностей непесекающихся частиц. В случае нахождения удовлетворяющей выбранным условиям цепочки частиц, производится их включение в состав упаковки. Преимуществом данного алгоритма можно считать получение достаточно плотного расположения частиц в установочной области, а также высокие значения координационных чисел частиц.

Понижающийся метод, предложенный Баги (Bagi) [35] для 2D-упаковок дисков, можно рассматривать как двумерную версию алгоритма роста. Необходимая область заполняется, начиная от основания, и всегда добавляя по одной частице к уже существующему набору частиц. Геометрическая позиция новой частицы определяется при касании двух предыдущих частиц ниже, или одной из стенок области (без наложений с другими частицами). Новая частица помещается таким образом, чтобы, если бы предыдущие частицы были установлены без смещений, то новая частица была бы в устойчивой позиции, находясь под воздействием направленной вниз силы.

Более эффективный алгоритм, который был разработан Фенгом (Feng) и др. [36, 37], получил название фронтального метода. Фронтальный метод основан на заполнении установочной области по спирали. Вначале в центр установочной области помещается затравка из трех контактирующих между собой частиц. Затем дополнительные частицы одна за другой добавляются к двум ранее установленным частицам. Предложенный метод позволяет производить изотропное геометрическое расположение, однако в случае многокомпонентной системы частиц, по границам области могут остаться большие пустоты, что приводит к отсутствию контактов между сгенерированной упаковкой и границами установочной области.

Полностью отличный алгоритм роста для 2D и 3D-мерных упаковок сферических частиц предлагается Куи (Cui) и Суливаном (O'Sullivan) [38]. Этот метод основан на создании в области установки случайных ячеек, представленных в виде треугольников или тетраэдров. Вписанные в треугольники частицы затем включаются в состав упаковки. Установочная область далее может быть дозаполнена, путем размещения дополнительных частиц в узлах ячеек, которые не накладываясь на установленные ранее частицы, могут контактировать с близкими соседями, аналогично подходу, применяемому в модели «водоем лилий». Однако полученные таким методом упаковки менее плотны, а координационные числа значительно ниже, чем в случае применения других методов роста. Преимуществами данного алгоритма является его простота, а также возможность его обобщения для трехмерного случая.

Формирование случайной упаковки можно проводить, используя так называемый метод многогранников Вороного. Многогранник Вороного представляет собой область пространства, все точки которой расположены ближе к "центральной" частице, чем к любым другим частицам [25]. Для однокомпонентных систем плоскости, образующие грани многогранника Вороного, перпендикулярны отрезкам, соединяющим центральную частицу с ее ближайшими соседями, и делят их строго пополам. В общем случае, для систем с частицами, отличающимися по размерам, разбиение пространства на многогранники, возможно, осуществлять двумя способами: либо проводя радикальные плоскости, либо рассекая отрезки соединяющие ближайших соседей перпендикулярными плоскостями в соотношении радиусов частиц компонентов. Многогранники в

этом случае являются выпуклыми и заполняют все пространство без "зазоров". Метод многогранников Вороного, дает наиболее наглядную геометрическую информацию.

Общий недостаток, присущий большинству методов роста, заключается в возникновении анизотропности структуры системы частиц, приводящей к тому, что сгенерированные случайные упаковки более жестки при вертикальном, чем при горизонтальном сжатии. Также другим недостатком ряда методов роста можно считать наличие незаполненных пустот вблизи границ установочной области.

Алгоритмы генерации случайных плотных упаковок

Алгоритмы генерации случайных плотных упаковок были разработаны на основе предлагаемого нами метода, получившего название «близкие соседи». При моделировании случайной упаковки, в соответствии с данным методом, после построения базового слоя, частицы вводятся по одной вблизи ранее установленных частиц, обладающих наименьшей потенциальной энергией. Вероятности для выбора одной из двух пересекающихся частиц, назначаются, в зависимости от требуемых условий получения структурного состояния, что позволяет выполнять управление формированием случайной упаковки. Наличие «прозрачных» границ установочной области приводит к устранению пристенных эффектов, возникающих вследствие частичного упорядочивания частиц на границах установочной области. Базовый слой упаковки также способен влиять на структурные характеристики, однако данное влияние оказалось существенным только для DRP-упаковки. Эти особенности делают плотноупакованную систему частиц, после окончания ее формирования, действительно случайной независимо от того, в каком состоянии она находится. Сохранение координат позиций установленных частиц упрощает последующий анализ структурных характеристик получаемой упаковки. Предложенный метод размещения частиц в пространстве позволяет исследовать системы с плотностями заполнения, близкими к максимальным, и является, по нашему мнению, наиболее общим методом решения подобных задач.

Рассмотрим алгоритм роста, разработанный на базе метода «близкие соседи». По сравнению с известными методами преимущества предложенного метода могут быть перечислены следующим образом:

1. Генерированные системы частиц представлены в виде случайных упаковок дисков, имеющих геометрическую анизотропию, вызванную воздействием односторонней слабой силы.
2. Диски в установочной области размещены без наложений.
3. Установочная область ограничена «прозрачными» стенами, что позволяет граничным дискам частично располагаться за пределами данной области.

Общий алгоритм имитационного моделирования при этом распадается на три подзадачи:

1. Построение базового (начального) слоя в полосе – задача определения координат центров частиц слоя.
2. Определение механизма установки частиц – задача выбора вариантов расположения частиц, в зависимости от значения вероятности их участия в построении упаковки.
3. Анализ положения граничных частиц – задача контроля размещения частиц вблизи границ установочной области.

Процесс формирования случайной упаковки может быть описан в виде набора следующих этапов. На первом этапе, в пределах нижней границы установочной области, располагается базовый слой (рис. 1), полученный из плотноупакованной регулярной цепочки дисков, имеющих случайные смещения Δu по u -координате в пределах: $0 \leq \Delta u \leq \sigma \sqrt{2}$ (σ – диаметр диска). Величина смещения определялась таким образом, что-

бы расстояние между частицами не превышало значения, которое привело бы к перекрытию устанавливаемых соседних частиц. Массив дисков базового слоя формирует нижнюю границу случайной упаковки.

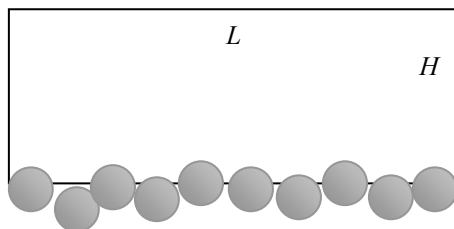


Рис. 1. Базовый слой (L , H – ширина и высота установочной области)

Как только базовый слой сформирован, на втором этапе из массива установленных частиц выбирается рабочий диск. В качестве критерия выбора позиции нового диска берется принцип минимума потенциальной энергии, при его расположении относительно двух ранее установленных дисков. Установка новых дисков производится путем выполнения ряда шагов.

Шаг 1. Выбирается рабочий диск, имеющий наименьшую y -координату и формируется набор дисков, включающий выбранный диск совместно с его соседями.

Шаг 2. Вблизи рабочего диска задаются координаты возможных позиций устанавливаемых дисков. Позиции для установки новых дисков определяются путем геометрических вычислений и исходя из рассматриваемого состояния случайной упаковки. Выбор конкретной позиции новой частицы производится на конкурентной основе, с учетом вероятности ее возможной установки в данной позиции.

Шаг 3. Выполняется проверка на возможность наложения нового диска на другие, ранее установленные частицы, и если имеются такие наложения, то производится пересчет координат центра новой частицы, с учетом его контакта с другим диском, с целью снятия обнаруженного наложения.

Шаг 4. Если сгенерированная частица не выходит за границы установочной области, а также если отсутствуют пересечения с ранее размещенными частицами, то координаты ее центра фиксируются, а сгенерированная частица «включается» в структуру упаковки. Определяются его близкие соседи и сам диск также включается в состав соседей окружающих его частиц. Выход позиции диска за пределы границ установочной области дает право исключить данный диск из состава системы. Однако при установке последующих дисков такая частица также может принимать участие в качестве граничного диска.

Шаг 5. Шаги 1-4 многократно повторяются, пока следующая новая частица не оказывается за пределами верхней границы установочной области. В случае выхода устанавливаемого диска за пределы верхней границы установочной области, определяются правила останова процесса формирования случайной упаковки.

Структурные характеристики случайной упаковки системы дисков

Параллельно с имитационным моделированием также были разработаны алгоритмы расчета таких структурных характеристик как интегральная плотность упаковки η и среднее координационное число Z .

Плотность упаковки. Плотность упаковки является одной из наиболее важных характеристик случайной структуры и определяется как отношение суммарной площади дисков к площади установочной области. Принято различать локальную и интегральную плотности упаковки. Локальная плотность упаковки дает нам информацию о



размещении частиц в отдельном слое случайной упаковки, в то время как интегральная плотность упаковки позволяет нам оценить степень заполнения всего доступного пространства, предоставленного системе частиц. Здесь мы ограничиваемся рассмотрением только интегральной плотности упаковки.

Интегральная плотность упаковки рассчитывалась нами по формуле

$$\eta = \frac{(n_1 + n_2 / 2)S}{LH}, \quad (1)$$

где n_1 и n_2 – число частиц, соответственно, находящихся внутри установочной области и на ее границах; S – площадь диска; L и H – ширина и высота установочной области. При этом предполагалось, что в состав случайной системы будет включена только половина граничных частиц. Это позволяет устранить громоздкие расчеты по определению площадей сегментов граничных дисков и, соответственно, ускорить работу программного комплекса, практически не сказываясь на полученных результатах расчета интегральной плотности упаковки.

Координационное число частицы. Под координационным числом z частицы здесь будем понимать число ее соседей, которые могут быть включены в состав первой координационной сферы, с учетом расстояний между ними и самой частицей. Для расчета координационного числа авторами предложена формула, основанная на выборе экспоненциального закона распределения, близкого к пуассоновскому

$$z = \sum_{i=1}^m \exp\{1 - (r_i / \sigma)^n\}, \quad (2)$$

где r_i – расстояние между частицей и ее i -тым соседом; σ – диаметр частицы; m – число частиц, входящих в область первой координационной сферы.

Таблица 2

Значения степени n для расчета координационных чисел

Степень	Межчастичное расстояние					
	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6
1	0,904837	0,818731	0,740818	0,67032	0,606531	0,548812
2	0,810584	0,644036	0,501576	0,382893	0,286505	0,210136
3	0,718205	0,482874	0,302099	0,17482	0,093014	0,04523
4	0,628701	0,341776	0,156281	0,058332	0,017206	0,003873
5	0,543074	0,225752	0,066342	0,012547	0,001369	7,59E-05
6	0,462291	0,137245	0,021779	0,00146	3,07E-05	1,41E-07
7	0,387237	0,075533	0,005119	7,18E-05	1,03E-07	5,97E-12

Граничным значением для первой координационной сферы было выбрано расстояние численно равное радиусу второй координационной сферы в квадратной регулярной упаковке. Значение степени n подбиралось эмпирически (табл. 2), путем получения значения координационного числа для частиц второй координационной сферы достаточно близким к нулю ($n=6$). В дальнейшем, на основании данных о значениях координационных чисел частиц определялось среднее координационное число Z каждой генерации случайной упаковки.

Результаты компьютерных экспериментов

Применение улучшенной модификации программного комплекса PackLD [39] позволило нам провести ряд компьютерных экспериментов по определению структурных характеристик случайной упаковки. С этой целью было сгенерировано более 200 различных упаковок, находящихся в различных структурных состояниях. Генерации произ-

водились в области $50 \times 50 \sigma$ (σ – диаметр частицы), что позволило исследовать объем совокупности в пределах от 3000 и более частиц и получать стабильные значения структурных характеристик. По результатам компьютерных расчетов строились графики поведения интегральной плотности упаковки и среднего координационного числа в зависимости от значений вероятности выбора позиций устанавливаемых дисков. На выходе создавалась визуализация пространственной структуры случайной упаковки.

Статистическая оценка структурных характеристик приводит к среднему значению интегральной плотности упаковки $\eta_{DRP}=0,829 \pm 0,004$ (среднее координационное число $Z=5,2 \pm 0,3$) для связанной упаковки, к значению $\eta_{RLP}=0,817 \pm 0,004$ (среднее координационное число $Z=4,8 \pm 0,3$) – для свободной упаковки, и к значению $\eta_{SRP}=0,823 \pm 0,004$ (среднее координационное число $Z=5,1 \pm 0,3$) – для полусвязанной упаковки. Интересно отметить, что применение метода «близкие соседи» привело практически к тому же значению интегральной плотности RLP-упаковки, которое было получено нами ранее [11]. Причем это относится не только к усредненному значению плотности упаковки, но и к ее среднеквадратическому отклонению. В тоже время, полученные значения DRP-упаковки уже максимально приблизились к теоретически предсказанному пределу плотности упаковки, численно равному $\eta_{DRP}=0,8295$ [47]. К сожалению, теоретические данные для SRP-упаковки на данный момент отсутствуют, что не позволяет судить о достоверности полученных оценок для полусвязанного состояния. Величину среднего координационного числа для всех состояний RCP-упаковки можно считать удовлетворительной, так как литературные данные имеют достаточно близкие значения, что говорит о надежности полученных данных.

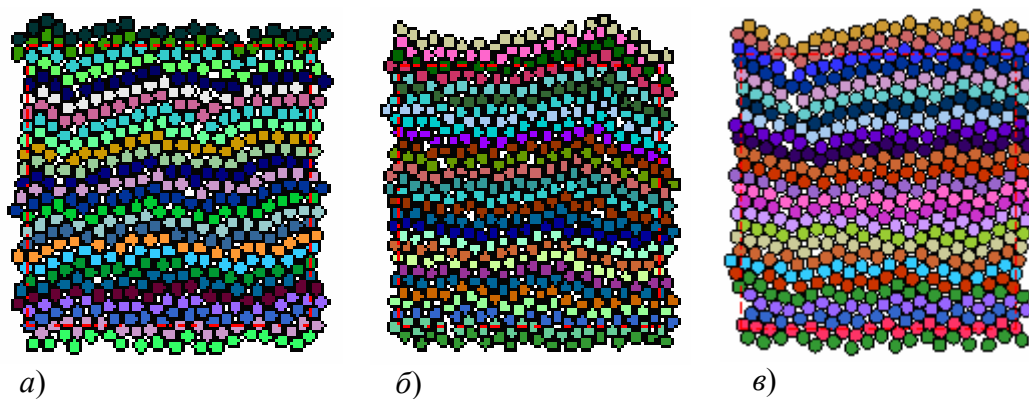


Рис. 2. Результаты имитационного моделирования случайной 2D-упаковки для области генерации $20 \times 20 \sigma$. а) связанное состояние ($\nu=1$); б) свободное состояние ($\nu=0,5$); в) полусвязанное состояние ($\nu=0$)

Анализ построенных, путем имитационного моделирования, случайных упаковок показывает на существенные отличия в топологии данных структур. Так, при рассмотрении плотноупакованной системы частиц, находящейся в связанном состоянии (DRP-упаковка), видно практически полное отсутствие пустот, сравнимых с размерами частиц, составляющих данную упаковку (рис. 2а). В случае перехода в свободное состояние (RLP-упаковка) уже наблюдается появление в упаковке пустот, размеры которых сопоставимы с размерами частиц (рис. 2б). Этот факт приводит к существенному снижению количественных значений структурных характеристик (рис. 3). При формировании полусвязанного состояния такие пустоты объединяются между собой, приводя к появлению в упаковке линейных дислокаций (рис. 2в). При топологии такого типа значения структурных характеристик повышаются, вследствие появления в упаковке доменов, обладающих ярко выраженной гексагональной структурой.

Возвращаясь к рассмотрению структурных механизмов, можно отметить, что при формировании плотноупакованной системы частиц, находящейся в связанном и полусвязанном состояниях, доминирует механизм построения базового слоя. Расположение частиц в базовом слое системы полностью определяет порядок установки последующих частиц системы, приводя к детерминации механизма приоритетности выбора позиций устанавливаемых частиц. Причем, выбор базового слоя в виде сегмента квадратной или гексагональной решетки, при отсутствии пристенного эффекта, может приводить к построению полностью регулярных структур.

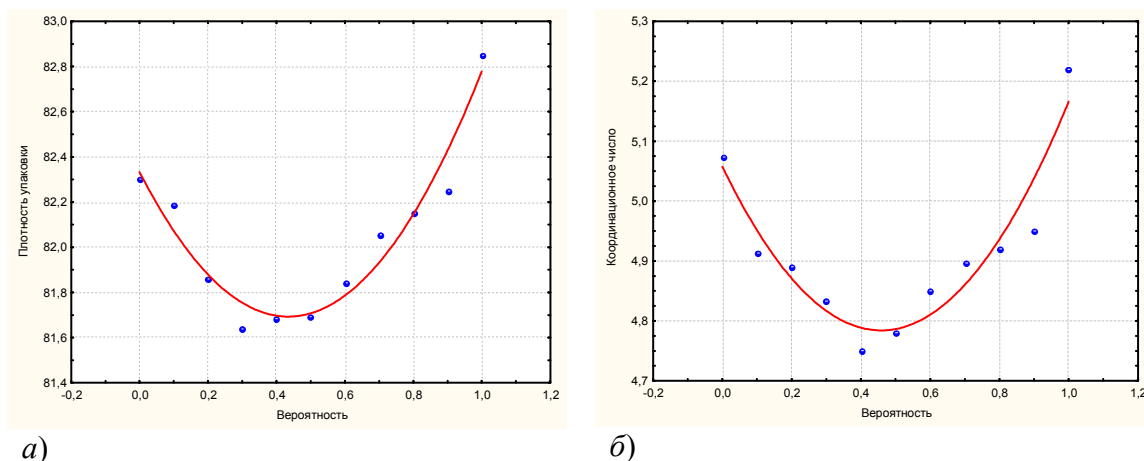


Рис. 3. Зависимости интегральной плотности η 2D-упаковки (а) и среднего координационного числа Z системы (б) от вероятности ν выбора позиции установки частиц (область генерации $50 \times 50 \sigma$)

В случае перехода случайной упаковки в свободное состояние, доминирующим становится механизм приоритетности выбора позиций устанавливаемых частиц. Это приводит к появлению плотноупакованной системы частиц, в которой практически полностью отсутствует корреляция между топологией базового слоя и конечными значениями структурных характеристик. В случае же выбора произвольных значений вероятности установки частиц, механизмы построения базового слоя и приоритетности выбора позиций действуют совместно, приводя к получению промежуточных значений структурных характеристик.

Заключение

В представленной работе приведены результаты анализа структурных механизмов, отвечающих за процессы формирования плотноупакованной системы частиц. При этом рассмотрению подверглись три основных механизма: (1) построения базового слоя, (2) приоритетности выбора возможных позиций устанавливаемых частиц, (3) возникновения пристенного эффекта. Показано, что механизм формирования базового слоя, а также установочный механизм являются основными, в то время как пристенный эффект носит характер вспомогательного механизма.

Основываясь на рассмотренных физических механизмах предложен новый метод «близкие соседи» и на его основе разработан алгоритм, позволяющий управлять формированием структуры случайной упаковки. Построенная, на базе данного алгоритма, имитационная модель предоставляет возможность получать случайные упаковки не только в предельных, но также и в любых других промежуточных состояниях. Кроме того, выявлено новое состояние RCP-упаковки, получившее название полусвязанного состояния. Полученная с помощью имитационной модели визуализация случайной

упаковки также позволила напрямую учитывать особенности ее внутреннего строения. Проведенные компьютерные эксперименты, дали возможность выполнить анализ зависимости интегральной плотности упаковки и среднего координационного числа от вероятности выбора позиций устанавливаемых частиц.

В процессе дальнейших исследований необходимо продолжить исследования в направлении изучения воздействия на структурные характеристики случайных плотноупакованных систем пристенного эффекта, а также применения разработанного алгоритма для формирования трехмерных случайных упаковок.

Литература

1. Bernal J.D., Finney J.L. Random close-packed hard hard-sphere model. II. Geometry of random packing of hard spheres //Discussions of the Faraday Society. – 1967. – V.43. – P.62-69.
2. Bennett C.H. Serially deposited amorphous aggregates of hard spheres //J. Appl. Phys. – 1972. – №43. – P.2727-2734.
3. Truskett T.M., Torquato S., Debenedetti P.G. Quantifying disorder in equilibrium and glassy sphere packings //Phys. Rev. E. – 2000. – V.62, №2. – P.993-998.
4. Martys N.S., Torquato S., Bentz D.P. Universal scaling of fluid permeability for sphere packings //Phys. Rev. E. – 1994. – V.50, №1. – P.403-408.
5. Clarke A.S., Jonsson H. Structural changes accompanying densification of random hard-sphere packings //Phys. Rev. E. – 1993. – V.47, №6. – P.3975-3984.
6. Kausch H.H., Fesko D.G., Tschoegl H.W. The random packing of circles in a plane //J. Colloid Interface Sci. – 1971. – V.37, №3. – P.603-611.
7. Jodrey W.S., Tory E.M. Computer simulation of close random packing of equal spheres //Phys. Rev. A. – 1985. – V.32, №4. – P.2352-2358.
8. Kansal A.R., Truskett T.M., Torquato S. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order //J. Chem. Phys., 2000. – V.113, №12. – P.4844-4851.
9. Berryman J.G. Random close packing of hard spheres and disks //Phys. Rev. A. – 1983. – V.27, №2. – P.1053-1061.
10. Visscher W.M., Bolsterly M. Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions //Nature. – 1972. – V.239, №11. – P.504-507.
11. Бондарев В.Г., Чеканов Н.А., Мигаль Л.В. Алгоритмы управления структурой стохастической упаковки системы жестких дисков //В кн.: Математическое моделирование в образовании, науке и промышленности. – СПб, 2005. – С.62-66.
12. Jodrey W.S., Tory E.M. Rate-dependent RCP densification algorithm //Phys. Rev. A. – 1985. – V.32, №4. – P.2347-2358.
13. Стоян Ю.Г., Гиль Н.И. Методы и алгоритмы размещения плоских геометрических объектов. Киев: Наукова думка, 1976. – 144 с.
14. Stillinger F.H., D'Imazio Jr.E.A., Kornegay R.L. Systematic approach to explanation of the rigid disc phase transition //J. Chem. Phys. – 1964. – Vol.40. – P.1564-1576.
15. Bideau D., Troadec J.P. Compacity and mean coordination number of dense packings of hard discs //J. Phys C: Solid State Phys.. – 1984. – V.17. – P.731-735.
16. Quickenden T.J., Tan G.K. Random packing in two dimensions and the structure of monolayers //J. Colloid Interface Sci. – 1974. – V.48. – P.382.
17. Schreiner W., Kratky K.W. //J. Chem. Soc. Faraday Trans. II. – 1982. – V.78. – P.379.
18. Mason G. Computer simulation of hard disc packings of varying packing density //J. Coll. Interface Sci. – 1976. – V.56, Issue 3. – P.483-491.
19. Ross J.W., Miller W.A., Weatherly G.L. //Acta Metall. – 1982. – V.30. – P.203.
20. Stoyan, D.: Random systems of hard particles: Models and statistics //Chinese Journal of Stereology and Image Analysis. – 2002. – V.7, №1. – P.1-13.
21. Feng Y.T., Owen D.R.J. Filling domains with disks: an advancing front approach //Int. J. Numer. Meth. Engng. – 2003. – No 56. – P.699-713.
22. Bagi K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies //Granular Matter. – 2005. – №7. – P.31-43.
23. Rubinstein M., Nelson D.R. //Phys. Rev. B. – 1982. – V.26. – P.6254.
24. Kuno H. //J. Jpn. Soc. Powder Powder Metall. – 1972. – №19. – P.85.
25. Stoyan D. Models of random systems of non-intersecting spheres //In: Prague Stochastics'98, JCMF. – 1998. – P.543-547.
26. Stoyan D., Stoyan H. Improving ratio estimators of second order point process characteristics //Scand. J. Statist. – 2001. – №27. – P.641-656.



27. Häggström O., Meester R. Nearest neighbour and hard sphere models in continuum percolation //Random Struct. Algor. – 1996. – №9. – P.295-315.
28. Evans J.W. Random and cooperative sequential adsorption //Rev. Mod. Phys. – 1993. – №65. – P.1281-1304.
29. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equations of state calculations by fast computing machines //J. Chem. Phys. – 1953. – №21. – P.1087-1092.
30. Hastings W.K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications //Biometrika. – 1970. – №57. – P.97-109.
31. Torquato, S.: Random heterogeneous materials: Microstructure and Macroscopic Properties. – NewYork: Springer-Verlag, 2002. – P.275-294.
32. Jodrey W.S., Tory E.M. Simulation of close random packing of spheres //J. Simulation. – 1979. – №32. – P.1-12.
33. Moscinski J., Bargiel M., Rycerz Z.A., Jacobs P.W.M. The force biased algorithm for the irregular close packing of equal hard spheres //Molecular Simulation. – 1989. – №3. – P.201-212.
34. Lubachevsky D., Stillinger F.H. Geometric properties of random disk packings //J. Stat. Phys. – 1990. – №60. – P.561-583.
35. Bagi K.: Geometrical modeling of granular assemblies //Acta Tech-nica Acad. Sci. Hung. – 1995. – V.107, №1-2. – P.1-16.
36. Feng, Y.T., Han, K., Owen, D.R.J. Filling domains with disks //In: Bicanic N. (ed): Procs. ICADD-4, 6–8 June 2001, Glasgow, University of Glasgow, 2001. – P.239-250.
37. Feng Y.T., Owen D.R.J. Filling domains with disks: an advancing front approach //Int. J. Numer. Meth. Engng. – 2003. – №56. – P.699-713.
38. Cui L., O’Sullivan C. Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations //Granular Matter. – 2003. – V.5, №3. – P.135-145.
39. Бондарев В.Г., Мигаль Л.В. Стохастическая упаковка систем сферических моночастиц в пространствах низкой размерности //Компьютерные учебные программы и инновации. – 2005. – №12. – С. 23-24.
40. Sutherland D.N. Random packing of circles in a plane //J. Coll. Interface Sci. – 1977. – V.60(1). – P.96-102.
41. Kanatani K-I. An entropy model for shear deformation of granular materials //Lett. Appl. Engng. Sci. – 1980. – №18. – P.989-998.
42. Sugiyama M. A New approach to hard sphere system in equilibrium. III – Two dimensional hard disk system //Prog. Theor. Phys. – 1980. – V.63, №6. – P.1848-1853.
43. Shahinpoor M. A model for crystallization of monomolecular layers on contracting surfaces //J. Coll. Interface Sci. – 1982. – V.85(1). – P.227-234.
44. Meakin P., Jullien R. Simple three-dimensional models for ballistic deposition and restructuring //J. Phys. France. – 1987. – V.48. – P.1651-1655.
45. Acharija M. Structural properties of planar random heap of hard discs //J. Phys. I France. – 1993. – №3. – P.905-908.
46. O’Hern C.S., Silbert L.E., Liu A.J., Nagel S. Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder //Phys. Rev. E. – 2003. – V.68. – P.011306-13.
47. Мигаль Л.В. Математическое и имитационное моделирование стохастической упаковки систем сферических моночастиц в пространствах низкой размерности // Автореф. дис.. канд. физ-мат. наук. – Белгород, 2005. – 21 с.

IMITATING MODELLING OF STRUCTURE DENSEPACKING SYSTEMS OF HARD DISKS

V.G. Bondarev, L.V. Migal, T.P. Bondareva

Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia
Bondarev@bsu.edu.ru

The imitating model intended for studying of structure of densepacking systems of hard disks is proposed. Being based on the physical mechanisms responsible for formation of densepacking systems of particles: the base layer, a casual choice and near-wall effect, is developed a new method «intimate neighbours» and the algorithm, allowing to operate formation of structure of random packing. Computer experiments, for the purpose of the analysis of dependence of structural characteristics, such as integrated density of packing and average coordination number from probability of a choice of positions of established particles are made. The new state of the RCP-packing which have received the name of the semiconnected state is revealed.

Key words: random packing, system of particles, packing density, coordination number.

ПРОСТРАНСТВЕННО ОСЦИЛИРУЮЩИЙ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЙ ТОК В ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Б.Х. Каримов

Ферганский государственный университет, г. Фергана, Узбекистан,
e-mail: karimov1948@rambler.ru

В работе рассмотрен фотовольтаический эффект в оптически активных кристаллах α -HgS. В оптически активных кристаллах α -HgS впервые обнаружен пространственно осциллирующий фотовольтаический ток новой природы, а именно, обусловленный вращением плоскости поляризации света, распространяющегося вдоль оптической оси. Исследована спектральная зависимость ПОФТ в α -HgS и показано, что она определяется соответственно дисперсией оптической активности, фотовольтаического эффекта и поглощения света. Определено фотовольтаический коэффициент k_{ijk} для α -HgS. Этот коэффициент $K_{11}=(1-2) \cdot 10^{-9} \text{A} \cdot \text{см} \cdot (\text{Вт})^{-1}$ при $T=133 \text{ K}$ и $\lambda=500 \text{ нм}$.

Ключевые слова: фотовольтаический эффект, оптически активные кристаллы, пространственно осциллирующий фотовольтаический ток.

Введение

В последние годы стало ясно, что в термодинамических неравновесных условиях возможны токи иной природы, обусловленные отсутствием среды центра симметрии. Важнейшим эффектом из этого класса является аномальный фотовольтаический эффект (АФ эффект).

АФ эффект заключается в том, что при равномерном освещении короткозамкнутого сегнетоэлектрика через него протекает стационарный ток, который в [1,2] был назван фотовольтаическим. Было показано, что именно фотовольтаический ток приводит к аномальному фотовольтаическому эффекту в сегнетоэлектрике.

Аномальный фотовольтаический эффект, обнаруженный для сегнетоэлектриков впервые в [1,2] является частным случаем более общего АФ эффекта, описываемого для кристаллов без центра симметрии тензором третьего ранга α_{ijk} [3,7].

$$J_i = \alpha_{ijk} E_j E_k^*, \quad (1)$$

Компоненты тензора α_{ijk} отличны от нуля для 20 ацентричных точечных групп симметрии.

Согласно (1), при равномерном освещении линейно поляризованным светом однородного кристаллов без центра симметрии (сегнето или пьезоэлектрического кристалла) в нем возникает фотовольтаический ток J_i . Знак и абсолютная величина фотовольтаического тока J зависят от ориентации вектора поляризации света с компонентами E_j электрического поля.

Если электроды кристалла разомкнуть, то фотовольтаический ток J_i генерирует фотонапряжения $U_i = J_i l / (\sigma_T + \sigma_\phi)$, где σ_T и σ_ϕ , соответственно, – темновая и фотопробности, l – расстояние между электродами. Генерируемое фотонапряжение в кристаллах без центра симметрии имеет порядок 10^3 - 10^5 В.

В соответствии с (1) и симметрией точечной группы кристалла, можно написать выражения для фотовольтаического тока J_i . Сравнение экспериментальной угловой зависимости $J_i(\beta)$ с (1) позволяет определить фотовольтаический тензор α_{ijk} или фотовольтаический коэффициент $K_{ijk} = \alpha_{ijk} / \alpha^*$ (α^* – коэффициент поглощения света) [6].

Как показал Белиничер [3], в зависимости от формы оптической индикатрисы и направления распространения плоско поляризованного света в кристалле, могут существовать направления, для которых фотовольтаический ток (1) является пространственно осциллирующим. В этом случае:

$$J_i(x) = \alpha_{ioe} E_e E_o^* \exp[i(n_e - n_o) \vec{q} \vec{x}], \quad (2)$$

где n_e, n_o – показатели преломления обыкновенного и необыкновенного лучей, E_e и E_o^* – проекции вектора поляризации света на оптические оси кристалла, \vec{q} – волновой вектор, α_{ioe} – фотовольтаический тензор отличен от нуля в кристаллах без центра симметрии. Из (2) следует, что фотовольтаический ток осциллирует, когда координата \vec{x} меняется вдоль вектора \vec{q} с периодом $l_o = (q|n_e - n_o|)^{-1}$. Как указывалось в [3] и как видно из (2), пространственно осциллирующий фотовольтаический ток (ПОФТ) может экспериментально наблюдаться в условиях сильного поглощения света.

$$(\alpha^*)^{-1} \leq l_o, \quad l_o = \lambda (n_e - n_o)^{-1}, \quad (3)$$

где α^* – коэффициент поглощения, λ – длина волны.

1. К методике измерения аф эффекта в поляризованном свете

Все исследуемые кристаллы без центра симметрии представляли собой диэлектрики с широкой запрещенной зоной ($E_g=2-7$ эВ) и низкой проводимостью ($\sigma=10^{-8}-10^{-15}$ Ом $^{-1}$ см $^{-1}$). Поэтому требования, которые предъявлялись к методике эксперимента, в первую очередь обуславливались малыми величинами измеряемых токов ($10^{-9}-10^{-15}$ А).

В работе использовался двухэлектродной метод непосредственного отклонения. Ток измерялся по падению напряжения на образцовом сопротивлении, включенном последовательно с кристаллом. Образцовым сопротивлением служили входные сопротивления электрометрического усилителя ВК2-16 ($10^8, 10^{10}, 10^{12}$ Ом).

Блок-схема экспериментальной установки представлена на рис.1. Оптическая часть установки включала в себя: источник интенсивного света (1) ксеноновая или ртутная лампа высокого давления (ДКСШ-200, ДРШ-1000), кварцевые линзы (2), зеркальный монохроматор ЗМР-3 с кварцевой призмой (3) вращающийся поляризатор (4). В ряде случаев, кристаллы освещались непосредственно монохроматическим светом лазера гелий – неоновый (ЛГ-36, ЛГ36А, ЛГ56) с $\lambda=6326 \text{ \AA}$, и гелий- кадмиевого (ЛГ-31) с $\lambda=4400 \text{ \AA}$.

Исследуемый кристалл (6) крепился к слюдяной подложке (7) клеем БФ или серебряной пастой. Слюдяная подложка приклеивалось непосредственно к микро– нагревателю (9). Микро–нагреватель закрепленным кристаллом устанавливался в металлический оптический криостат (5) (изготовленный в СКБ института кристаллографии РАН).

Вакуум в системе создавался форвакуумным и диффузионными насосами (16) и достигал $2 \cdot 10^{-5}$ мм. рт. ст.

Давление в системе измерялось вакуумметром ВИТ-1 (15). Для электрометрических выводов использовались фторопластовые уплотнения. Вакуум, создаваемый в системе диффузионным насосом с азотной ловушкой предотвращал электрический разряд от внешнего источника напряжения (12), а также уменьшал расход жидкого азота при низко температурных измерениях.

Методические особенности температурных измерений заключается в том, что кристаллы очень чувствительны к малым измерениям температуры и, следовательно, малые колебание температуры могут наводить значительные токи в измерительной це-

пи (особенно в области фазовых переходов). Кроме того, в области фазовых переходов, значительно возрастает диэлектрическая проницаемость ϵ , что приводит к большому времени релаксации и, в совокупности с инерционной системой установления температуры, процесс одного измерения может затянуться на несколько часов. Для предотвращения выше изложенного, был использован высокочувствительной прецизионный терморегулятор ПИТ-3 (изготовленный в СКБ института кристаллографии РАН). Чувствительность используемой схемы позволяла поддерживать заданную температуру с точностью $0,025^\circ\text{C}$. Микронагреватель соединялся с кристаллодержателем титановой втулкой, имеющей значительное тепловое сопротивление.

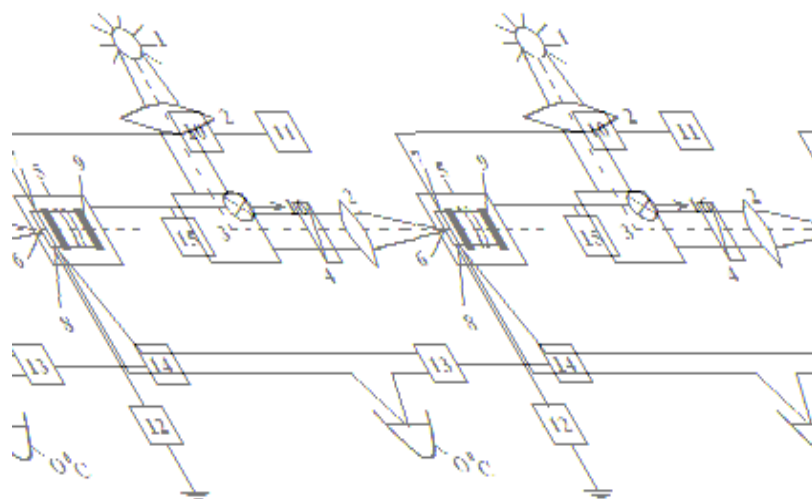


Рис. 1. Блок-схема установки для исследования АФ эффекта.

- 1 – источник света, 2 – фокусирующие линзы, 3 – монохроматор, 4 – поляризатор,
 5 – кристат, 6 – образец, 7 – кварцевая подложка, 8 – термопара, 9 – микронагреватель,
 10 – электрометр, 11 – самописец, 12 – стабилизатор постоянного напряжения,
 13 – терморегулятор изодромный прецизионный, 14 – нуль индикатор, 15 – вакуумметр,
 16 – вакуумный насос

Это позволяло при мощности нагревателя 15 Вт изменять температуру в образце от 100 К до 380 К при залитом азоте. Калиброванная термопара медь-константан, один спай которой закреплялся в непосредственной близости от образца, а второй подключался к прибору.

Электрическая часть измерительной схемы включала в себя электрометрический усилитель ВК2-16 с пределами измерения токов от 10^{-7} до $2,10^{-15}$ А и основной погрешностью не более 4%. Источником внешнего напряжения служили измерительный стабилизатор постоянного напряжения с регулируемым выходом. Источник стабилизированного напряжения служил для измерения фотонапряжения методом компенсации и ВАХ кристалла. Полезный сигнал от электрометрического усилителя записывался электронным самопишущим потенциометром КСП-4. Все измерения производились после окончания переходные процессов, связанных с изменением температуры.

Как уже отмечалось, измерения фототоков проводилась по двухэлектродной схеме. Electroдами служили серебряная паста, аквадаг, также напыленное методом термического вакуумного испарения, золото, алюминий, платина и прозрачный контакт, полученный катодным распылением Cd или Sn [8]. Интенсивность света измерялось прибором ИМО-2 (измеритель средней мощности и энергии импульсов оптических квантовых генераторов: диапазон длин волн от 0.33 до 10.6 мкм). Спектральные измерения по пропусканию и поглощению проводились на двухлучевом спектрофотометре «Specord-UV-VIS» производства Карл-Цейс-Иена.

2. Пространственно осциллирующий фотовольтаический ток в оптически активных кристаллах α -HgS

В работе изложен результаты исследования пространственно-осциллирующего фотовольтаического тока в оптически активных кристаллах α -HgS. Обсуждены некоторые экспериментальные и физические основы ПОФТ в оптически активных кристаллах.

Сернистая ртуть HgS существует в двух модификациях: черная модификация – метациннабарит (β -HgS) – кристаллизуется в кубической системе (точечная группа $\bar{4}3m$), красная модификация – циннабарит или киноварь (α -HgS) – кристаллизуется в тригональной системе (точечная группа 32).

В работе исследовались красные кристаллы киновари, обладающие особенно большим удельным вращением плоскости поляризации вдоль оптической оси для пропускаемых ими красных лучей $\pm \rho = 235^\circ/\text{мм}$. Исследуемые кристаллы α -HgS, выращены гидротермальным методом в лаборатории гидротермального синтеза Института кристаллографии РАН. Исходными веществами для изготовления циннабарита были чистая ртуть и сера. Электрические, электрооптические свойства кристаллов α -HgS и фотоэлектрические свойства кристаллов исследовались в [4,5].

Рис. 2. показывает ориентационную зависимость фотовольтаического тока $J_x(\beta)$ в α -HgS. В соответствии с (1) и симметрией точечной группы 32, выражение для $J_x(\beta)$ при освещении в направлении оси y имеет вид:

$$J_x = \alpha_{11} I \cos^2 \beta, \quad (4)$$

где β – угол между плоскостью поляризации света и осью x . Фотовольтаический ток измерялся в направлении [100]. Свет распространялся в направлении [010]. Сравнение экспериментальной угловой зависимости $J_x(\beta)$ с (4) дает $K_{11} = (1-2) \cdot 10^{-9} \text{ А} \cdot \text{см} \cdot (\text{Вт})^{-1}$ ($T = 133 \text{ К}$, $\lambda = 500 \text{ нм}$). Влияние оптической активности при распространения света в направлении [010] смещает угловое распределение $J_x(\beta)$ (рис. 2).

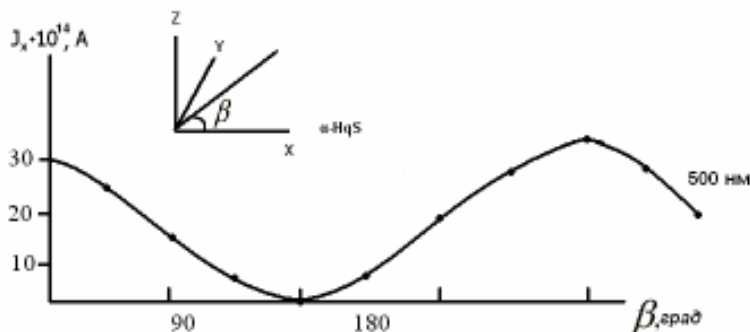


Рис.2. Ориентационная зависимость фотовольтаического тока $J_x(\beta)$ в α -HgS ($T=133^\circ\text{K}$).

Направление распространения света указано в верхней части рисунка

Влияние оптической активности в z направлении было обнаружено, при исследовании угловой зависимости $J_x(\beta)$, в различных спектральных областях (рис.3).

На рис. 3 показано, что оптическая активность кристалла α -HgS сильно влияет на угловое распределение фотовольтаического тока, измеренного в линейно поляризованном свете. В соответствии с (1), угловая зависимость $J_x(\beta)$ при освещении в z направлении (ось z совпадает с осью симметрии третьего порядка) имеет вид.

$$J_x \alpha_{11} I (2 \sin^2 \beta - 1), \quad (5)$$

где β – угол между плоскостью поляризации света и осью y . Фотовольтаический ток измерялся в направлении $[100]$. Свет распространялся в направлении $[001]$.

Рис. 3 указывает на хорошее соответствие между экспериментальной зависимостью $J_x(\beta)$ и (5) в области сильного поглощения света ($\lambda = 400$ нм). Переход из коротковолновой области в длинноволновую, соответствующий уменьшению α^* , изменяет характер угловой зависимости $J_x(\beta)$ и ее амплитуду. На рис.3 представлена спектрально-угловая диаграмма фотовольтаического тока J_x . Очевидно, что ее форма определяется оптической активностью в z -направлении, ее спектральной дисперсией, а также спектральным распределением фотовольтаического эффекта в α -HgS. Оптическая зависимость в z – направлении приводит, таким образом, к образованию структуры пространственного осциллирующего фотовольтаического тока J_x .

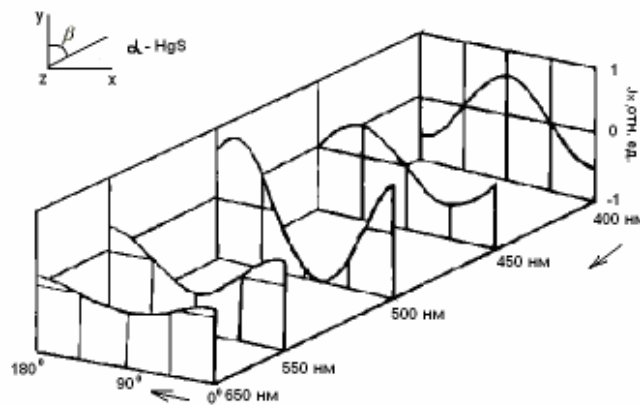


Рис. 3. Спектрально-угловая диаграмма фотовольтаического тока в α -HgS ($T=133^0\text{K}$). Направление распространения света указано в верхней части рисунка

Фотовольтаический ток J_x осциллирует в z направлении с периодом $\ell_o = \pi / \chi$ где χ – коэффициент оптической активности. Угловая зависимость $J_x(\beta)$ совпадает с (5) только при условии сильного поглощения света $(\alpha^*)^{-1} \ll \ell_o$, где α^* – коэффициент поглощения света.

Автор благодарит В.А. Кузнецова за предоставление кристаллов и В.М. Фридкина за обсуждение.

Литература

1. Glass A.M, Voh der Linbe D., Nerren T.J. High- voltage Bulk Photovoltaic effect and the Photorefractive process in LiNbO_3 . // J.Appl. Phys. Let, 1974. -N4. -V. 25. - P.233-236.
2. Фридкин В.М. Фотосегнетоэлектрики. - М.: Наука. 1979. - С.186-216.
3. Белиничер В.И. Исследования фотогальванических эффектов в кристаллах. Дис. ... д-ра. физ-мат. наук. - Новосибирск. 1982. – С 350.
4. Ефремова Е.П., Котельников В.А. Кристаллизация киновари в гидросульфидных растворах // Кристаллография. 1976. - Т.21. - В.3. - С.583-586.
5. Донецких В.И., Соболев В.В. Спектры отражения тригонального HgS // Оптика и спектроскопия. 1977. - Т.42. – В.2. - С.401-403.
- 6.Стурман Б.И., Фридкин В.М. Фотогальванические эффекты в средах без центра инверсии. М.: Наука. 1992. - 208 с.
7. Фридкин В.М. Объемный фотовольтаический эффект в кристаллах без центра симметрии.// Кристаллография. 2001. - Т.46. - № 4. - С.722-726.



8. Мирзамахмудов Т., Каримов М.А., Айибжонов М., Каримов Б.Х., Алиев М.И. Способ изготовления прозрачных токопроводящих плёнок на основе окислов металлов // Авторское свидетельства № 749304. 1980. 4с.

SPATIALLY OSCILLATING PHOTOVOLTAIC CURRENT IN OPICAL ACTIVE CRYSTALS

B.H. Karimov

Fergana State University, Fergana, Uzbekistan,
e-mail: karimov1948@rambler.ru

In this work is considered the photovoltaic effect in the optical active crystals α -HgS. In optical active crystals – HgS for the first time is found out the spatially oscillating photovoltaic current of a new nature, namely, caused by rotation of a plane of polarization of light extending along an optical axis. It was investigated the spectral dependence of the spatially oscillating photovoltaic current in α -HgS and was shown it is determined accordingly by a dispersion of the optical activity, the photovoltaic effect and absorption of light. It was determined the photovoltaic factor k_{ijk} for α -HgS. This factor $K_{11}=(1-2) \cdot 10^{-9} \text{ A} \cdot \text{sm} \cdot (\text{W})^{-1} \text{ t } T=133\text{K}$ and $\lambda = 500 \text{ nm}$.

Key words: photovoltaic effect, optical active crystals, spatially oscillating photovoltaic current.

К ВОПРОСУ О ГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ СОПРОТИВЛЕНИИ СФЕРИЧЕСКОЙ ЧАСТИЦЫ С ОДНОРОДНЫМ ВНУТРЕННИМ ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИЕМ

А.А. Стукалов

Белгородский государственный университет
308015, Белгород, ул. Победы, 85
e-mail: stykalov@bsu.edu.ru

В приближении Стокса проведено теоретическое описание стационарного движения нагретой аэрозольной частицы сферической формы в неизотермической газообразной среде, внутри которой действуют равномерно распределенные источники (стоки) тепла постоянной мощности. При рассмотрении движения предполагалось, что средняя температура поверхности частицы может существенно отличаться от температуры окружающей ее газообразной среды. В процессе решения гидродинамических уравнений получено аналитическое выражение для гидродинамической силы, действующей на равномерно нагретую аэрозольную частицу, с учетом зависимости вязкости и плотности от температуры.

Ключевые слова: гидродинамическое сопротивление, движение нагретых частиц в газе.

1. Постановка задачи. Движение нагретых частиц в вязких газообразных средах рассматривалось в ряде работ [1-5]. Под нагретой частицей понимают частицу, средняя температура поверхности которой по величине значительно превышает температуру окружающей среды. Нагрев поверхности частицы может быть обусловлен, например, протеканием объемной химической реакции, процессом радиоактивного распада вещества частицы и т.д.

Нагретая поверхность оказывает значительное влияние на теплофизические характеристики окружающей среды и тем самым может существенно повлиять на распределение полей скорости и давления в ее окрестности.

В настоящее время достаточно подробно рассмотрено движение твердых сферических частиц как при малых относительных перепадах в их окрестности, так и при значительных [1-5].

Рассмотрим движение твердой аэрозольной частицы в вязкой неизотермической газообразной среде, внутри которой действуют равномерно распределенные источники (стоки) тепла постоянной мощности при малых числах Рейнольдса под действием некоторой силы, например, электромагнитной, термофоретической, диффузиофоретической и т.д. Если перейти в систему координат, связанной с частицей, то задача по существу сводится к задаче обтекания нагретой твердой частицы сферической формы плоскопараллельным потоком газа скоростью U_∞ ($U_\infty \parallel OZ$).

При рассмотрении обтекания нагретой сферы вводятся следующие допущения: 1) все процессы, происходящие в системе частица – газ, рассматриваются в квазистационарном приближении, что возможно в силу малости времени тепловой релаксации частицы; 2) определяющими параметрами задачи являются коэффициенты c_{pe} , $\rho_{e\infty}$, $\mu_{e\infty}$, $\lambda_{e\infty}$ и сохраняющиеся в процессе движения частицы величины – R , U_∞ . Из этих параметров можно составить две безразмерные комбинации: число Рейнольдса $Re_\infty = (\rho_{e\infty} U_\infty R) / \mu_{e\infty} \ll 1$ и тепловое число Пекле – $Pe_\infty = (c_{pe} U_\infty R \rho_{e\infty}) / \lambda_{e\infty} \ll 1$, где R – радиус частицы [6-7], $U_\infty = |U_\infty|$ – характерная скорость (величина скорости

набегающего потока); 3) движение частицы рассматривается при значительных (больших) относительных перепадах температуры. Под относительным перепадом температуры понимают разность температур между поверхностью частицы и областью вдали от нее. Относительный перепад температуры считается малым, если выполняется неравенство $(T_S - T_{\infty})/T_{\infty} \ll 1$, где T_S – средняя температура поверхности частицы. При выполнении этого неравенства коэффициенты молекулярного переноса (вязкости и теплопроводности) и плотность можно считать постоянными величинами. Если $(T_S - T_{\infty})/T_{\infty} \sim O(1)$, то относительный перепад температуры считается значительным. В этом случае уже нельзя считать эти величины постоянными. В работе при описании свойств газообразной среды рассматривается степенной вид зависимости динамической вязкости и теплопроводности от температуры: $\mu_e = \mu_{\infty} t_e^{\beta}$, $\lambda_e = \lambda_{\infty} t_e^{\alpha}$, $\lambda_i = \lambda_{i\infty} t_i^{\gamma}$, где $\mu_{\infty} = \mu_e(T_{\infty})$, $\lambda_{\infty} = \lambda_e(T_{\infty})$, $\lambda_{i\infty} = \lambda_i(T_{\infty})$, $t_k = T_k/T_{\infty}$, $k = e, i$ [8]; 4) коэффициент теплопроводности частицы по величине много больше коэффициента теплопроводности газа. Это ограничение приводит к тому, что в коэффициенте вязкости можно пренебречь зависимостью по углу θ в системе «частица – газ» и считать, что вязкость связана только с температурой $t_{e0}(r)$, т.е. $\mu_e(t_e(r, \theta)) \approx \mu_e(t_{e0}(r))$. Считая, при этом что $t_e(r, \theta) = t_{e0}(r) + \delta t_e(r, \theta)$, где $\delta t_e(r, \theta) \ll t_{e0}(r)$. Явный вид функций $t_{e0}(r)$ и $\delta t_e(r, \theta)$ определяются из решения конвективного уравнения теплопроводности с соответствующими граничными условиями; 5) частица образована однородным и изотропным по своим свойствам веществом; 6) при описании нагретой частицы во внешних заданных полях используется гидродинамический подход [6-7].

В рамках сформулированных выше допущений уравнения для скорости и давления запишутся в виде [6-7]:

$$\frac{\partial P_e}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_e \left[\frac{\partial U_j^e}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k^e}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{jk} \frac{\partial U_m^e}{\partial x_m} \right] \right), \quad (m, k, j = 1, 2, 3) \quad (1.1)$$

$$\operatorname{div}(\rho_e \mathbf{U}_e) = 0, \quad (1.2)$$

где (x_1, x_2, x_3) декартовы координаты

Эта система гидродинамических уравнений решается со следующими граничными условиями в сферической системе координат (r, θ, φ)

$$r = R, \quad U_r^e = 0, \quad U_{\theta}^e = 0. \quad (1.3)$$

$$r \rightarrow \infty, \quad \mathbf{U}_e \rightarrow U_{\infty} \cos \theta \mathbf{e}_r - U_{\infty} \sin \theta \mathbf{e}_{\theta}, \quad P_e \rightarrow P_{\infty}. \quad (1.4)$$

Помимо линеаризованного по скорости уравнения Навье-Стокса (1.1) и непрерывности (1.2) с граничными условиями (1.3) – (1.4), необходимо также решить уравнение теплопроводности, описывающее распределение температуры вне и внутри частицы с соответствующими граничными условиями на ее поверхности. Это связано с тем, что частица нагрета. Разность температур между частицей и газообразной средой может стационарно поддерживаться, например, за счет выделения тепла при химических реакциях на поверхности частицы, за счет радиоактивного распада вещества частицы, внешним излучением и т.п. В частности, если на частицу падает поток монохроматического излучения (длина волны λ_0) интенсивностью I_0 , то поглощаемая ею энергия равна $\pi R^2 I_0 K_{\phi}$, где R – радиус частицы, K_{ϕ} – фактор поглощения [9], и распределяется по объему сферы равномерно с плотностью q_i .

Это допущение справедливо в том случае, если коэффициент теплопроводности частицы по величине много больше коэффициента теплопроводности внешней среды и $\lambda_o \gg R$.

Следовательно, к уравнениям (1.1) – (1.2) необходимо добавить уравнение теплопереноса вне и внутри частицы

$$\operatorname{div}(\lambda_e \nabla T_e) = 0, \tag{1.5}$$

$$\operatorname{div}(\lambda_i \nabla T_i) = -q_i \tag{1.6}$$

с граничными условиями (1.7)

$$r = R, \quad T_e = T_i, \quad \lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial r} = \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} + \sigma_0 \sigma_1 (T_i^4 - T_{e\infty}^4), \tag{1.7}$$

отражающие равенство температур и непрерывности радиальных потоков тепла с учетом излучения на поверхности частицы; σ_0 – постоянная Стефана – Больцмана, σ – интегральная степень черноты тела [10]; $q_i = \text{const}$ – постоянная плотность тепловых источников, действующая внутри частицы [9].

Сила, действующая на частицу со стороны потока, определяется по формуле [6-7]

$$F_z = \int_{(S)} (-P_e \cos \theta + \sigma_{rr} \cos \theta - \sigma_{r\theta} \sin \theta) r^2 \sin \theta d\theta d\varphi. \tag{1.8}$$

Здесь $\sigma_{rr}, \sigma_{r\theta}, U_r^e$ и U_θ^e – компоненты тензора полных напряжений, радиальная и касательная компоненты массовой скорости U_e в сферической системе координат

$$\sigma_{rr} = \mu_e \left(2 \frac{\partial U_r^e}{\partial y} - \frac{2}{3} \operatorname{div} U_e \right), \quad \sigma_{r\theta} = \mu_e \left(\frac{\partial U_\theta^e}{\partial y} + \frac{1}{y} \frac{\partial U_r^e}{\partial \theta} - \frac{U_\theta^e}{y} \right), \quad y = r / R -$$

обезразмеренная радиальная координата.

2. Поле скорости и распределение температуры. Определение силы сопротивления. Чтобы найти силу, действующую со стороны газа на твердую нагретую сферу, нужно знать распределения температуры, массовой скорости и давления в ее окрестности. Интегрируя уравнения (1.5) – (1.6) с соответствующими граничными условиями, получаем

$$t_e(y, \theta) = t_{e0}(y) = \left(1 + \frac{\Gamma_0}{y} \right)^{\frac{1}{1+\alpha}}, \tag{2.1}$$

$$t_i(y, \theta) = t_{i0}(y) = \left(B_0 + \frac{D_0}{y} + \frac{1}{y} \int \psi_0 dy - \int \frac{\psi_0}{y} dy \right)^{\frac{1}{1+\omega}}, \tag{2.2}$$

где постоянные интегрирования определяются из соответствующих граничных условий на поверхности неравномерно нагретой частицы; $\Gamma_0 = t_S^{1+\alpha} - 1$;

$$\psi_0 = -\frac{R^2}{2\lambda_{i\infty}} y^2 \frac{1+\omega}{T_{e\infty}} \int_{-1}^1 q_i dx, \quad D_0 = \frac{1+\omega}{4\pi R \lambda_{i\infty} T_{e\infty}} \int_V q_i dV, \quad t_S = T_S / T_{e\infty}, \quad T_S - \text{средняя}$$

температура поверхности неравномерно нагретой частицы, определяемая из решения трансцендентного уравнения (2.3.3)

$$\frac{t_S^{1+\alpha} - 1}{1 + \alpha} = \frac{R^2}{3 \lambda_{e\infty} T_{e\infty}} - \sigma_0 \sigma_1 \frac{R T_{e\infty}^3}{\lambda_{e\infty}} (t_S^4 - 1). \quad (2.3)$$

Перейдем теперь к нахождению полей скорости и давления. В сферической системе координат линеаризованное по скорости уравнение Навье-Стокса, описывающее распределение скорости и давления вне частицы (1.1) имеет вид [7]:

$$\frac{\partial P_e}{\partial y} = \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial y} + \frac{2}{y} \sigma_{rr} + \frac{1}{y} \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{ctg \theta}{y} \sigma_{r\theta} - \frac{\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\varphi\varphi}}{y}, \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{y} \frac{\partial P_e}{\partial \theta} = \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial y} + \frac{3}{y} \sigma_{r\theta} + \frac{1}{y} \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{ctg \theta}{y} (\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\varphi\varphi}). \quad (2.5)$$

Здесь $\sigma_{rr}, \sigma_{r\theta}, \sigma_{\theta\theta}$ и $\sigma_{\varphi\varphi}$ – компоненты тензора напряжений в сферической системе координат и они равны

$$\sigma_{rr} = \mu_e \left(2 \frac{\partial U_r^e}{\partial y} - \frac{2}{3} \operatorname{div} U_e \right), \quad \sigma_{\theta\theta} = \mu_e \left(\frac{2}{y} \frac{\partial U_\theta^e}{\partial \theta} + \frac{2}{y} U_r^e - \frac{2}{3} \operatorname{div} U_e \right),$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \mu_e \left(\frac{2}{y} U_r^e + \frac{2}{y} ctg \theta U_\theta^e - \frac{2}{3} \operatorname{div} U_e \right), \quad \sigma_{r\theta} = \mu_e \left(\frac{\partial U_\theta^e}{\partial y} + \frac{1}{y} \frac{\partial U_r^e}{\partial \theta} - \frac{U_\theta^e}{y} \right).$$

Решая систему уравнений (2.4) – (2.5) методом разделения переменных и, учитывая допущение 4), в конечном итоге получаем уравнений аналогичное [5]. В [5] проведен подробный анализ решения линеаризованного по скорости уравнения Навье-Стокса и выражения для полей скорости и давления.

Зная выражения для полей скорости и давления, подставляя в (1.8), после интегрирования получаем следующее выражение для силы сопротивления сферы, внутри которой действуют источники тепла постоянной мощности:

$$\mathbf{F}_z = 6\pi R \mu_{e\infty} U_\infty f_\mu \mathbf{n}_z, \quad f_\mu = \frac{2N_2}{3N_1}, \quad (2.6)$$

где $N_1|_{y=1} = G_1 G_2^I - G_2 G_1^I$, $N_2|_{y=1} = G_1 G_3^I - G_3 G_1^I$, G_k^I – первая производная от соответствующих функций. Явный вид которых приведен в [5].

Чтобы оценить какой вклад внутренние источники тепла (нагрев поверхности) оказывает на силу сопротивления, можно рассмотреть наиболее простой случай, когда частица поглощает излучение как черное тело [8]. В этом случае поглощение происходит в тонком слое толщиной $\delta R \ll R$, прилегающем к нагреваемой части поверхности частицы. При этом плотность тепловых источников внутри слоя толщиной δR определяется с помощью формулы

$$q_i(r, \theta) = \begin{cases} -\frac{I_0}{\delta R} \cos \theta, & \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi, \quad R - \delta R \leq r \leq R \\ 0, & 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \end{cases},$$

где I_0 – интенсивность падающего излучения.

На рис. 1 приведены значения функции f_μ от интенсивности падающего излучения I_0 . Численные оценки проводились для частиц меди радиусом 100 мкм, взвешенных в воздухе при нормальных условиях.

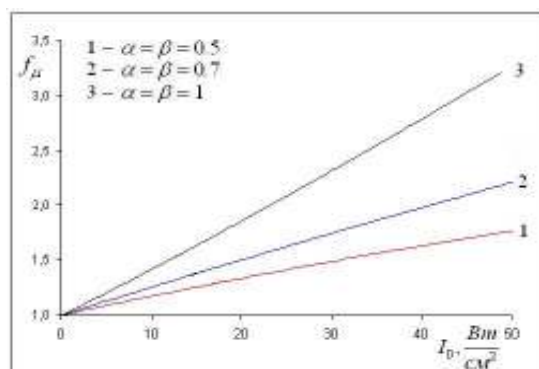


Рис.1. График зависимости функции f_{μ} от интенсивности падающего излучения I_0

Литература

1. Kassoy D.R., Adamson T.C., Messiter A.F. Compressible Low Reynolds Number around a Sphere //Phys. Fluids. 1966. Vol. 9. № 4. P. 671-681.
2. Щукин Е.Р., Малай Н.В. Фотофоретическое и термодиффузиофоретическое движение нагретых нелетучих аэрозольных частиц //ИФЖ. 1988. Т. 54, № 4. С. 630-635.
3. Щукин Е.Р., Малай Н.В., Яламов Ю.И. Движение нагреваемых внутренними источниками тепла капель в бинарных газовых смесях //ТВТ. 1988. Т. 25, № 5. С. 1020-1024.
4. Берковский Б.М., Краков М.С., Никифоров И.В., Полевиков В.К. Гидродинамическое сопротивление эллипсоидальной капли при малых числах Рейнольдса //МЖГ. 1987. № 3. С. 4-8.
5. Малай Н.В., Щукин Е.Р., Стукалов А.А., Рязанов К.С. Гравитационное движение равномерно нагретой твердой частицы в газообразной среде //СО РАН ПМТФ. 2008. № 1. С. 74 – 80.
6. Хаппель Дж., Бреннер Г. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. М.: Мир. 1976. 630 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.6. Гидромеханика. М.: Наука. 1986. 736 с.
8. Брейтшгайдер Ст. Свойства газов и жидкостей. Инженерные методы расчета. М.: Химия. 1966. 535 с.
9. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир. 1986. 660 с.
10. Шейндлин А.Е. Излучательные свойства твердых материалов. М.: Энергия. 1974. 471 с.

TO THE QUESTION ON HYDRODYNAMICAL RESISTANCE OF THE SPHERICAL PARTICLE WITH THE HOMOGENEOUS INTERNAL THERMAL EMISSION

A.A. Stukalov

Belgorod State University
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia
e-mail: stykalov@bsu.edu.ru

The theoretical description of stationary movement of the heated up aerosol particle of the spherical form in not isothermal gaseous environment with intervals distributed heat sources of constant capacity inside is studied in the Stokes approximation.

While consideration of movement it was supposed, that the average temperature of a surface of a particle can differ from temperature of the gaseous environment surrounding it essentially. During the decision of the hydrodynamic equations analytical expression for the hydrodynamic force working on in regular intervals heated up aerosol particle is received, in view of dependence of viscosity and density from temperature.

Key words: hydrodynamic resistance, movement of the heated up particles in gas.

К ВОПРОСУ О ВЛИЯНИИ ДВИЖЕНИЯ СРЕДЫ НА ФОТОФОРЕЗ ТВЕРДОЙ АЭРОЗОЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ СФЕРОИДАЛЬНОЙ ФОРМЫ

Н.В. Малай, Н.Н. Миронова

Белгородский государственный университет, 308007, г. Белгород, ул. Студенческая 14,
e-mail: *malay@bsu.edu.ru*, *mironovanadya@mail.ru*

Рассмотрено влияние движения среды на фотофорез крупной аэрозольной частицы сфероидальной формы при малых относительных перепадах температуры в ее окрестности.

Ключевые слова: фотофорез, аэрозольная частица, сфероид, движение среды.

Введение

Известно, что твердая частица, взвешенная в термодинамически неравновесной газообразной среде, начинает двигаться. Причина такого движения может быть связана, в частности, с появлением градиента температуры вдоль поверхности частицы. В данной работе рассматривается случай, когда градиент температуры обусловлен неравномерным нагревом поверхности частицы за счет поглощения электромагнитного излучения. Такое движение в литературе называется фотофоретическим [1-3]. Фотофорез может играть существенную роль в атмосферных процессах; очистке промышленных газов от аэрозольных частиц; создании установок, предназначенных для селективного разделения частиц по размерам и т.д.

Механизм фотофореза можно кратко описать следующим образом. При взаимодействии электромагнитного излучения с частицей, внутри нее происходит выделение тепловой энергии, с некоторой объемной плотностью q_p , которые неоднородно нагревают частицу. Молекулы газа, окружающие частицу, после соударения с ее поверхностью отражаются от нагретой стороны частицы с большей скоростью, чем от холодной. В результате частица приобретает нескомпенсированный импульс, направленный от горячей стороны частицы к холодной. В зависимости от размеров и оптических свойств материала частицы более горячей сможет оказаться как освещенная, так и теневая сторона частицы. Поэтому имеет место как положительный (движение частицы в направлении излучения), так и отрицательный фотофорез. Кроме того, если поток излучения неоднороден по сечению, то может возникнуть поперечное относительно направления распространения электромагнитного излучения движение частицы в газе [4].

Многие частицы, встречающиеся в промышленных установках и природе, имеют форму поверхности отличную от сферической, например, сфероидальную. В опубликованных до настоящего времени работах по теории фотофоретического движения сфероидальных частиц (см. [5-6]) не учитывалось влияние конвективных членов теплопроводности (движения среды) на фотофорез. Озеен [7], Праудмен и Пирсон [8] для гидродинамической задачи, а Акривос и Тейлор [9] – для тепловой задачи показали, что вдали от частицы инерционные и конвективные члены становятся одного порядка с членами молекулярного переноса и поэтому обычный метод разложения по малому параметру дает известную погрешность, поскольку уже во втором приближении не позволяет строго удовлетворить граничным условиям на бесконечности и получить точное единое решение, однородно справедливое для всей области течения. В данной работе, используя метод сращиваемых асимптотических разложений, проводится оценка этого влияния.

1. Постановка задачи

Рассмотрим твердую аэрозольную частицу сфероидальной формы, взвешенную в газе с температурой T_∞ , плотностью ρ_g и вязкостью μ_g . Здесь и далее индексы «g» и

« p » будем относить соответственно к газообразной среде и частице; индексом « ∞ » — обозначены параметры газообразной среды на бесконечности, т.е. вдали от частицы и индексом « S » — значения физических величин, взятые при средней температуре поверхности частицы T_S . На частицу падает электромагнитное излучение, которое неоднородно нагревает её поверхность. Газ, взаимодействуя с неоднородно нагретой поверхностью, начинает двигаться вдоль поверхности в направлении возрастания температуры. Это явление называется тепловым скольжением газа. Механизм этого явления по своей физической природе аналогичен термофорезу, см. [10-11]. Тепловое скольжение вызывает появление фотофоретической силы. Под действием фотофоретической силы и силы вязкого сопротивления среды, частица начинает двигаться равномерно. Скорость равномерного движения частицы называют фотофоретической скоростью (U_{ph}).

При теоретическом описании процесса фотофоретического движения частицы будем предполагать, что в силу малости времени тепловой релаксации процесс теплопереноса в системе частица – газообразная среда протекает квазистационарно. Движение частицы происходит при малых числах Пекле и Рейнольдса, и при малых относительных перепадах температуры в ее окрестности, т.е. когда $(T_S - T_\infty)/T_\infty \ll 1$, где T_∞ – температура газа на большом расстоянии от частицы. При выполнении этого условия коэффициенты теплопроводности, динамической и кинематической вязкости можно считать постоянными величинами. Задача решается гидродинамическим методом, т.е. решаются уравнения гидродинамики с соответствующими граничными условиями и считается, что фазовый переход отсутствует, частица однородна по своему составу и крупная. Для классификации аэрозольных частиц по размерам применяют критерий Кнудсена $Kn = \lambda / R$, где λ – средняя длина свободного пробега молекул газообразной смеси, R – линейный размер частицы. Частицы называются крупными, если $Kn \leq 0.01$, умеренно крупными при $0.01 \leq Kn \leq 0.3$ и мелкими при $Kn \gg 1$.

Падающее на частицу электромагнитное излучение поглощается частицей и распределяется по её объёму. В результате внутри частицы возникают источники тепловой энергии с плотностью q_p . Удобно ввести систему отсчета, связанную с центром масс движущейся частицы, а ось OZ ориентирована по направлению распространения однородного потока излучения (задача в этом случае сводится к анализу обтекания частицы бесконечным плоскопараллельным потоком со скоростью U_∞ . Определенная в такой системе координат скорость газа на бесконечности, равна с обратным знаком величине скорости фотофореза, $U_{ph} = -U_\infty$). Описание обтекания будем проводить в сфероидальной системе координат $(\varepsilon, \eta, \varphi)$. Криволинейные координаты $\varepsilon, \eta, \varphi$ связаны с декартовыми координатами следующими соотношениями [12]:

$$x = c \operatorname{ch} \varepsilon \sin \eta \cos \varphi, \quad y = c \operatorname{ch} \varepsilon \sin \eta \sin \varphi, \quad z = c \operatorname{sh} \varepsilon \cos \eta, \quad (1.1)$$

$$x = c \operatorname{sh} \varepsilon \sin \eta \cos \varphi, \quad y = c \operatorname{sh} \varepsilon \sin \eta \sin \varphi, \quad z = c \operatorname{ch} \varepsilon \cos \eta, \quad (1.2)$$

где $c = \sqrt{a^2 - b^2}$ в случае сплюснутого сфероид ($a > b$, формула (1.1)) и $c = \sqrt{b^2 - a^2}$ – в случае вытянутого сфероид ($a < b$, формула (1.2)); a и b полуоси сфероид. При этом положение декартовой системы координат фиксировано относительно частицы таким образом, чтобы начало координат располагалось в центре сфероид, а ось OZ совпадала с осью симметрии сфероид.

В рамках сформулированных допущений распределение скорости U_g , давления P_g и температур T_g и T_p описываются следующей системой уравнений [13]:

$$\begin{aligned} \nabla P_g &= \mu_g \Delta U_g, \quad \operatorname{div} U_g = 0, \\ \rho_g c_{pg} (U_g \cdot \nabla) T_g &= \lambda_g \Delta T_g, \quad \Delta T_p = -q_p / \lambda_p \end{aligned} \quad (1.3)$$

Система уравнений (1.3) решалась со следующими граничными условиями в системе координат сплюснутого сфероида:

$$\varepsilon = \varepsilon_0, \quad U_\varepsilon = 0, \quad U_\eta = K_{TS} \frac{v_g}{T_g} (\nabla T_g \cdot e_\eta),$$

$$T_g = T_p, \quad \lambda_g (\nabla T_g \cdot e_\varepsilon) = \lambda_p (\nabla T_p \cdot e_\varepsilon); \quad (1.4)$$

$$\varepsilon \rightarrow \infty, \quad U_\varepsilon = U_\infty \cos \eta, \quad U_\eta = -U_\infty \sin \eta, \quad T_g \rightarrow T_\infty, \quad P_g \rightarrow P_\infty; \quad (1.5)$$

$$\varepsilon \rightarrow 0, \quad T_p \neq \infty. \quad (1.6)$$

Здесь U_ε, U_η – компоненты массовой скорости газа U_g , e_ε, e_η – единичные векторы в сфероидальной системе координат; c_{pg} – теплоемкость при постоянном давлении; v_g, μ_g – коэффициенты кинематической и динамической вязкости газа; λ_g, λ_p – коэффициенты теплопроводности газообразной среды и частицы соответственно; $U_\infty = |U_\infty|$; K_{TS} – коэффициент теплового скольжения, выражение для которого определяется методами кинетической теории. При коэффициентах аккомодации тангенциального импульса и энергии, равных единице, газокинетический коэффициент (случай сферической частицы) $K_{TS} \approx 1.152$ [10,11].

В граничных условиях (1.4) на поверхности частицы учтено: условие непроницаемости для нормальной и тепловое скольжение для касательной компонент массовой скорости, равенство температур и непрерывность потоков тепла. Поверхности частицы соответствует координатная поверхность $\varepsilon = \varepsilon_0$. На большом расстоянии от частицы справедливы граничные условия (1.5), а конечность физических величин, характеризующих частицу при $\varepsilon \rightarrow 0$, учтено в (1.6).

Обезразмерим уравнение (1.3) и граничные условия (1.4)-(1.6), введя безразмерные координаты, температуру и скорость следующим образом:

$$y_k = \frac{x_k}{a}, \quad t = \frac{T}{T_\infty}, \quad V = \frac{U}{U_\infty}.$$

При $Re = (\rho_g U_\infty a) / \mu_g \ll 1$ набегающий поток оказывает лишь возмущающее влияние и поэтому решение уравнений гидродинамики следует искать в виде:

$$V_g = V_{g0} + Re V_{g1} + \dots, \quad P_g = P_{g0} + Re P_{g1} + \dots \quad (1.7)$$

Решение уравнения, описывающего распределение температуры вне частицы, будем искать методом сращиваемых асимптотических разложений [14, 15]. Внутренние и внешние асимптотические разложения обезразмеренной температуры ищем в виде:

$$t_g(\varepsilon, \eta) = t_{g0}(\varepsilon) + \sum_{n=1}^{\infty} f_n(Re) t_{gn}(\varepsilon, \eta), \quad (1.8)$$

$$t_g^*(\xi, \eta) = t_{g0}^*(\xi) + \sum_{n=1}^{\infty} f_n^*(Re) t_{gn}^*(\xi, \eta) \quad (1.9)$$

где $\xi = Re \lambda$ – «сжатая» радиальная координата [14], $\lambda = sh \varepsilon$. При этом требуется, чтобы:

$$\frac{f_{n+1}}{f_n} \rightarrow 0, \quad \frac{f_{n+1}^*}{f_n^*} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad Re \rightarrow 0$$

Недостающие граничные условия для внутреннего и внешнего разложений вытекают из условия тождественности асимптотических продолжений того и другого в некоторую промежуточную область

$$t_g(\varepsilon \rightarrow \infty, \eta) = t_g^*(\xi \rightarrow 0, \eta) \quad (1.10)$$

Асимптотическое разложение решения внутри частицы, как показывают граничные условия на поверхности сфероида (1.4), следует искать в виде, аналогичном (1.8):

$$t_p(\varepsilon, \eta) = t_{p0}(\varepsilon) + \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\text{Re}) t_{pn}(\varepsilon, \eta), \quad (1.11)$$

Относительно функций $f_n(\text{Re})$ и $f_n^*(\text{Re})$ предполагается лишь, что порядок их малости по Re увеличивается с ростом n .

С учетом сжатой радиальной координаты имеем следующее уравнение для температуры t_g^* :

$$\frac{\text{Pr}}{a} (V_g^* \cdot \nabla^*) t_g^* = \Delta^* t_g^*, \quad t_g^* \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow \infty \quad (1.12)$$

$$V_g^*(\xi, \eta) = n_z + \text{Re} V_g^*(\xi, \eta) + \dots$$

Здесь $\Delta = \Delta^*(\xi, \eta)$ – оператор Лапласа, полученный из Δ заменой λ на ξ ; $V_g^* = V_g^*(\xi, \eta)$; $t_g^* = t_g^*(\xi, \eta)$; $\text{Pr} = \mu_{\infty} c_{pg} / \lambda_g$ – число Прандтля; n_z – единичный вектор в направлении оси OZ .

Вид граничных условий (1.5) указывает на то, что решение в нулевом приближении для компонент массовой скорости следует искать в виде:

$$V_{\varepsilon}(\varepsilon, \eta) = \frac{1}{c \text{ch} \varepsilon H_{\varepsilon}} G(\varepsilon) \cos \eta, \quad V_{\eta}(\varepsilon, \eta) = -\frac{1}{c H_{\varepsilon}} g(\varepsilon) \sin \eta \quad (1.13)$$

где $G(\varepsilon)$, $g(\varepsilon)$ – произвольные функции, зависящие от безразмерной радиальной координаты ε , $H_{\varepsilon} = c \sqrt{\text{ch}^2 \varepsilon - \sin^2 \eta}$ – коэффициент Ламэ.

2. Распределение температуры в окрестности сфероидальной частицы

При нахождении силы и скорости фотофореза ограничимся поправками первого порядка малости. Чтобы их найти, нужно знать поля температур вне и внутри частицы. Для этого необходимо решить уравнения (1.3) с соответствующими граничными условиями.

Построение решения начинается с определения нулевого члена внешнего разложения (1.9). В данном случае, очевидно, задачу удовлетворяет решение:

$$t_{g0}^* = 1 \quad (2.1)$$

Найдем нулевой член внутреннего разложения (1.8). Он удовлетворяет уравнению:

$$\Delta t_{g0} = 0 \quad (2.2)$$

с граничными условиями

$$t_{g0} = t_{p0}, \quad \lambda_g \frac{\partial t_{g0}}{\partial \varepsilon} = \lambda_p \frac{\partial t_{p0}}{\partial \varepsilon} \quad \text{при} \quad \varepsilon = \varepsilon_0. \quad (2.3)$$

Общее решение уравнения (2.3) имеет вид:

$$t_{g0} = \sum_{n=0}^{\infty} (Y_n P_n(\lambda) + L_n Q_n(\lambda)) \cdot P_n(\cos \eta) \quad (2.4)$$

здесь Y_n , L_n – постоянные интегрирования, P_n , Q_n – полиномы Лежандра первого и второго рода соответственно. Постоянные интегрирования Y_n , L_n определяются из условия сращивания, для которого, внешнее решение должно быть разложено в ряд по ξ . Затем значения констант устанавливаются из требования соответствия поведения

членов полученного ряда при $\xi \rightarrow 0$ и членов разложения (1.8) при $\varepsilon \rightarrow \infty$. Для нулевых приближений сращивание тривиально, получаем $Y_0 = 1$, $Y_n = L_n = 0$ при $n = 1, 2, \dots$. Следовательно:

$$t_{g0} = 1 + L_0 \operatorname{arcctg} \lambda \quad (2.5)$$

При дальнейшем решении задачи нам необходимо знать поле температуры внутри частицы. Подставляя (1.11) в четвертое уравнение (1.3) получим следующее общее решение для $t_p(\varepsilon, \eta)$, удовлетворяющее условию конечности решения при $\varepsilon \rightarrow 0$ (отметим, что до первого приближения включительно, как будет показано ниже, $f_0(\operatorname{Re}) = 1$, $f_1(\operatorname{Re}) = \operatorname{Re}$):

$$t_p(\varepsilon, \eta) = t_{p0}(\varepsilon) + \operatorname{Re} t_{p1}(\varepsilon, \eta), \quad (2.6)$$

$$\text{где } t_{p0}(\lambda) = M_0 + N_0 \operatorname{arcctg} \lambda - \int_{\lambda_0}^{\lambda} W_0 \operatorname{arcctg} \lambda d\lambda + \operatorname{arcctg} \lambda \int_{\lambda_0}^{\lambda} W_0 d\lambda, \quad (2.7)$$

$$t_{p1} = \cos \eta \left(M_1 c \lambda + N_1 (1 - \lambda \operatorname{arcctg} \lambda) + \lambda \int_{\lambda_0}^{\lambda} (\lambda \operatorname{arcctg} \lambda - 1) W_1 d\lambda - (\lambda \operatorname{arcctg} \lambda - 1) \int_{\lambda_0}^{\lambda} \lambda W_1 d\lambda \right).$$

Здесь, $\lambda = sh \varepsilon$, $x = \cos \eta$, $\lambda_0 = sh \varepsilon_0$, $N_0 = \frac{1}{4\pi c \lambda_p T_\infty} \int_V q_p dV$, $N_1 = \frac{3}{4\pi c^2 \lambda_p T_\infty} J$,

$J = \int_V q_p z dV$ – дипольный момент плотности тепловых источников, $z = c \lambda x$,

$$W_n = \frac{2n+1}{2\lambda_p T_\infty} \int_{-1}^1 c^2 q_p (\lambda^2 + x^2) P_n(x) dx \quad (n \geq 0). \quad (2.8)$$

В формулах (2.8) интегрирование ведется по всему объему частицы.

Поскольку поле температуры внутри неравномерно нагретой частицы определено, мы можем найти постоянные интегрирования L_0 , M_0 . Константы L_0 , M_0 , входящие в (2.5) и (2.7), находим из граничных условий на поверхности частицы (2.3). В нашем случае они принимают вид:

$$L_0 = \gamma \lambda_0, \quad M_0 = 1 + \left(1 - \frac{\lambda_g}{\lambda_p} \right) \gamma \lambda_0 \operatorname{arcctg} \lambda_0 \quad (2.9)$$

Здесь $\gamma = t_S - 1$ – безразмерный параметр, характеризующий нагрев поверхности сфероиды; $t_S = T_S / T_\infty$, T_S – средняя температура поверхности сфероиды, определяемая формулой:

$$\frac{T_S}{T_\infty} = 1 + \frac{1}{4\pi c \lambda_0 \lambda_g T_\infty} \int_V q_p dV \quad (2.10)$$

В (2.10) интегрирование ведется по всему объему частицы.

Для членов первого приближения внешнего разложения из (1.9) и (2.1) имеем:

$$t_g^*(\xi, \eta) = 1 + f_1^*(\operatorname{Re}) t_{g1}^*(\xi, \eta).$$

Видно, что для нахождения первого приближения для внешнего разложения необходимо сначала определить явный вид коэффициента $f_1^*(\operatorname{Re})$. Для этого в решении (2.5) перейдем к внешней переменной ξ . Тогда из (2.5) следует, что $f_1^*(\operatorname{Re}) = \operatorname{Re}$. Таким образом, получаем:

$$t_{g1}^*(\xi, \eta) = 1 + \operatorname{Re} t_{g1}^*(\xi, \eta) \tag{2.11}$$

Подставляя (22) в (10) и удерживая члены порядка Re получим:

$$\Delta^* t_{g1}^* - \frac{\operatorname{Pr} c}{a H_\varepsilon^2} \left[x(1 + \xi^2) \frac{\partial t_{g1}^*}{\partial \xi} + \xi(1 - x^2) \frac{\partial t_{g1}^*}{\partial x} \right] = 0 \tag{2.12}$$

С помощью замены $t_{g1}^* = \Phi(\xi, x) \cdot \exp\left(\frac{\operatorname{Pr} c}{2a} \xi x\right)$ уравнение (2.12) сводится к уравнению Гельмгольца, решением которого являются сплюснутые радиальные сфероидальные функции вида $R\left(i \frac{\operatorname{Pr} c}{2a}, i\xi\right)$, выражающиеся через модифицированные функции Бесселя второго рода $K_{n+\frac{1}{2}}, I_{n+\frac{1}{2}}$. Но для удовлетворения граничным условиям на бесконечности будем использовать представление сфероидальной функции через $K_{n+\frac{1}{2}}$.

Таким образом, общее решение уравнения (2.12) имеет вид:

$$t_{g1}^* = R\left(i \frac{\operatorname{Pr} c}{2a}, i\xi\right) \cdot \exp\left(\frac{\operatorname{Pr} c}{2a} \xi x\right) \tag{2.13}$$

$$R\left(i \frac{\operatorname{Pr} c}{2a}, i\xi\right) = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{\pi a}{\operatorname{Pr} c \xi}} \sum_{n=0}^{\infty} d_n i^n \exp\left(-i\pi \frac{n+3/2}{2}\right) K_{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{\operatorname{Pr} c \xi}{2a}\right)$$

$$K_{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{\operatorname{Pr} c \xi}{2a}\right) = \sqrt{\frac{\pi a}{\operatorname{Pr} c \xi}} \exp\left(-\frac{\operatorname{Pr} c \xi}{2a}\right) \sum_{m=0}^n \frac{(m+n)! a^m}{(n-m)! m! (\operatorname{Pr} c \xi)^m}$$

Здесь $R\left(i \frac{\operatorname{Pr} c}{2a}, i\xi\right)$ – сплюснутая радиальная сфероидальная функция [16],

$K_{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{\operatorname{Pr} c \xi}{2a}\right)$ – модифицированная функция Бесселя [17]. Произвольные постоянные

интегрирования d_n должны быть определены в результате сращивания, которое в данном случае заключается в сравнении поведения функции (2.13) при $\xi \rightarrow 0$ и функции

(2.5) при $\lambda \rightarrow \infty$. Нетрудно установить, что $d_0 = \frac{\operatorname{Pr} \gamma c \lambda_0}{a\sqrt{2}}$, $d_n = 0$ при $n = 1, 2, \dots$. Следовательно:

$$t_{g1}^* = \frac{\gamma \lambda_0}{\xi} \exp\left\{\frac{c \operatorname{Pr}}{2a} \xi(x-1)\right\} \tag{2.14}$$

Найдем первое приближение для внутреннего разложения. Из (2.14) видно, что $f_1(\operatorname{Re}) = \operatorname{Re}$. Таким образом, имеем двучленное внутреннее разложение:

$$t_g(\varepsilon, \eta) = t_{g0}(\varepsilon) + \operatorname{Re} t_{g1}(\varepsilon, \eta) \tag{2.15}$$

Для t_{g0}, t_{g1} в двучленном внутреннем разложении получаем из (1.3) следующую задачу:

$$\frac{\operatorname{Pr}}{a} V_\varepsilon \frac{1}{H_\varepsilon} \frac{\partial t_{g0}}{\partial \varepsilon} = \Delta t_{g1} \tag{2.16}$$

$$t_{p1} = \cos \eta \left(M_1 c \lambda + N_1 (1 - \lambda \operatorname{arccctg} \lambda) + \lambda \int_{\lambda_0}^{\lambda} (\lambda \operatorname{arccctg} \lambda - 1) W_1 d\lambda - (\lambda \operatorname{arccctg} \lambda - 1) \int_{\lambda_0}^{\lambda} \lambda W_1 d\lambda \right) \quad (2.17)$$

с граничными условиями

$$t_{g1} = t_{p1}, \quad \lambda_g \frac{\partial t_{g1}}{\partial \varepsilon} = \lambda_p \frac{\partial t_{p1}}{\partial \varepsilon} \quad \text{при} \quad \varepsilon = \varepsilon_0. \quad (2.18)$$

Чтобы определить поведение $t_{g1}(\infty, \eta)$, сравним двучленные внутреннее и внешнее разложения:

$$t_g(\varepsilon, \eta) = t_{g0}(\varepsilon) + \operatorname{Re} t_{g1}(\varepsilon, \eta), \quad t_{g1}^*(\xi, \eta) = 1 + \operatorname{Re} \frac{\gamma \lambda_0}{\xi} \exp \left\{ \frac{c \operatorname{Pr}}{2a} \xi(x-1) \right\}$$

в результате имеем:

$$t_{g1}(\infty, \eta) = \operatorname{Pr} \frac{c \lambda_0 \gamma}{2a} (\cos \eta - 1) \quad (2.19)$$

Из (2.16) видим, что для нахождения t_{g1} необходимо сначала определить поле скорости, т. е. решить гидродинамическую задачу.

3. Определение фотофоретической силы и скорости

Общее решение уравнений гидродинамики, удовлетворяющих конечности при $\varepsilon \rightarrow \infty$ имеет вид [12]:

$$\begin{aligned} U_\varepsilon(\varepsilon, \eta) &= \frac{U_\infty}{c \operatorname{ch} \varepsilon H_\varepsilon} \cos \eta \left\{ \lambda A_2 + \left[\lambda - (1 + \lambda^2) \operatorname{arccctg} \lambda \right] A_1 + c^2 (1 + \lambda^2) \right\} \\ U_\eta(\varepsilon, \eta) &= -\frac{U_\infty}{c H_\varepsilon} \sin \eta \left\{ \frac{A_2}{\lambda} + [1 - \lambda \operatorname{arccctg} \lambda] A_1 + c^2 \lambda \right\}, \\ P_g(\varepsilon, \eta) &= P_\infty + c \frac{\mu_g U_\infty}{H_\varepsilon^4} x (\lambda^2 + x^2) A_2. \end{aligned} \quad (3.1)$$

С учетом (3.1), получаем следующее уравнение для t_{g1} :

$$\Delta t_{g1} = - \frac{\beta x}{(1 + \lambda^2) H_\varepsilon^2} G(\lambda) \quad (3.2)$$

где $G(\lambda) = \lambda A_2 + \left[\lambda - (1 + \lambda^2) \operatorname{arccctg} \lambda \right] A_1 + c^2 (1 + \lambda^2)$, $\beta = \frac{\operatorname{Pr} \gamma \lambda_0}{ac}$.

Решение для t_{g1} ищем в виде:

$$t_{g1} = k(\lambda) + f(\lambda) \cos \eta \quad (3.3)$$

с краевыми условиями:

$$\begin{aligned} k(\lambda) &\rightarrow -\operatorname{Pr} \frac{c \lambda_0 \gamma}{2a}, \quad f(\lambda) \rightarrow \operatorname{Pr} \frac{c \lambda_0 \gamma}{2a} \quad \text{при} \quad \lambda \rightarrow \infty \\ k(\lambda) &= 0, \quad f(\lambda) = \operatorname{const} \quad \text{при} \quad \lambda = \lambda_0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Подставляя (3.3) в (3.2) видим, что $k(\lambda)$ принимает вид:

$$k(\lambda) = -\operatorname{Pr} \frac{\gamma \lambda_0 c}{2a} \left(1 - \frac{\operatorname{arccctg} \lambda}{\operatorname{arccctg} \lambda_0} \right),$$

а $f(\lambda)$ удовлетворяет уравнению:

$$(1 + \lambda^2) \frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2} + 2\lambda \frac{\partial f}{\partial \lambda} - 2f = -\beta \frac{G(\lambda)}{1 + \lambda^2} \quad (3.5)$$

Общее решение уравнения (3.5), удовлетворяющее краевым условиям (3.4), имеет вид:

$$t_{g1} = -\frac{\text{Pr} \gamma \lambda_0 c}{2a} \left(1 - \frac{\text{arcctg} \lambda}{\text{arcctg} \lambda_0} \right) + \cos \eta \left((\lambda \text{arcctg} \lambda - 1) C_3 + \right. \\ \left. + \beta \left\{ A_2 \left[\text{arcctg} \lambda - \frac{\lambda}{2} \text{arcctg}^2 \lambda \right] + \frac{A_1}{2} \left[\text{arcctg} \lambda - \lambda \text{arcctg}^2 \lambda \right] + \frac{c^2}{2} \lambda \text{arcctg} \lambda \right\} \right) \quad (3.6)$$

Для определения постоянных интегрирования в (3.6) и (2.17), воспользуемся граничными условиями на поверхности частицы (2.18). В результате получаем:

$$C_3 = -\frac{1}{\Delta} \left\{ -N_1 \frac{1}{1 + \lambda_0^2} + \beta \left[A_2 \left(\frac{\delta}{1 + \lambda_0^2} \left(1 - \frac{\lambda_0}{2} \text{arcctg} \lambda_0 \right) - \frac{\Delta}{2} \text{arcctg} \lambda_0 + \frac{1}{2\lambda_0} \text{arcctg} \lambda_0 \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{A_1}{2} \left(\frac{\delta}{1 + \lambda_0^2} (1 - \lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0) - \Delta \right) + \frac{c^2}{2} \left(\Delta + \frac{1}{\lambda_0} \right) \right] \right\}, \\ M_1 = -\frac{N_1 + C_3}{c} \left(\frac{1}{\lambda_0} - \text{arcctg} \lambda_0 \right) + \frac{\beta}{c \lambda_0} \left[A_2 \left(\text{arcctg} \lambda_0 - \frac{\lambda_0}{2} \text{arcctg}^2 \lambda_0 \right) + \right. \\ \left. + \frac{A_1}{2} \left(\text{arcctg} \lambda_0 - \lambda_0 \text{arcctg}^2 \lambda_0 \right) + \frac{c^2}{2} \lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0 \right],$$

где $\Delta = (1 - \delta) \text{arcctg} \lambda_0 + \frac{\delta \lambda_0}{1 + \lambda_0^2} - \frac{1}{\lambda_0}$, $\delta = \frac{\lambda_g}{\lambda_p}$.

Таким образом в первом приближении по ε нами получены выражения для полей температур вне и внутри аэрозольной частицы. Следовательно, можно, используя граничные условия на поверхности частицы для компонентов скоростей, найти постоянные интегрирования A_1 , A_2 , входящие в выражения (3.1).

$$A_1 = -\frac{\lambda_0 A_2 + c^2 (1 + \lambda_0^2)}{\lambda_0 - (1 + \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0}, \\ A_2 = -\frac{2c^2}{\lambda_0 + (1 - \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0} + \\ + K_{TS} \text{Re} \frac{c \nu_g}{U_\infty t_S} \frac{\lambda_0 - (1 + \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0}{\lambda_0 + (1 - \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0} \frac{1 - \lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0}{(1 + \lambda_0^2) \Delta} \cdot \left[\frac{6}{4\pi c^2 \lambda_0 \lambda_p T_\infty V} \int q_p z dV + \right. \\ \left. + \frac{\text{Pr} \gamma \lambda_0 \delta c}{a (\lambda_0 + (1 - \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0)} \left(\lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0 + 3 - \frac{\text{arcctg}^2 \lambda_0}{1 - \lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0} \right) \right]. \quad (3.7)$$

После их вычисления сила, действующая на сфероид, определяется интегрированием тензора напряжений по поверхности аэрозольной частицы и имеет вид:

$$F_z = -4\pi \frac{\mu_\infty U_\infty}{c} A_2 \quad (3.8)$$

С учетом коэффициента A_2 видим, что общая сила, действующая на твердую крупную аэрозольную частицу сфероидальной формы при малых относительных перепадах температуры в ее окрестности, будет аддитивно складываться из силы вязкого

сопротивления среды F_μ , фотофоретической силы F_{ph} пропорциональной дипольному моменту J и силы F_{dh} , обусловленной движением среды (т. е. учетом конвективных членов в уравнении теплопроводности).

$$F_z = F_\mu + \text{Re}(F_{ph} + F_{dh}), \quad (3.9)$$

$$\text{где } F_\mu = 6\pi a\mu_\infty U_\infty f_\mu n_z, F_{ph} = -6\pi a\mu_\infty f_{ph} J n_z, F_{dh} = -6\pi a\mu_\infty f_{dh} n_z \quad (3.10)$$

Значения коэффициентов f_μ , f_{dh} и f_{ph} могут быть оценены из следующих выражений:

$$f_\mu = \frac{4}{3\sqrt{1+\lambda_0^2}} \frac{1}{\lambda_0 + (1-\lambda_0^2)\text{arccctg } \lambda_0}$$

$$f_{ph} = K_{TS} \frac{\nu_g}{\pi t_S \lambda_p T_\infty} \frac{\lambda_0 - (1+\lambda_0^2)\text{arccctg } \lambda_0}{\lambda_0 + (1-\lambda_0^2)\text{arccctg } \lambda_0} \frac{1-\lambda_0 \text{arccctg } \lambda_0}{a^3 \lambda_0 \Delta}$$

$$f_{dh} = K_{TS} \frac{\nu_g}{\pi t_S \lambda_p T_\infty} \frac{\lambda_0 - (1+\lambda_0^2)\text{arccctg } \lambda_0}{\lambda_0 + (1-\lambda_0^2)\text{arccctg } \lambda_0} \frac{1-\lambda_0 \text{arccctg } \lambda_0}{(1+\lambda_0^2)\Delta} \times$$

$$\times \frac{\text{Pr}}{6a^2 (\lambda_0 + (1-\lambda_0^2)\text{arccctg } \lambda_0)} \left(\lambda_0 \text{arccctg } \lambda_0 + 3 - \frac{\text{arccctg}^2 \lambda_0}{1-\lambda_0 \text{arccctg } \lambda_0} \right) \int_V q_p dV.$$

При оценке коэффициентов f_μ , f_{dh} и f_{ph} необходимо учитывать, что индексом S обозначены значения физических величин, взятые при средней температуре поверхности сфероида, равной T_S , которая определяется по формуле (2.10).

Приравнивая общую силу к нулю, получаем выражение для величины скорости упорядоченного движения сфероидальной частицы:

$$U_{ph} = -\text{Re}(U_p + U_{dh}) \quad (3.11)$$

$$\text{Здесь } U_p = \frac{f_{ph}}{f_\mu} J n_z, U_{dh} = \frac{f_{dh}}{f_\mu} J n_z$$

4. Анализ полученных результатов

Формулы (3.10) – (3.11) позволяют оценить влияние движения среды, т.е. учет конвективных членов в уравнении теплопроводности на величины фотофоретической силы и скорости при малых относительных перепадах температуры в окрестности сфероидальной частицы.

Чтобы оценить, какой вклад движения среды оказывает на скорость фотофореза твердой крупной аэрозольной частицы сфероидальной формы, необходимо конкретизировать природу тепловых источников, неоднородно распределенных в ее объеме. В качестве примера рассмотрим простой случай, когда частица поглощает излучение как черное тело, т.е. нагрев частицы происходит в тонком слое толщиной $\delta\varepsilon \ll \varepsilon_0$. При этом плотность тепловых источников внутри слоя толщиной $\delta\varepsilon$ определяется с помощью формулы [18]:

$$q_p(\varepsilon, \eta) = \begin{cases} -\frac{ch\varepsilon \cos\eta}{c(ch^2\varepsilon - \sin^2\eta)\delta\varepsilon} I_0, & \frac{\pi}{2} \leq \eta \leq \pi, \quad \varepsilon_0 - \delta\varepsilon \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0; \\ 0, & 0 \leq \eta \leq \frac{\pi}{2}. \end{cases}$$

где I_0 – интенсивность падающего излучения, связанная со средней температурой по-

верхности частицы T_S соотношением $T_S = T_\infty + \frac{a\sqrt{1+\lambda_0^2}}{4\lambda_g} I_0 \text{arcctg} \lambda_0$.

В результате получаем следующие выражения для скорости фотофореза абсолютно черных твердых крупных аэрозольных частиц сфероидальной формы

$$U_{ph}^* = \text{Re } f_{ph}^* n_z, \quad (4.1)$$

$$f_{ph}^* = \frac{b}{a} K_{TS} \frac{v_g I_0}{2t_S \lambda_p T_\infty} \left(\lambda_0 - (1 + \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0 \right) \frac{\sqrt{1 + \lambda_0^2}}{\Delta} \left(\frac{1}{\lambda_0} - \text{arcctg} \lambda_0 \right) \times$$

$$\times \left[1 - \frac{\text{Pr}}{4} \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda_0^2} \left(\lambda_0 - (1 + \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0 \right)} \left(\lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0 + 3 - \frac{\text{arcctg}^2 \lambda_0}{1 - \lambda_0 \text{arcctg} \lambda_0} \right) \right]$$

$$f_{ph}^{**} = \frac{b}{a} K_{TS} \frac{v_g I_0}{2t_S \lambda_p T_\infty} \left(\lambda_0 - (1 + \lambda_0^2) \text{arcctg} \lambda_0 \right) \frac{\sqrt{1 + \lambda_0^2}}{\Delta} \left(\frac{1}{\lambda_0} - \text{arcctg} \lambda_0 \right)$$

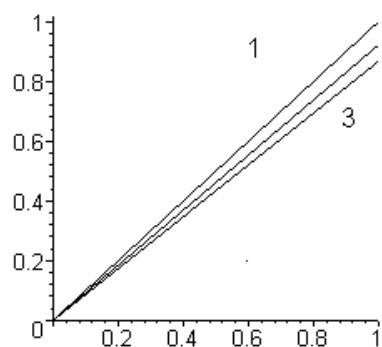


рис. 1

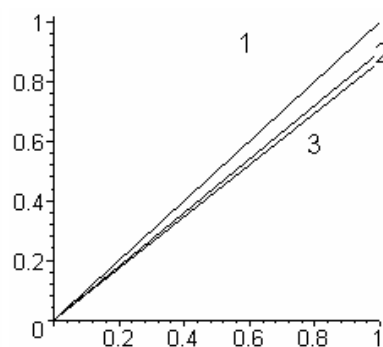


рис. 2

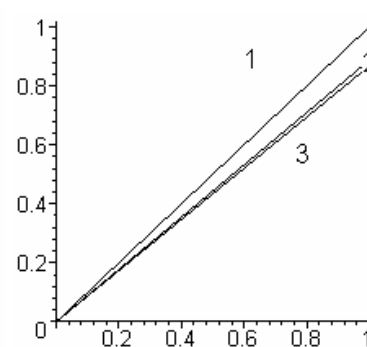


рис. 3

Зависимость функций $f_{ph}^*/f_{ph}^{**} \Big|_{T_\infty=300K}$ от интенсивности падающего излучения при отношении полуосей $b/a = 0.2$ (рис. 1), $b/a = 0.5$ (рис. 2), $b/a = 0.7$ (рис. 3). I_0 , Вт/см².

Для иллюстрации вклада движения среды и отношения полуосей сфероида в скорость фотофореза (4.1), на рисунках приведены кривые, связывающие значения $f_{ph}^*/f_{ph}^{**} \Big|_{T_\infty=300K}$ с интенсивностью падающего излучения для частиц борированного графита ($\lambda_p = 55$ Вт/(м град)) со сферической (кривая 3) и сфероидальной (кривая 1 – без учета движения среды; кривая 2 – с учетом движения среды) формами поверхности, взвешенных в воздухе при $T_\infty = 300K$ для различных отношений полуосей сфероида: $b/a = 0.2$ (рис. 1), $b/a = 0.5$ (рис. 2), $b/a = 0.7$ (рис. 3).

Заключение

Численный анализ показал, что при фиксированном отношении полуосей с увеличением интенсивности падающего излучения I_0 вклад движения среды приводит к

монотонному уменьшению скорости фотофореза (см. рисунок) с относительной погрешностью около 12%.

Литература

1. Hidy G.M. and Bnock J.R. Photophoresis and the Descent of Particles into the Lower Stratosphere // *J. Geophys. Res.* 1967. V. 12. P. 455-460.
2. Кутуков В.Б., Шукин Е.Р., Яламов Ю.И. О фотофоретическом движении аэрозольной частицы в поле оптического излучения // *ЖТФ.* 1976. Т. 46. № 3. С. 626-627.
3. Lin S.P. On Photophoresis // *Coll. Inter. Sci.* 1975. V. 51. № 1. P. 66-74.
4. Кутуков В.Б., Яламов Ю.И. Нелинейные эффекты при распространении лазерного излучения в атмосфере. Томск. 1977. С. 145-147.
5. Бахтилов В.И., Шукин Е.Р., Яламов Ю.И. Теория термодиффузиофотофореза летучих крупных сфероидальных аэрозольных частиц // *Вопросы физики формообразования и фазовых превращений: Сборник / КГУ. Калинин.* 1982. С. 118-128.
6. Берковский Б.М., Краков М.С., Никифоров И.В., Полевиков В.К. Гидродинамическое сопротивление эллипсоидальной капли при малых числах Рейнольдса // *МКГ.* 1987. №3. С. 4-8.
7. Oseen C.W. *Hydrodinamik.* Leipzig. Akademische Verlag. 1927.
8. Praudman I., Pearson J.R.A. Expansion at small Reynolds Nuber for the Flow Past a Sphere and a Circular Cylinder // *J. Fluid. Mech.* 1957. V.2. P. 237-262/
9. Acrivos A., Taylor T.D. Head and Mass Transfer From Single Spheres in Stokes Flow // *J. Phys.* 1962. V.5. № 4. P. 387-394.
10. Баканов С.П., Ролдугин В.И. О двух методах построения теории термофореза крупных аэрозольных частиц // *Коллоид. журн.* 1977. Т. 39. № 6. С. 1027-1038
11. Подоскин А.Б., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. Теория термофореза умеренно крупных аэрозольных частиц // *ЖТФ.* 1982. Т. 52. Вып. 11. С. 2253-2261.
12. Хаппель Дж, Бреннер Г. *Гидродинамика при малых числах Рейнольдса.* М.: Мир, 1976. 630 с.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика.* М.: Наука. 1986. 736 с.
14. Ван-Дайк М. *Методы возмущений в механике жидкости.* М.: Мир. 1967. С. 310.
15. Гупано Ю.П., Рязанцев Ю.С. О массе – и теплообмене сферической частицы в ламинарном потоке вязкой жидкости // *ПММ.* 1971. Т. 35. С. 255-265.
16. Камке Э. *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям.* М.: Физ.-мат. лит.-ры. 1961. 735 с.
17. Борен К., Хафмер Д. *Поглощение и рассеяние света малыми частицами.* М.: Мир, 1986.

AN INFLUENCE OF ENVIRONMENT'S MOVEMENT ON PHOTOPHORESIS OF THE FIRM AEROSOL PARTICLE OF THE SPHEROIDAL FORM

N.V. Malai, N.N. Mironova

The Belgorod state university, 308007, Belgorod, street. Student's 14,
e-mail: malay@bsu.edu.ru, mironovanadya@mail.ru

Influence of an environment's movement on a photophoresis of a large aerosol particle's of the spheroidal form is considered at small relative temperature drops in its vicinity.

Key words: photophoresis, an aerosol particle, a spheroid, environment's movement.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Л.А. Александрова** – аспирант кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского государственного университета гражданской авиации (Санкт-Петербург)
- Г.М. Аматава** – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующая кафедрой педагогики и методики начального образования Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- М.А. Амагов** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического анализа Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Н.В. Андреева** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Е.С. Антонова** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- С.Н. Афанасьев** – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт» (г. Харьков)
- Д.А. Бакланов** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.А. Батулин** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией ускорителей прямого действия, ионной имплантации и модификации реакторных материалов Института прикладной физики Национальной академии наук Украины (г. Сумы)
- Э.Н. Береславский** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики Санкт-Петербургского государственного университета гражданской авиации (Санкт-Петербург)
- Т.П. Бондарева** – ассистент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.Г. Бондарев** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Р.Е. Бродский** – аспирант Института монокристаллов Национальной академии наук Украины (г. Харьков)
- Е.П. Бухели** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Ю.П. Вирченко** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- И.Е. Внуков** – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.К. Гришин** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры ядерной физики физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (г. Москва)
- А.Н. Ермаков** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского института ядерной физики им. Д.В. Скобельцына при Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова (г. Москва)
- Ю.В. Жандармов** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- П.Н. Жукова** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры математики и информатики Белгородского юридического института МВД России (г. Белгород)
- Б.К. Зуев** – доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией Института геохимии и аналитической химии РАН им. В.И. Вернадского (г. Москва)
- К.Б. Канн** – доктор технических наук, профессор кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)



- Б.Х. Каримов** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры "Физика" физико-математического факультета Ферганского государственного университета (г. Фергана, Узбекистан)
- Ю.А. Касаткин** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института электрофизики и радиационных технологий (г. Харьков)
- И.К. Кириченко** – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой высшей математики Украинской инженерно-педагогической академии (г. Харьков)
- М.Ю. Ковалевский** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математического анализа Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.В. Красильников** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры материаловедения и нанотехнологий Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- И.С. Кузнецова** – аспирант кафедры математического анализа Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Э.Л. Купленников** – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт» Национальной академии наук Украины (г. Харьков).
- С.И. Кучеев** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород).
- А. В. Лиманская** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- П.А. Литвинов** – кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории ускорителей прямого действия, ионной имплантации и модификации реакторных материалов Института прикладной физики Национальной академии наук Украины (г. Сумы)
- Л.В. Логвинова** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры педагогики и методики начального образования Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.М. Логвинов** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Н.В. Малай** – доктор физико-математических наук, декан физического факультета, профессор кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.С. Малышевский** – доктор физико-математических наук, декан факультета физики Южного федерального университета (г. Ростов-на-Дону)
- С.И. Матюхин** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики факультета электроники и приборостроения Орловского государственного технического университета (г. Орел)
- В.Т. Мацкевич** – аспирант Института теоретической физики Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт» (г. Харьков)
- Л.В. Мигаль** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета (г. Белгород).
- Н.Н. Миронова** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Н.Н. Насонов** – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.А. Плесканев** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Ю.Е. Поленова** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)

- М.М. Сапов** – кандидат технических наук, ведущий инженер ОАО «Экспериментальный завод» (г. Санкт-Петербург)
- М.А. Сапрыкин** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.Н. Сердюченко** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры строительной механики корабля Национального университета кораблестроения им. адмирала С. О. Макарова (г. Николаев)
- Н.В. Соболева** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.А. Стукалов** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.В. Сыщенко** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Е.А. Тагильцева** – аспирант, младший научный сотрудник Института геохимии и аналитической химии РАН им. В.И. Вернадского (г. Москва)
- А.П. Тагильцев** – кандидат технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник ОАО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности» – "ГИРЕДМЕТ" (г. Москва)
- А.И. Тарновский** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Г.А. Травин** – доктор технических наук, профессор кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Л.И. Трахтенберг** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией Института физики и химии НИФХИ им. Л.Я. Картова (г. Москва)
- Д.А. Трухов** – студент факультета физики Южного федерального университета (г. Ростов-на-Дону)
- Б.В. Храбростин** – доктор технических наук, профессор кафедры информационно-телекоммуникационных систем и технологий Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Д.Б. Храбростин** – инженер Центра радиоэлектроники при Белгородском государственном университете (г. Белгород)
- Н.А. Чеканов** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математического анализа Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Р.А. Шагохин** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.Н. Швец** – студент физического факультета Харьковского государственного университета им. Н.В. Каразина (г. Харьков)
- Е.В. Шевченко** – аспирант кафедры математического анализа Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.Г. Шкловский** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- М.А. Шкловская** – аспирант кафедры теплофизики факультета энергомашиностроения Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана (г. Москва)
- З.Л. Шулиманова** – доктор физико-математических наук, заведующая кафедрой физики и химии Российской открытой академии транспорта МИИТ (г. Москва)
- Е.Р. Щукин** – доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Института высоких температур РАН (г. Москва)