ИЗВЕСТИЯ КАБАРДИНО-БАЛКАРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

PROCEEDING OF THE KABARDINO-BALKARIAN STATE UNIVERSITY

TOM IV, № 1, 2014

Учредитель: Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова (КБГУ)

Главный редактор Б.С. КАРАМУРЗОВ Первый зам. главного редактора А.П. САВИНЦЕВ Зам. главного редактора С.К. БАШИЕВА Зам. главного редактора Х.Б. ХОКОНОВ Зам. главного редактора А.А. ШЕБЗУХОВ Зам. главного редактора Г.Б. ШУСТОВ Зам. главного редактора М.М. ЯХУТЛОВ Ответственный секретарь М.Ч. ШОГЕНОВА

Редакционная коллегия

Волков Ю.Г., Гуфан Ю.М., Дзамихов К.Ф., Карлик А.Е., Матузов Н.И., Радченко В.П., Радченко О.А., Рубаков В.А., Фельдштейн Д.И., Фортов В.Е., Хавинсон В.Ц., Хохлов А.Р., Хуснутдинова Э.К., Гукепшоков М.Х., Жамбекова Р.Л., Кетенчиев Х.А., Кочесоков Р.Х., Мизиев И.А., Шхануков-Лафишев М.Х.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС 77-44485 от 31.03.2011 г.

Подписной индекс в Каталоге «Пресса России» 43720.

Журнал включен в Перечень рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций.

Доступ к рефератам статей журнала осуществляется на сайте научной электронной библиотеки «eLIBRARY.RU» (http://elibrary.ru).

ISSN 2221-7789

Адрес редакции: Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова 360004. г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173

Телефоны:	(88662) 722313
E-mail:	rio@kbsu.ru, http://izvestia.kbsu.ru
	<u>ه</u> ۸ -

© Авторы, 2014

© Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, 2014

Founder: Kabardino-Balkarian State University (KBSU)

Editor in chief **B.S. KARAMURZOV** The 1st Deputy Editor **A.P. SAVINTSEV** Deputy Editor **S.K. BASHIEVA** Deputy Editor **H.B. KHOKONOV** Deputy Editor **A.A. SHEBZUHOV** Deputy Editor **G.B. SHUSTOV** Deputy Editor **M.M. YAHUTLOV** Executive sekretary **M.Ch. SHOGENOVA**

Editorial board

Volkov Yu.G., Gufan Yu.M., Dzamikhov K.F., Karlik A.E., Matuzov N.I., Radchenko O.A., Radchenko V.P., Rubakov V.A., Feldshtein D.I., Fortov V.E., Khavinson V.Ts., Hohlov A.R., Khusnutdinova E.K., Gukepshokov M.Kh., Zhambekova R.L., Ketenchiev Kh.A., Kochesokov R.Kh., Miziev I.A., Shkhanukov-Lafishev M.Kh.

Registration certificate PI № FS 77-44485 from 31.03.2011 Subscription index in the catalog «Russian Press» 43720 Access to abstracts of articles of the magazine is carried out on the Scientific Electronic Library Online «eLIBRARY.RU» (http://elibrary.ru).

ISSN 2221-7789

Editorial address: Kabardino-Balkarian State University, 360004, Nalchik, Chernyshevsky st. 173

Phone number:	(88662)722313
E-mail:	rio@kbsu.ru , http://izvestia.kbsu.ru

 © Authors, 2014
 © Kabardino-Balkarian State University of H.M. Berbekov, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие
Хищенко К.В., Фортов В.Е. Исследование уравнений состояния материалов при высокой
концентрации энергии 6
Дьячков С.А., Левашов П.Р. Исследование области применимости модели Томаса – Ферми
по отношению к квантовым и обменным поправкам 17
Сенченко В.Н., Беликов Р.С. Установка для экспериментального исследования теплофизиче-
ских свойств проводящих тугоплавких веществ в окрестности их точки плавления методом им-
пульсного нагрева
Сенченко В.Н., Капустин Д.И. Измерение 2D температурных полей в научных и про-
мышленных применениях 27
Фортова С.В. Численное моделирование вихревых каскадов для сдвигового слоя
Белятинская И.В., Фельдман В.И., Милявский В.В., Бородина Т.И., Вальяно Г.Е.,
Беляков А.А. Ударно-метаморфические трансформации породообразующих минералов
природных кристаллических сланцев Южного Урала 40
Иванов К.В., Бакланов Д.И., Голуб В.В., Головастов С.В., Баженова Т.В., Котельни-
ков А.Л., Бивол Г.Ю. Переход горения в детонацию в метано-кислородной смеси в узком
канале
Хохлов В.А., Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Анисимов С.И., Петров Ю.В. Составная
сверхупругая и пластическая ударная волна, вызванная коротким лазерным импульсом 53
Фокин В.Б., Левашов П.Р., Поварницын М.Е., Хищенко К.В. Континуально-атомисти-
ческое моделирование лазерной абляции алюминия
Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Иванов М.И., Нестеренко А.О., Овчинников А.В., Пет-
ровский В.П., Ромашевский С.А., Чефонов О.В. Экспериментальные исследования взаимо-
действия фемтосекундных лазерных импульсов с наноструктурированными мишенями 66
Савинцев А.П., Гавашели Ю.О., Кяров А.Х. Изучение механизмов пробоя хлорида на-
трия в сильных электрических и лазерных полях
Баранов В.Е., Пугачев Л.П., Андреев Н.Е., Левашов П.Р. РІС моделирование лазерно-
плазменного ускорения электронов: верификация моделей, реализованных в кодах
LAPLAC и WAKE-EXI
Хоконов М.Х. Многофотонные эффекты сильного поля при взаимодействии электронов
высокой энергии с ориентированными кристаллами 82
Шурупов А.В., Дудин С.В., Козлов А.В., Минцев В.Б., Фортов В.Е., Завалова В.Е.,
Леонтьев А.А., Шурупова Н.П. Двухкаскадный взрывомагнитный генератор с отключе-
нием тока первичного контура
Лапицкий Д.С. Динамическое удержание заряженных пылевых частиц в линейных ло-
вушках Пауля
Кяров А.Х., Савинцев А.П. Поляризуемость в теории функционала плотности
Бельхеева Р.К. Уравнение состояния пористых смесей конденсированных компонентов с
коэффициентом Грюнайзена, зависящим от объема, и удельной теплоемкостью, зависящей
от температуры
Печеркин В.Я., Василяк Л.М., Владимиров В.И., Депутатова Л.В., Наумкин В.Н. Экс-
периментальное исследование динамики пылевых частиц в коронном разряде 112
Требования к оформлению научной статьи, представляемой в журнал «Известия Ка-
бардино-Балкарского государственного университета» 118

CONTENTS

Foreword	5
Khishchenko K.V., Fortov V.E. Investigation of equations of state of materials at high concen-	
tration of energy	6
Dyachkov S.A., Levashov P.R. Research of the region of validity of the Thomas – Fermi model	
with respect to quantum and exchange correction	17
Senchenko V.N., Belikov R.S. Experimental setup for investigation of thermophysical properties	
of refractory materials near the melting point by pulse heating technique	22
Senchenko V.N., Kapustin D.I. Measurement of 2D temperature fields in scientific and indus-	
trial applications	27
Fortova S.V. Numerical simulation of the eddy cascades in shear layer	34
Belyatinskaya I.V., Feldman V.I., Milyavskii V.V., Borodina T.I., Valiyano G.E., Belyakov A.A.	
Shock-metamorphic transformations of rock-forming minerals of natural Southern Urals' crystal-	
line schists	40
Ivanov K.V., Baklanov D.I., Golub V.V., Golovastov S.V., Bazhenova T.V., Kotelnikov A.L.,	
Bivol G.Yu. Deflagration to detonation transition in methane-oxygen mixture in narrow channel	46
Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Anisimov S.I., Petrov Yu.V. Complex su-	
perelastic and plastic shock wave, caused by a short laser pulse	53
Fokin V.B., Levashov P.R., Povarnitsyn M.E., Khishchenko K.V. Continuum-atomistic mod-	
eling of laser ablation of aluminum	60
Agranat M.B., Andreev N.E., Ivanov M.I., Nesterenko A.O., Ovchinnikov A.V., Petrovskiy V.P.,	
Romashevskiy S.A., Chefonov O.V. Experimental investigation of interaction of femtosecond	
laser pulses with the nanostructured targets	66
Savintsev A.P., Gavasheli Yu.O., Kyarov A.Kh. Study of breakdown mechanism of sodium	
chloride in strong electric and laser fields	72
Baranov V.E., Pugachev L.P., Andreev N.E., Levashov P.R. PIC modelling of laser-plasma	
acceleration of electrons: verification of models from codes LAPLAC and WAKE-EXI	76
Khokonov M.Kh. Strong field multi-photon effects in interaction of high energy electrons with	
oriented crystals	82
Shurupov A.V., Dudin S.V., Kozlov A.V., Mintsev V.B., Fortov V.E., Zavalova V.E., Leontyev A.A.,	
Shurupova N.P. Two-stage explosive magnetic generator with disconnecting of the primary cir-	
cuit current	88
Lapitsky D.S. Dynamic dust particle confinement in linear Paul traps	93
Kyarov A.Kh., Savintsev A.P. Polarizability in density function theory	98
Belkheeva R.K. Equation of state of a porous mixture of condensed components with Grüneisen	
coefficient dependent on the volume and specific heat of substance dependent on the temperature	104
Pecherkin V.Ya., Vasilyak L.M., Vladimirov V.I., Deputatova L.V., Naumkin V.N. Experi-	
mental investigation of dust particles dynamics in corona discharge	112
The demand to the design of the scientific article, represented in the journal «Proceeding	
of the Kabardino-Balkarian State University»	118

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящий выпуск журнала «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета» содержит доклады, представленные участниками XXVII Международной конференции «Уравнения состояния вещества», проходившей на учебно-научной базе КБГУ в поселке Эльбрус с 1 по 6 марта 2012 года.

Конференция была организована Объединенным институтом высоких температур (ОИВТ) РАН, Москва, Институтом проблем химической физики (ИПХФ) РАН, Черноголовка, и КБГУ, Нальчик.

Программа конференции содержала 64 устных и 103 стендовых доклада. В этих работах представлены результаты, полученные 402 соавторами из 75 институтов из 9 стран (Россия, Украина, Беларусь, Германия, США, Великобритания, Франция, Швеция и Израиль). Для участия в заседаниях в поселок Эльбрус приехали 95 ученых из разных городов России, Украины и Беларуси.

Тематика сделанных докладов включает следующие направления:

– модели и результаты теоретических расчетов уравнений состояния вещества при высоких плотностях энергии;

– физические явления в ударных и детонационных волнах;

– вопросы взаимодействия интенсивного электромагнитного излучения и мощных пучков заряженных частиц с веществом;

- способы генерации интенсивных потоков энергии;

- методы диагностики быстрых процессов;

- физика низкотемпературной плазмы;

- физико-технические проблемы энергетики и технологические проекты.

Сделанные устные и стендовые доклады вызвали неподдельный интерес участников. Заседания сопровождались активной дискуссией представленных результатов как фундаментальных, так и прикладных исследований физики экстремальных состояний вещества.

Статьи, представленные участниками, получили одобрение программного комитета конференции, прошли предусмотренное правилами рецензирование и были рекомендованы к публикации в журнале. Рецензентами статей выступили член редколлегии журнала «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета», профессор А.П. Савинцев, а также профессора М.Б. Агранат, Н.Е. Андреев, Е.М. Апфельбаум, Г.В. Белов, М.Е. Вейсман, В.С. Воробьев, Л.Г. Дьячков, В.П. Ефремов, И.Л. Иосилевский, членкорр. РАН Г.И. Канель, А.В. Конюхов, И.К. Красюк, В.В. Милявский, член-корр. РАН В.Б. Минцев, член-корр. РАН О.Ф. Петров, М.Е. Поварницын, Н.И. Талуц, А.В. Уткин, Л.Р. Фокин, К.В. Хищенко и Г.В. Шпатаковская.

Мы искренне благодарны всем, кто участвовал в подготовке, организации и проведении конференции, а также всем участникам, которые представили свои интересные доклады и плодотворно обсудили результаты других докладчиков.

Также мы выражаем благодарность за финансовую поддержку, оказанную Российской академией наук и Российским фондом фундаментальных исследований конференциям по физике экстремальных состояний в 2012–2014 годах (проекты РФФИ 12-02-06011 и 13-02-06212).

Сопредседатели XXVII Международной конференции «Уравнения состояния вещества» директор ОИВТ РАН, академик РАН В.Е. Фортов ректор КБГУ, профессор Б.С. Карамурзов

ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ВЫСОКОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭНЕРГИИ

*Хищенко К.В., Фортов В.Е.

Объединенный институт высоких температур РАН

*konst@ihed.ras.ru

Рассматриваются методы изучения термодинамических свойств вещества в условиях экспериментов при высокой концентрации энергии. Представлена модель уравнения состояния материалов с учетом полиморфных фазовых превращений, плавления и испарения в широком диапазоне плотностей и температур. Проводится сопоставление результатов расчетов термодинамических характеристик металлов (алюминий, титан, олово) с имеющимися экспериментальными данными, полученными при статическом сжатии до высоких давлений, в условиях нагрева мощным импульсом тока, в волнах ударного сжатия и адиабатического расширения.

Ключевые слова: уравнение состояния, высокая концентрация энергии, алюминий, титан, олово, высокие давления, ударное сжатие, адиабатическое расширение.

INVESTIGATION OF EQUATIONS OF STATE OF MATERIALS AT HIGH CONCENTRATION OF ENERGY

Khishchenko K.V., Fortov V.E.

Joint Institute for High Temperatures RAS

Methods of study of thermodynamic properties of matter in experiments at high concentrations of energy are considered. An equation of state model for materials is presented with taking into account polymorphic transformations, melting and evaporation over a wide range of densities and temperatures. Calculated thermodynamic characteristics of metals (aluminum, titanium, tin) are shown in comparison with available experimental data obtained at static compression up to high pressures, under conditions of heating by powerful pulses of current, in waves of shock compression and adiabatic expansion.

Keywords: equation of state, high concentration of energy, aluminum, titanium, tin, high pressures, shock compression, adiabatic expansion.

Введение

Уравнение состояния вещества определяет фундаментальную связь термодинамических параметров, не зависящую от способа достижения тех или иных значений этих параметров. Знание уравнения состояния требуется для описания разнообразных процессов, в частности, протекающих в условиях высокой концентрации энергии, таких, как при воздействии на конструкционные материалы интенсивного лазерного излучения, пучков высокоэнергетических частиц, мощных импульсов тока, при высокоскоростном соударении тел и т.д. [1–5].

Модели термодинамических свойств вещества в различных областях фазовой диаграммы постоянно совершенствуются [6–8]. Для проверки качества этих моделей требуется наличие экспериментальных данных в возможно более широких интервалах температур и давлений, включая состояния твердого тела, жидкости и газа. В связи с трудностью учета межчастичного взаимодействия в многокомпонентной неупорядоченной среде описание термодинамических характеристик реальных материалов в обширной области состояний на фазовой диаграмме обычно осуществляется в рамках полуэмпирического подхода [1]. При таком подходе функциональная зависимость термодинамического потенциала задается исходя из теоретических соображений, а выбор некоторых коэффициентов этой зависимости делается из условия наилучшего описания экспериментальных данных.

В настоящей работе кратко рассматриваются основные современные методы экспериментов по изучению термодинамических свойств материалов в широкой области высокоэнергетических состояний. Представлена полуэмпирическая модель уравнения состояния с учетом полиморфных фазовых превра-

щений, плавления и испарения. Проводится сопоставление результатов расчетов термодинамических характеристик металлов (алюминия, титана и олова) с имеющимися экспериментальными данными при высоких давлениях и температурах.

Методы экспериментов по изучению термодинамических свойств материалов при высокой концентрации энергии

Характерный вид фазовой диаграммы вещества в переменных «степень сжатия ($\sigma = \rho/\rho_0$, $\rho = 1/V$ и ρ_0 – плотность и ее значение при нормальных условиях, V – удельный объем) – давление (P)» показан на рис. 1 на примере алюминия. Расчетные кривые на этой диаграмме соответствуют границам фазовых переходов (плавления, испарения), а также состояниям, которые реализуются в различных экспериментах в квазистатических и динамических условиях [9–29].



Рис. 1. Диаграмма состояний алюминия, которые исследованы в экспериментах при высокой концентрации энергии. Расчетные кривые: штриховая линия – изотерма T = 0 К, сплошные линии – ударные адиабаты образцов с начальной плотностью $\rho_{00} = 2.71$, 1.89, 1.6, 1.3, 0.91 и 0.34 г/см³ (справа налево, соответственно), пунктир – изоэнтропы разгрузки,

штрихпунктир – границы областей фазовых переходов (М – кристалл-жидкость, В – жидкость-пар, СР – критическая точка перехода жидкость-пар). Экспериментальные точки:

I1 – [9], I2 – [10], I3 – [11], I4 – [12]	, I5 – [13], I6 – [14], I7 – [15], I8 -	- [16], I9 – [17], J0 – [18], J1 – [19],
J2 – [20], J3 – [21], J4 – [22], J5 –	- [23], J6 – [24], J7 – [25], J8 – [26	6], J9 – [27], K1 – [28], K2 – [29]

Область сжатия твердого тела и жидкости до мегабарных давлений при температурах (T) до нескольких килокельвинов доступна для изучения в статических условиях с использованием алмазных наковален [30]. При этом температура образца может варьироваться путем омического или лазерного нагрева. В частности, известны эксперименты по измерению температуры плавления металлов при давлениях до $P \sim 1$ Мбар [31].

Состояния твердой и жидкой фазы с высокой удельной энергией (E) исследуются в экспериментах по нагреву проводников мощными импульсами тока [28, 29, 32]. Различные термодинамические величины, такие как плотность, температура и скорость звука, могут быть измерены при давлениях в несколько килобар и плотностях от нормального значения до величин около критической точки перехода жидкость–пар [32].

Возможности изучения состояний материалов при высоких давлениях и температурах существенно расширяют динамические методы с использованием волн ударного сжатия [2] и адиабатической разгрузки [33]. В таких экспериментах состояния с высокой концентрацией энергии реализуются в контролируемых условиях в течение короткого времени инерционного разлета исследуемых образцов (~10 нс). При этом определение термодинамических характеристик исследуемого вещества осуществляется по измеренным кинематическим параметрам движения среды в автомодельных течениях типа стационарной ударной волны или простой волны Римана.

Для описания ударных волн система уравнений, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии, в одномерном случае записывается в алгебраическом виде [1]:

$$V = V_0 \frac{D - U}{D},\tag{1}$$

$$P = P_0 + \frac{DU}{V_0},\tag{2}$$

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \left(P + P_0 \right) \left(V_0 - V \right), \tag{3}$$

где D – скорость распространения ударной волны относительно неподвижной невозмущенной среды, состояние которой характеризуется давлением P_0 , удельным объемом V_0 и удельной внутренней энергией E_0 , U – массовая скорость вещества за фронтом волны.

Примером простой волны, в которой все возмущения состояний распространяются в одном направлении, является изоэнтропическая волна разрежения в однородно сжатой среде. В простой волне состояния вдоль характеристик, направленных в сторону распространения волны, неизменны, а все состояния вдоль любой другой траектории на пространственно-временной плоскости описываются единой зависимостью P(U), соответствующей инварианту Римана. С учетом этого из системы гидродинамических уравнений следуют соотношения для расчета изменений внутренней энергии и удельного объема вещества в волнах изоэнтропического расширения:

$$E = E_0 + \int_{P_0}^{P} P(dU/dP)^2 dP, \qquad (4)$$

$$V = V_0 - \int_{P_0}^{P} (dU/dP)^2 dP .$$
 (5)

Основным источником информации об уравнении состояния различных материалов при высокой концентрации энергии являются данные, полученные методом ударно-волнового нагружения сплошных образцов [9–24]. Эксперименты по ударному сжатию пористых образцов [14, 25–27] позволили увеличить эффекты теплового нагрева и изучить диапазон повышенных температур и более низких плотностей, по сравнению со значением при нормальных условиях.

Наиболее существенные данные о поведении материалов при высоких давлениях и температурах получены в экспериментах по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых образцов [13, 33–35]. Подобные опыты определяют надежность термодинамического описания диапазона фазовой диаграммы от сжатых и разогретых состояний твердого тела и жидкости, возникающих под действием интенсивно-го динамического нагружения образцов, до области состояний двухфазной смеси жидкость–газ и разреженного газа с плотностью $\rho \sim 0.01\rho_0$ [3].

Модель уравнения состояния

Свободная энергия металла F представляется в виде суммы трех слагаемых, определяющих упругую часть взаимодействия при T = 0 К (F_c), тепловой вклад атомов (F_a) и электронов (F_e) [1]:

$$F(V,T) = F_c(V) + F_a(V,T) + F_e(V,T),$$
(6)

причем все компоненты в выражении (6) имеют различную форму для каждой твердой фазы и жидкости.

Объемная зависимость энергии для разных твердотельных модификаций вещества при холодном (T = 0 K) сжатии $\sigma_c \ge 1$ (где $\sigma_c = V_{0c}/V$, V_{0c} – удельный объем рассматриваемой кристаллической фазы при P = 0 и T = 0 К) задается в виде

$$F_{c}(V) = a_{0}V_{0c}\ln\sigma_{c} - 3V_{0c}\sum_{i=1}^{6}\frac{a_{i}}{i}(\sigma_{c}^{-i/3}-1) + 3V_{0c}\sum_{i=1}^{2}\frac{b_{i}}{i}(\sigma_{c}^{i/3}-1) + E_{0c}, \qquad (7)$$

который обеспечивает нормировку

$$F_c(V_{0c}) = E_{0c} \,. \tag{8}$$

Здесь константа E_{0c} для твердой фазы, которая стабильна при нормальных условиях, полагается равной нулю, а для других твердых фаз значения E_{0c} определяются из условия наилучшего описания данных по границам равновесия между твердыми фазами.

Нетрудно заметить, что дифференцирование энергии (7) по объему дает для давления $P_c(V)$ выражение, аналогичное предложенному ранее в работе [36] как некоторое разложение модели Томаса – Ферми по степеням радиуса атомной ячейки $r_c \sim \sigma_c^{-1/3}$. Значение коэффициента b_2 в формуле (7) определяется из условия совпадения с моделью идеального газа ферми-частиц (электронов) в области сжатий больше $\sigma_c \sim 10^3 - 10^4$:

$$b_2 = Z^{5/3} \frac{1}{5} (3\pi^2)^{2/3} a_B^2 E_H (Am_u V_{0c})^{-5/3}, \qquad (9)$$

где E_H – энергия Хартри, a_B – радиус Бора, m_u – атомная единица массы (а.е.м.), A – атомная масса в а.е.м., Z – атомный номер элемента.

Для определения коэффициентов b_1 и a_i в случае каждой твердой фазы требуется выполнение условий для давления, модуля объемного сжатия и его первой и второй производных при $\sigma_c = 1$:

$$P_c(V_{0c}) = -dF_c/dV = 0, (10)$$

$$B_c(V_{0c}) = -V \mathrm{d}P_c/\mathrm{d}V = B_{0c}, \qquad (11)$$

$$B_c'(V_{0c}) = dB_c/dP_c = B_{0c}', \qquad (12)$$

Параметры V_{0c} , B_{0c} и B'_{0c} подбираются итерациями так, чтобы при нормальных условиях удовлетворялись табличная величина удельного объема V_0 и значения изоэнтропического модуля сжатия $B_S = -V(\partial P/\partial V)_S = B_{S0}$ и его производной по давлению $B'_S = B'_{S0}$, определенные по данным статических и динамических измерений. Также требуется совпадение с моделью Томаса – Ферми с квантовыми и обменными поправками [37] в области степеней сжатия $\sigma_c \sim 10^2 - 10^4$. Задача условной минимизации решается с помощью введения множителей Лагранжа [7, 38].

Энергия на холодной кривой (T = 0 K) в области разрежения $\sigma_c < 1$ для каждой полиморфной модификации задается полиномом

$$F_c(V) = V_{0c} \left[A \left(\sigma_c^m / m - \sigma_c^n / n \right) + B \left(\sigma_c^l / l - \sigma_c^n / n \right) \right] + E_{sub} , \qquad (13)$$

позволяющим обеспечить значение энергии сублимации $F_c(V) - E_{0c} = E_{sub}$ при $V \to \infty$ [39] и равенство (10). Выполнение условий (8), (11) и (12) оставляет в выражении (13) лишь два свободных параметра – l и n.

Вклад тепловых возбуждений кристаллической решетки в свободную энергию для каждой твердой фазы задается следующим образом:

$$F_{a}(V,T) = F_{a}^{acst}(V,T) + \sum_{a=1}^{3(v-1)} F_{aa}^{opt}(V,T), \qquad (14)$$

$$F_a^{acst}(V,T) = \frac{RT}{v} \left[3\ln\left(1 - e^{-\theta_{sa}/T}\right) - D(\theta_{sa}/T) \right],\tag{15}$$

$$F_{a\alpha}^{opt}(V,T) = \frac{RT}{v} \ln\left(1 - e^{-\theta_{o\alpha}/T}\right),\tag{16}$$

где R – газовая постоянная; v – число атомов в элементарной ячейке кристаллической решетки; D(x) – дебаевская функция [40]; θ_{sa} и θ_{oa} – характеристические температуры акустических и оптических ветвей фононного спектра. Для определения зависимостей θ_{sa} и θ_{oa} от объема используется интерполяционная формула

$$\frac{\theta_{sa}(V)}{\theta_{0sa}} = \frac{\theta_{oa}(V)}{\theta_{0oa}} = \sigma^{2/3} \exp\left[\left(\gamma_0 - 2/3\right) \frac{B_s^2 + D_s^2}{B_s} \operatorname{arctg}\left(\frac{B_s \ln \sigma}{B_s^2 + D_s \left(\ln \sigma + D_s\right)}\right)\right],\tag{17}$$

в которой γ_0 – значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях. Константы B_s и D_s находятся из требования оптимального описания опытных данных по измерению теплового расширения вещества [41]. Значения коэффициентов θ_{0sa} и θ_{0oa} выбираются по экспериментальной зависимости удельной теплоемкости вещества при нормальном давлении от температуры.

Зависимость энергии жидкой фазы на холодной кривой от объема имеет вид:

$$F_{c}^{(l)}(V) = F_{c}^{(s)}(V) + V_{l0} \frac{2\sigma_{l}^{2}}{1 + \sigma_{l}^{3}} \left[d_{0} + \frac{d_{n}}{n_{l}} \sigma_{l}^{n_{l}} \right] \text{ при } \sigma_{l} \ge 1,$$
(18)

$$F_{c}^{(l)}(V) = V_{l0} \sum_{i=1}^{3} \frac{d_{i}}{n_{i}} \sigma_{l}^{n_{i}} + E_{sub} \text{ при } \sigma_{l} < 1,$$
(19)

где $F_c^{(s)}$ – энергия наиболее плотной твердой фазы высокого давления при T = 0 К, $\sigma_l = V_{l0}/V$, V_{l0} – удельный объем жидкой фазы в точке плавления при некотором выбранном давлении P_{m0} . Коэффициенты d_0 и d_n в формуле (18) находятся из условий фазового равновесия кристалла и жидкости при $P = P_{m0}$ и $T = T_{m0}$ (T_{m0} – заданная температура в точке плавления при $P = P_{m0}$), а коэффициенты выражения (19) определяются так, чтобы функция $F_c^{(l)}(V)$ была непрерывной вместе с тремя своими производными при $\sigma_l = 1$.

Вклад теплового движения тяжелых частиц (атомов, ионов, ядер) в свободную энергию жидкой фазы задается следующим образом:

$$F_a(V,T) = RT \left[3\ln\left(1 - e^{-\theta_a/T}\right) - D(\theta_a/T) \right],$$
(20)

где характеристическая температура θ_a зависит не только от объема, но и от температуры,

$$\theta_a = \theta_l(V) + \sqrt{T_a T \sigma_l^{2/3}} , \qquad (21)$$

 T_a – константа,

$$\frac{\theta_l(V)}{\theta_{l0}} = \sigma_l^{2/3} \exp\left[\left(\gamma_{l0} - 2/3\right) \frac{B_l^2 + D_l^2}{B_l} \operatorname{arctg}\left(\frac{B_l \ln \sigma_l}{B_l^2 + D_l \left(\ln \sigma_l + D_l\right)}\right)\right],\tag{22}$$

Величина θ_{l0} определяется по значению теплоты плавления при $P = P_{m0}$, параметры B_l и D_l определяются на основе данных по ударной сжимаемости сплошных и пористых образцов, а γ_{l0} является значением коэффициента Грюнайзена жидкой фазы при $\sigma_l = 1$ и T = 0 К.

Вклад термически возбужденной электронной компоненты в свободную энергию металла задается интерполяционным выражением [3], которое выбрано так, чтобы в первую очередь удовлетворить предельным соотношениям для вырожденного электронного газа при невысоких температурах (много меньше температуры Ферми) и для идеального газа свободных электронов в пределе высоких температур.

Термодинамические свойства титана и олова

Титан при атмосферном давлении имеет две кристаллические модификации [42]. Низкотемпературная фаза Ti II (α) имеет гексагональную плотноупакованную (гпу) структуру. Фазовый переход II–I происходит при T = 1155 K, высокотемпературная фаза Ti I (β) обладает объемно-центрированной кубической (оцк) структурой. Плавится титан при атмосферном давлении в точке T = 1941 K.

По результатам рентгеноструктурных исследований фазовый переход II–III определен в титане при P = 20 кбар и T = 298 K, фаза Ti III с гексагональной структурой типа ω может оставаться в метастабильном состоянии при нормальных условиях. Тройная точка I–II–III имеет место около P = 80 кбар и T = 913 K. Фаза III при комнатной температуре остается стабильной вплоть до $P \approx 1.2$ Мбар [43, 44], где превращается в фазу IV (γ) с орторомбической структурой (неупорядоченная гпу) с изменением объема $\Delta V/V \approx 0.016$. Промежуточная модификация IV переходит в орторомбическую фазу V (δ , неупорядоченная оцк) при $P \approx 1.4$ Мбар с $\Delta V/V \approx 0.013$, которая остается стабильной до максимального исследованного давления P = 2.2 Мбар [44].

В настоящей работе уравнение состояния было построено для системы трех твердых фаз титана α-β-ω с учетом плавления и испарения в широком диапазоне плотностей и температур.



Рис. 2. Давление в титане при *T* = 0 К. Сплошная линия – настоящая работа, штриховая линия – [45]. Маркеры К1 – результаты расчетов по модели Томаса – Ферми [37]

Сравнение изотермы T = 0 К, полученной в настоящей работе, с результатами расчетов по модели Томаса – Ферми с поправками [37] для титана показано на рис. 2. Как следует из рисунка, полученная кривая холодного сжатия хорошо согласуется с квантово-статистическими расчетами [37]. На рис. 2 также показан вариант расчета холодной кривой для ω -фазы титана, предложенный в работе [45] для диапазона давлений P < 1 Мбар.



Рис. 3. Ударные адиабаты титана (Ті) и олова (Sn). Эксперимент: I1 – [46], I2 – [47], I3 – [48], I4 – [15], I5 – [49], I6 – [50], I7 – [51], I8 – [12], I9 – [52]

Ударная сжимаемость титана подробно изучена с помощью традиционных плоских взрывных метательных систем [15, 46, 47, 49–51] в области давлений до $P \sim 1$ Мбар, с использованием мощных взрывных устройств [52] и двухступенчатой легкогазовой пушки [12] до $P \sim 3$ Мбар. Состояние ударно-

го сжатия при $P \sim 6$ Мбар было реализовано с помощью взрывных систем специальной конструкции [48], а наибольшая интенсивность нагружения с применением конденсированных взрывчатых веществ $P \sim 13$ Мбар была достигнута в сходящейся сферической ударной волне [21]. Максимальное давление в эксперименте с титаном $P \sim 129$ Мбар зафиксировано в сильной ударной волне при подземном ядерном взрыве [53].

Сравнение расчетной ударной адиабаты титана с экспериментальными данными [12, 15, 46–52] представлено на рис. 3. Видно, что полученное многофазное уравнение состояния адекватно описывает поведение этого металла в области перехода α — ω и плавления при ударном сжатии.

Олово при атмосферном давлении известно в двух модификациях [42]. Низкотемпературная фаза II (серое олово или α) характеризуется кубической структуре типа алмаза. При T = 287 К наблюдается переход в фазу I (белое олово или β), имеющую объемно-центрированную тетрагональную (оцт) структуру собственного типа. Плавление олова при атмосферном давлении происходит при T = 505 К.

Фазовые изменения олова под давлением в твердом состоянии подробно изучены при переходе II–I до P = 9 кбар и T = 78 К [42]. Превращение в фазу высокого давления III (γ) с оцт структурой при комнатной температуре определено во многих работах при P = 94 кбар с $\Delta V/V \approx 0.011$. Рентгеноструктурные исследования олова при комнатной температуре проведены до $P \approx 2$ Мбар [54–56]. Превращение III–IV определено около $P \approx 450$ кбар [54, 55], фаза IV имеет оцк структуру и стабильна до $P \approx 1.57$ Мбар [56]. При этом давлении происходит переход в фазу V со структурой глу [56].

Кривая плавления олова при высоких давлениях изучена разными методами до $P \sim 1$ Мбар, в частности, в алмазных наковальнях при лазерном [57, 58] и омическом [59] нагреве образца, а также в условиях ударно-волнового эксперимента [60] при разгрузке ударно-сжатого образца в оконный материал (фторид лития). Тройная точка I–III–жидкость зафиксирована при P = 30 кбар и T = 580 К.

В настоящей работе уравнение состояния построено для системы двух твердых фаз олова β-γ с учетом плавления и испарения в широком диапазоне плотностей и температур.



Рис. 4. Фазовая диаграмма олова при высоких давлениях и температурах. Расчетные кривые: штрих-пунктир – границы фаз в системе β–γ–жидкость, сплошная линия – ударная адиабата. Маркеры – результаты расчетов (I1 – [61], I2 – [62]) и измерений (I3 – [59], I4 – [60]) температуры плавления при разных давлениях, а также экспериментальные данные о давлении перехода β–γ при комнатной температуре (I5 – [42])

Расчетная фазовая диаграмма олова показана в координатах давление-температура на рис. 4. В области давлений до 100 кбар следует отметить хорошее согласие полученных параметров фазовых границ, как с данными по превращению β-γ (см. рис. 4), так и с данными о температуре плавления этих двух фаз [42]. При более высоких давлениях наблюдается согласие расчетной кривой плавления не только с экспериментальными данными [59, 60], но и с результатами других расчетов [61, 62].

Сравнение расчетной изотермы T = 298 К с экспериментальными данными [54, 55] на рис. 5 свидетельствует о качестве описания сжимаемости олова в области высоких давлений по предложенной модели.



Рис. 5. Изотерма комнатной температуры (штриховая линия) и ударная адиабата (сплошная линия) олова. Эксперимент: I1 – [15], I2 – [46], I3 – [47], I4 – [50], I5 – [49], I6 – [54], I7 – [55]

Ударное сжатие олова изучено с помощью традиционных взрывных устройств [15, 46, 47, 49, 50] до давлений $P \sim 1.6$ Мбар. Применение специальных взрывных устройств [46–48] расширило диапазон исследований до $P \sim 8$ Мбар. Сопоставление расчетной ударной адиабаты олова с данными [15, 46–50] приведено на рис. 3, 5 и 6. Как видно, разработанное многофазное уравнение состояния адекватно описывает поведение металла во всей изученной области интенсивностей ударного нагружения.



Рис. 6. Ударные адиабаты образцов с начальной плотностью $\rho_{00} = 7.3$ (H₁) и 4.04 г/см³ (H₂), а также изоэнтропы разгрузки ударно-сжатых образцов (S₁ и S₂) олова. Эксперимент: I1 – [46], I2 – [47], I3 – [48], I4 – [15], I5 – [49], I6 – [50], I7 – [63]

Дополнительную информацию о тепловом вкладе в уравнение состояния олова несут данные экспериментов по ударному сжатию исходно пористых образцов [63]. В опытах той же работы [63] был изучен ход изоэнтроп разгрузки металла при величине энтропии вблизи значения в критической точке перехода «жидкость – пар». Сравнение соответствующих расчетных кривых с экспериментальными точками [63] дано на рис. 6. При пересечении изоэнтропами границы двухфазной области «жидкость – пар» имеют место изломы на зависимостях массовой скорости от давления. Из анализа рис. 6 можно сделать вывод об адекватности полученного уравнения состояния олова не только при сжатии твердой и жидкой фаз, но и при расширении расплавленного металла вплоть до начала испарения, а также в области смеси жидкой и газовой фаз.

Заключение

Таким образом, предложенная в настоящей работе модель для описания термодинамических свойств вещества в обширном диапазоне давлений и температур позволяет получить уравнения состояния, которые согласуются с имеющимися экспериментальными данными для конкретных материалов с учетом полиморфных фазовых превращений, плавления и испарения. Приведенные иллюстрации свидетельствуют о хорошей точности описания имеющейся экспериментальной информации для алюминия, титана и олова в широкой области параметров на фазовой диаграмме. Полученные многофазные уравнения состояния могут быть эффективно использованы для расчета термодинамических характеристик металлов в моделировании процессов при высокой концентрации энергии.

Работа выполнена при поддержке Президента Российской Федерации (грант № НШ-6614.2014.2), Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 13-08-12248 и 14-08-00967) и Президиума РАН (программа № 2П «Вещество при высоких плотностях энергии»).

Библиография

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 656 с.

2. Альтшулер Л.В. Применение ударных волн в физике высоких давлений // УФН. 1965. Т. 85, № 2. С. 197–258.

3. Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортов В.Е. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черноголовка: ОИХФ АН СССР, 1988. 200 с.

4. Фортов В.Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе // УФН. 2009. Т. 179, № 6. С. 653–687.

5. Фортов В.Е. Физика высоких плотностей энергии. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. 712 с.

6. Бушман А.В., Фортов В.Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т. 140, № 2. С. 177–232.

7. Bushman A.V., Lomonosov I.V., Fortov V.E. Models of wide-range equations of state for matter under conditions of high energy density // Sov. Tech. Rev. B: Therm. Phys / eds. A.E. Scheindlin, V.E. Fortov N. Y.: Harwood Academic Publ., 1993. V. 5. P. 1.

8. Фортов В.Е. Уравнения состояния вещества: от идеального газа до кварк-глюонной плазмы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. 492 с.

9. Skidmore I.C., Morris E. Experimental equation of state data for uranium and its interpretation in the critical region // Thermodynamics of Nuclear Materials. – Vienna: IAEA, 1962. P. 173–216.

10. Альтшулер Л.В., Чекин Б.С. Метрология высоких импульсных давлений // 1 Всесоюзный симпозиум по импульсным давлениям: сборник научных трудов. Т. 1. М.: ВНИИФТРИ, 1974. С. 5–22.

11. Альтшулер Л.В., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Чекин Б.С. Ударные адиабаты при сверхвысоких давлениях // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. С. 317–325.

12. Isbell W.H., Shipman F.H., Jones A.H. Hugoniot equation of state measurements for eleven materials to five megabars. General Motors Corporation, Material Science Laboratory Report MSL-68-13, 1968.

13. Глушак Б.Л., Жарков А.П., Жерноклетов М.В., Терновой В.Я., Филимонов А.С., Фортов В.Е. Экспериментальное изучение плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. С. 1301–1318.

14. Кормер С.Б., Фунтиков А.И., Урлин В.Д., Колесникова А.Н. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 686–701.

15. LASL Shock Hugoniot Data / S.P. Marsh. Berkeley: Univ. of California Press, 1980. 658 p.

16. Mitchell A.C., Nellis W.J. Shock compression of aluminum, copper and tantalum // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. P. 3363–3374.

17. Симоненко В.А., Волошин Н.П., Владимиров А.С., Нагибин А.П., Ногин В.П., Попов В.А., Сальников В.А., Шойдин Ю.А. Абсолютные измерения ударной сжимаемости алюминия при давлениях Р ≈ 1 ТПа // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 1452–1459.

18. Подурец М.А., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф. Переход стишовита в более плотную фазу на вторых ударных адиабатах кварца // Физ. Земли. 1990. № 4. С. 30–37.

19. Трунин Р.Ф. Сжимаемость различных веществ при высоких давлениях ударных волн. Обзор // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. 1986. № 2. С. 26–43.

20. Трунин Р.Ф., Панов Н.В., Медведев А.Б. Ударные сжимаемости железа, алюминия и тантала при терапаскальных давлениях // Хим. физика. 1995. Т. 14, № 2–3. С. 97–99.

21. Трунин Р.Ф., Панов Н.В., Медведев А.Б. Сжимаемость железа, алюминия, молибдена, титана и тантала при давлениях ударных волн 1–2.5 ТПа // Письма в ЖЭТФ. 1995. Т. 62, № 7. С. 572–575.

22. Трунин Р.Ф., Подурец М.А., Симаков Г.В., Попов Л.В., Севастьянов А.Г. Новые данные по сжимаемости алюминия, плексигласа и кварца, полученные в условиях сильной ударной волны подземного ядерного взрыва // ЖЭТФ. 1995. Т. 108, № 3. С. 851–861.

23. Волков Л.П., Волошин Н.П., Владимиров А.С., Ногин В.Н., Симоненко В.А. Ударная сжимаемость алюминия при давлении 10 Мбар // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. С. 623–627.

24. Knudson M.D., Lemke R.W., Hayes D.B., Hall C.A., Deeney C., Asay J.R. Near-absolute Hugoniot measurements in aluminum to 500 GPa using a magnetically accelerated flyer plate technique // J. Appl. Phys. 2003. V. 94, № 7. P. 4420–4431.

25. Asay J.R., Hayes D.B. Shock-compression and release behavior near melt states in aluminum // J. Appl. Phys. 1975. V. 46, № 11. P. 4789–4800.

26. Баканова А.А., Дудоладов И.П., Сутулов Ю.Н. Ударная сжимаемость пористых вольфрама, молибдена, меди и алюминия в области низких давлений // ПМТФ. 1974. № 2. С. 117.

27. Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Панов Н.В. Ударное сжатие пористого алюминия и никеля при мегабарных давлениях // ТВТ. 2001. Т. 39, № 3. С. 430–436.

28. Clérouin J., Noiret P., Korobenko V. N., Rakhel A.D. Direct measurements and ab initio simulations for expanded fluid aluminum in the metal-nonmetal transition range // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 224203.

29. Clérouin J., Noiret P., Blottiau P., Recoules V., Siberchicot B., Renaudin P., Blancard C., Faussurier G., Holst B., Starrett C.E. A database for equations of state and resistivities measurements in the warm dense matter regime // Phys. Plasmas. 2012. V. 19. P. 082702.

30. Jayaraman A. Diamond anvil cell and high pressure physical investigation // Rev. Mod. Phys. 1983. V. 55. P. 65–108.

31. Boehler R., Ross M. Melting curve of aluminum in diamond cell to 0.8 Mbar: implications for iron // Earth Planet. Sci. Lett. 1997. V. 153. P. 223–227.

32. Gathers G.R. Dynamic methods for investigating thermophysical properties of matter at very high temperatures and pressures // Rep. Progr. Phys. 1986. V. 49. P. 341–396.

33. Альтшулер Л.В., Баканова А.А., Бушман А.В., Дудоладов И.П., Зубарев В.Н. Испарение ударно-сжатого свинца в волнах разгрузки // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. С. 1866–1872.

34. Альтшулер Л.В., Бушман А.В., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Леонтьев А.А., Фортов В.Е. Изоэнтропы разгрузки и уравнение состояния металлов при высоких плотностях энергии // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. С. 741–760.

35. Knudson M.D., Asay J.R., Deeney C. Adiabatic release measurements in aluminum from 240- to 500-GPa states on the principal Hugoniot // J. Appl. Phys. 2005. V. 97. № 7. P. 073514.

36. Калиткин Н.Н., Говорухина И.А. Интерполяционные формулы холодного сжатия веществ // ФТТ. 1965. Т. 7, № 2. С. 355–362.

37. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975. 73 с.

38. Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортов В.Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черноголовка: ИХФЧ РАН, 1992. 196 с.

39. Hultgren R., Desai P.D., Hawkins D.T. et al. Selected values of the thermodynamic properties of the elements. Metals Park: ASME, 1973. 636 p.

40. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. І. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 616 с.

41. Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor R.E., Desai P.D. Thermophysical properties of matter // TPRC Data Series. V. 12. Thermal Expansion. Metallic Elements and Alloys. New York: IFI/Plenum, 1975. 1421 p.

42. Тонков Е.Ю. Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. М.: Наука, 1979. 192 с.

43. Vohra Y.K., Spencer P.T. Novel γ -phase of titanium metal at megabar pressures // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. No 14. P. 3068–3071.

44. Akahama Y., Kawamura H., Le Bihan T. A new distorted body-centred cubic phase of titanium (δ -Ti) at pressures up to 220 GPa // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V. 14. P. 10583–10588.

45. Pecker S., Eliezer S., Fisher D., Henis Z., Zinamon Z. A multiphase equation of state of three solid phases, liquid, and gas for titanium // J. Appl. Phys. 2005. V. 98. P. 043516.

46. Альтшулер Л.В., Крупников К.К., Бражник М.И. Динамическая сжимаемость металлов при давлениях от четырех тысяч до четырех миллионов атмосфер // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. С. 886–893.

47. Альтшулер Л.В., Баканова А.А., Трунин Р.Ф. Ударные адиабаты и нулевые изотермы семи металлов при высоких давлениях // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 91–104.

48. Альтшулер Л.В., Баканова А.А., Дудоладов И.П., Дынин Е.А., Трунин Р.Ф., Чекин Б.С. Ударные адиабаты металлов. Новые данные, статистический анализ и общие закономерности // ПМТФ. 1981. № 2. С. 3–34.

49. McQueen R.G., Marsh S.P. Equation of state for nineteen metallic elements // J. Appl. Phys. 1960. V. 31. P. 1253–1269.

50. Walsh J.M., Rice M.H., R.G., Yarger F.L. Shock-wave compressions of twenty-seven metals equations of state of metals // Phys. Rev. 1957. V. 108. P. 196–216.

51. Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Медведев А.Б. Сжатие титана в ударных волнах // ТВТ. 1999. Т. 37. № 6. С. 881–886.

52. Крупников К.К., Баканова А.А., Бражник М.И., Трунин Р.Ф. Исследование ударной сжимаемости титана, молибдена, тантала и железа // ДАН СССР. 1963. Т. 148. С. 1302–1305.

53. Трунин Р.Ф. Ударная сжимаемость конденсированных веществ в мощных ударных волнах подземных ядерных взрывов // УФН. 1994. Т. 164. № 11. С. 1215–1237.

54. Liu M., Liu L.-G. Compression and phase transitions of tin to half a megabar // High Temp.–High Press. 1986. V. 18. P. 79–85.

55. Desgreniers S., Vohra Y.K., Ruoff A.L. Tin at high pressure: An energy-dispersive x-ray-diffraction study to 120 GPa // Phys. Rev. B. 1989. V. 39, № 14. P. 10359–10361.

56. Salamat A., Garbarino G., Dewaele A., Bouvier P., Petitgirard S., Pickard C.J., McMillan P.F., Mezouar M. Dense close-packed phase of tin above 157 GPa observed experimentally via angle-dispersive x-ray diffraction // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 140104.

57. Schwager B., Ross M., Japel S., Boehler R. Melting of Sn at high pressure: Comparisons with Pb // J. Chem. Phys. 2010. V. 133. P. 084501.

58. Briggs R., Daisenberger D., Salamat A., Garbarino G., Mezouar M., Wilson M., McMillan P.F. Melting of Sn to 1 Mbar // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 377. P. 012035.

59. Weir S.T., Lipp M.J., Falabella S., Samudrala G., Vohra Y.K. High pressure melting curve of tin measured using an internal resistive heating technique to 45 GPa // J. Appl. Phys. 2012. V. 111. P. 123529.

60. Hereil P.L., Mabire C. Temperature measurement of tin under shock compression // J. de Phys. IV. 2000. V. 10, № P9. P. 799–804.

61. Bernard S., Maillet J.B. First-principles calculation of the melting curve and Hugoniot of tin // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 012103.

62. Mabire C., Hereil P.L. Shock induced polymorphic transition and melting of tin up to 53 GPa (experimental study and modelling) // J. de Phys. IV. 2000. V. 10, № P9. P. 749–754.

63. Гударенко Л.Ф., Гущина О.Н., Жерноклетов М.В., Медведев А.Б., Симаков Г.В. Ударное сжатие и изоэнтропическое расширение пористых образцов вольфрама, никеля и олова // ТВТ. 2000. Т. 38, № 3. С. 437–444.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНИМОСТИ МОДЕЛИ ТОМАСА – ФЕРМИ ПО ОТНОШЕНИЮ К КВАНТОВЫМ И ОБМЕННЫМ ПОПРАВКАМ

Дьячков С.А., ^{*}Левашов П.Р.

Объединенный институт высоких температур РАН

*pasha@ihed.ras.ru

Определена область применимости модели Томаса – Ферми и ее тепловой части по отношению к квантовым и обменным поправкам. Высокая точность вычислений была достигнута при помощи специального подхода для решения краевой задачи и численного интегрирования. Показано, что тепловая часть может быть применима при более низких температурах, чем полная модель.

Ключевые слова: квантово-статистические модели, модель Томаса – Ферми, низкотемпературная плазма.

RESEARCH OF THE REGION OF VALIDITY OF THE THOMAS – FERMI MODEL WITH RESPECT TO QUANTUM AND EXCHANGE CORRECTION

Dyachkov S.A., Levashov P.R.

Joint Institute for High Temperatures RAS

We determine the region of applicability of the Thomas – Fermi model and its thermal part with respect to quantum and exchange corrections. Very high accuracy of computations has been achieved by using a special approach for the solution of the boundary problem and numerical integration. We show that the thermal part of the model can be applied at lower temperatures than the full model.

Keywords: quantum-statistical models, Thomas – Fermi model, warm dense matter.

Введение

В настоящее время для ряда прикладных задач требуются широкодиапазонные уравнения состояния вещества. Достаточно точные данные по термодинамическим функциям могут быть получены на основе моделей среднего атома, таких как модель Хартри – Фока – Слэтера. Но такой подход требует очень сложных вычислений с неконтролируемой сходимостью. Поэтому важно также найти достаточно простую модель, дающую результат требуемой точности без численного решения уравнения Шрёдингера. Таким требованиям удовлетворяет модель Томаса-Ферми с поправками.

Развитие этой модели подробно описано в книге [1]. Работы Томаса [2] и Ферми [3] являются первым приближением статистической теории атома. Их подход учитывал только электростатическое взаимодействие между электронами в кулоновском поле ядер. П. Дирак [4] придумал, как учесть обменное взаимодействие в модели Томаса – Ферми. Он определил обменную энергию свободного газа электронов как функцию плотности и добавил её к электростатическому взаимодействию. Это привело к возникновению обменной поправки к самосогласованному потенциалу и ко всем термодинамическим величинам.

Далее Вайцзеккер [5] учёл неоднородность электронной плотности вблизи ядер, а в работе [6] метод Томаса-Ферми распространился на область конечных температур. Д.А. Киржницем [7] был разработан общий метод получения квантовых и обменных поправок путем разложения по степеням постоянной Планка матрицы плотности электронной системы. Н.Н. Калиткин [8] реализовал этот подход для расчета термодинамических функций вещества, использовав подобие модели по атомному номеру.

В этой работе учитываются все вышеуказанные поправки к модели Томаса – Ферми. Сравнивая величину поправок со значениями термодинамических функций, можно построить области по температуре и плотности, соответствующие допустимой малости поправки.

Кроме того, стоит заметить, что квантовые поправки сильнее проявляются при низких температурах. Их влияние можно уменьшить, учитывая только тепловую часть термодинамических функций, и тем самым, расширить область применимости в сторону низких температур.

Анализ применимости модели Томаса – Ферми с квантовыми и обменными поправками в области «газовой плазмы», соответствующей плотностям вещества, много меньшим нормальной, проводился в работе [9]. В этих условиях более точной является химическая модель, и результаты расчетов по ней показывают, что зависимости степени ионизации и фактора сжимаемости от температуры на изохорах для исследуемой плазмы лития и натрия имеют ступенчатый характер. Такое поведение обусловлено оболочечными эффектами, которые в данной работе не рассматриваются. Модель Томаса – Ферми с квантовыми и обменными поправками в этих условиях дает усредненную зависимость без осцилляций. В других практически важных областях применимость модели качественно не исследовалась, а такой анализ и является целью настоящей работы.

Г.В. Шпатаковская [10] разработала метод, позволяющий вычислить оболочечную поправку. С его помощью был получен ступенчатый характер зависимости степени ионизации для различных веществ и устранено вышеуказанное несоответствие. Дальнейшее развитие квазиклассической модели строения вещества с учетом ряда физических эффектов отражено в недавнем обзоре [11]. Учет оболочечной поправки и анализ области применимости этой модели планируется провести в последующих работах.

Модель Томаса – Ферми при конечной температуре

Краевая задача для самосогласованного потенциала V(r):

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rV) = \frac{2}{\pi} (2T)^{3/2} I_{1/2} \left(\frac{V(r) + \mu}{T} \right), \\ rV(r) \Big|_{r=0} = Z, \\ V(r_0) = 0, \\ \frac{dV(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} = 0, \end{cases}$$
(1)

следует из уравнения Пуассона для сферической ячейки [11, гл. 1.1, п. 2]. Здесь используется атомная система единиц, функция Ферми – Дирака:

$$I_k(x) = \int_0^\infty \frac{y^k dy}{1 + \exp(y - x)}$$

T – температура, μ – химпотенциал, Z – заряд ядра, r_0 – радиус сферической ячейки иона $0 < r < r_0$, который может быть вычислен из условия

$$r_0 = \left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{1/3},$$

где $V = 1/n_i$ – объем, приходящийся на один ион, n_i – концентрация ионов.

Заменой переменных $\phi(x)/x = (V(r) + \mu)/T$, $xr_0 = r$, $a = 4\sqrt{2T}r_0^2/\pi$ можно свести краевую задачу (1) к следующей:

$$\begin{cases} \frac{d^2\phi}{dx^2} = axI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) \\ \phi(0) = \frac{Z}{Tr_0} , \\ \phi(1) = \phi'(1) \end{cases}$$
(2)

и решать её методом стрельбы. Для этого возьмем пробные значения $\phi_1^{test}(1)$ и $\phi_2^{test}(1)$ так, чтобы разности между решениями задач Коши

$$\begin{cases} \phi'(x) = \xi(x), \\ \xi'(x) = axI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right), \\ \phi(1) = \xi(1) = \phi_1^{test}(1) \end{cases} \begin{cases} \phi'(x) = \xi(x), \\ \xi'(x) = axI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right), \\ \phi(1) = \xi(1) = \phi_2^{test}(1) \end{cases}$$
(3)

и задачи (2) в точке $x = 0: \phi_1^{test}(0) - \phi(0)$ и $\phi_1^{test}(0) - \phi(0)$ имели разные знаки. Затем, используя метод деления отрезка $\left[\phi_1^{test}(1), \phi_2^{test}(1)\right]$ пополам, получаем необходимую точность.

Давление и внутренняя энергия электронного газа вычисляются следующим образом [11, гл. 6.1, п. 1]:

$$P = \frac{(2T)^{5/2}}{6\pi^2} I_{3/2}(\phi(1)), \quad E = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} V T^{5/2} \left[2I_{3/2}(\phi(1)) - 3\int_0^1 I_{3/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) x^2 dx \right] - E_0;$$

здесь $E_0 = -0.76874512422$ – внутренняя энергия изолированного атома. 18 Если с вычислением давления особых трудностей не возникает, то выражение для внутренней энергии следует свести к дифференциальному уравнению и интегрировать совместно с потенциалом Томаса – Ферми. Для этого сделаем правый конец интервала интегрирования x = 1 переменным:

$$E(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} V T^{5/2} \left[2I_{3/2}(\phi(x)) - 3\int_0^x I_{3/2}\left(\frac{\phi(t)}{t}\right) t^2 dt \right] - E_0$$

и продифференцируем по x:

$$E'(x) = \frac{3\sqrt{2}}{\pi^2} V T^{5/2} \left[I_{1/2}(\phi(x))\phi'(x) - I_{3/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) x^2 dx \right].$$
(4)

Затем, решая задачу Коши

$$\begin{aligned}
\varphi'(x) &= \zeta(x), \\
\xi'(x) &= axI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right), \\
E'(x) &= \frac{3\sqrt{2}}{\pi^2}VT^{5/2}\left[I_{1/2}(\phi(x))\phi'(x) - I_{3/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right)x^2dx\right], \\
\phi(0) &= \phi_0, \\
\xi(0) &= \xi_0, \\
E(0) &= \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2}VT^{5/2}I_{3/2}(\phi(0)) - E_0
\end{aligned}$$
(5)

получаем в точке x = 1 решение заданной точности $E \equiv E(1)$.

Квантовые и обменные поправки

Краевая задача для поправки к потенциалу [11, гл. 6.1, п. 2]:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \chi}{dx^2} = a \left[I'_{1/2} \left(\frac{\phi(x)}{x} \right) + x Y' \left(\frac{\phi(x)}{x} \right) \right], \\ \chi(0) = 0, \\ \chi(1) = \chi'(1), \end{cases}$$
(6)

где $Y(x) = I_{1/2}(x)I'_{1/2}(x) + 6 \int_{-\infty}^{x} [I'_{1/2}(t)]^2 dt$, решается тем же методом, что и задача (2). Разница лишь в том,

что выражение справа содержит неизвестную функцию $\phi(x)$, поэтому после вычисления начальных условий для задачи (4) следует решать задачи Коши для $\phi(x)$ и $\chi(x)$ совместно, чтобы обеспечить заданную точностью расчётов:

$$\begin{cases} \phi'(x) = \xi(x), \\ \xi'(x) = axI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right), \\ \chi'(x) = \psi(x), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi'(x) = a \left[I'_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) + xY'\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) \right], \\ \phi(1) = \xi(1) = \phi_{1}, \\ \chi(1) = \psi(1) = \chi_{1/2}^{\text{fest}}. \end{cases}$$
(7)

Ещё одна сложность состоит в вычислении производной функции Y(x):

$$Y'(x) = \frac{7}{4}I_{-1/2}^{2}(x) + \frac{1}{2}I_{1/2}(x)I'_{-1/2}(x),$$

так как в этом случае мы не можем воспользоваться выражением $I'_{k}(x) = kI_{k-1}(x)$ для вычисления производной $I'_{-1/2}(x)$ в силу расходимости получающегося интеграла. Но, используя достаточно точную аппроксимацию для $I_{-1/2}(x)$ из [12], можно вычислить ее производную.

Поправки к давлению и энергии вычисляются таким образом [11, гл. 6.1]:

$$\Delta P = \frac{T^2}{3\pi^2} [\chi(1)I_{1/2}(\phi(1)) + Y(\phi(1))],$$

$$\Delta E = \frac{2T^2}{3\pi^2} r_0^2 \left[\int_0^1 x \chi(x) I_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) dx + \int_0^1 2x^2 Y\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) dx \right] + \frac{\sqrt{2T}}{6\pi} \chi'(0) - \Delta E_0.$$

Здесь $\Delta E_0 = -0.2690017$. Поправка к энергии вычисляется с заданной точностью при помощи той же процедуры, что и энергия.

Тепловая часть

Тепловая часть вычисляется так: вычитаем из термодинамических функций и поправок к ним их значения при нулевой температуре:

$$E_{T} = E - E|_{T=0}, \qquad P_{T} = P - P|_{T=0},$$

$$\Delta E_{T} = \Delta E - \Delta E|_{T=0}, \qquad \Delta P_{T} = \Delta P - \Delta P|_{T=0}.$$

Точность расчёта подбирается таким образом, чтобы в тепловой части сохранялось нужное количество значащих цифр.

Результаты расчетов области применимости

Качественный анализ области применимости модели Томаса – Ферми ранее проводился в работе [13]. Полученные в данной статье результаты подтверждают сделанные ранее выводы о конфигурации области применимости и позволяют получить количественные оценки.

Системы дифференциальных уравнений модели Томаса – Ферми (3), (5), (7) решались с заданной точности с помощью библиотеки GNU Scientific Library [14] для языка программирования С. Результаты расчётов представлены на рис. 1–4 для водорода и алюминия.



Рис. 2. Области применимости модели Томаса – Ферми (ограничена сплошной линией) и её тепловой части (ограничена пунктирной линией) для водорода. Граница соответствует равенству величины поправки к энергии и энергии. В закрашенных областях поправка больше величины энергии

2 10³ $\Delta E/E = 0.1$ 5 $\Delta E/E = 0.5$ $\Delta E_T'/E_T = 0.1$ 2 $\Delta E_T/E_T = 0.5$ 10^2 ρ , g/cc 2 10 5 2 1 10^2 5 10 2 5 T, eV

Рис. 1. Области применимости модели Томаса – Ферми и её тепловой части для водорода. В обоих случаях граница определялась параметром: величиной отношения поправки к энергии к энергии. В закрашенных областях модель неприменима по соответствующему параметру



Рис. 3. Области применимости модели Томаса – Ферми и её тепловой части для алюминия. В обоих случаях граница определялась параметром: величиной отношения поправки к энергии к энергии. В закрашенных областях модель неприменима по соответствующему параметру Рис. 4. Области применимости модели Томаса – Ферми (ограничена сплошной линией) и её тепловой части (ограничена пунктирной линией) для алюминия. Граница соответствует равенству величины поправки к энергии и энергии. В закрашенных областях поправка больше величины энергии



По полученным данным можно заметить следующую тенденцию: область применимости для тепловой части действительно расширяется в область низких температур.

Аналогичный анализ можно провести и для поправки к давлению. В этом случае области неприменимости по соответствующим параметрам лежат внутри представленных графиков по энергии, то есть по давлению область применимости шире, и для тепловой части наблюдается та же тенденция.

Заключение

В ходе работы в рамках модели Томаса – Ферми был разработан алгоритм расчета термодинамических функций электронов и поправок к ним с заданной точностью и реализован в виде программы на языке программирования С. Расчеты показали, что тепловая часть модели применима при более низких температурах, чем полная модель.

Более точно определить положение модели Томаса – Ферми в иерархии квантово-статистических моделей можно будет только путем аккуратного учета всех поправок одного порядка малости. В дальнейшем будет разработан алгоритм расчёта оболочечной поправки по усовершенствованному методу, предложенному Г.В. Шпатаковской [15], и область применимости можно будет уточнить.

Авторы благодарят Шпатаковскую Г.В. и Иосилевского И.Л. за обсуждения и ценные замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 13-08-12248, 14-08-00967 и 14-08-31450) и Президента РФ (грант НШ-6614.2014.2).

Библиография

1. Гамбош П. Статистическая теория атома и её применения. М.: Изд-во иностранной литературы, 1951. 397 с.

2. Thomas L.H. The calculation of atomic fields // Proc. Cambr. Phil. Soc. 1926. Vol. 23. P. 542.

3. Fermi E. Un Metodo Statistico per la Determinazione di alcune Prioprieta dell'Atomo // Rend. Ac. Lincei. 1927. Vol. 6, № 6. P. 602–607.

4. Dirac P.A. M. Note on exchange phenomena in the Thomas atom // Proc. Cambr. Phil. Soc. 1930. Vol. 26, № 3. P. 376–385.

5. Weizsacker C.F. Zur Theorie der Kernmassen // Zs. f. Phys. 1935. Vol. 96. P. 431-458.

6. Feynman R.P., Metropolis N., Teller E. Equations of state of elements based on the generalized fermi – thomas theory // Phys. Rev. 1949. Vol. 75. № 10. P. 1561–1573.

7. Киржниц Д.А. Квантовые поправки к уравнению Томаса – Ферми // ЖЭТФ. 1957. Вып. 32, № 1. С. 64–71.

8. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии // Препринт, ИПМ АН СССР. 1975.

9. Иосилевский И.Л., Грязнов В.К. О сравнительной точности термодинамического описания свойств газовой плазмы в приближениях Томаса – Ферми и Саха // Теплофизика высоких температур. 1981. Вып. 19. №. 6. С. 1121–1126.

10. Шпатаковская Г.В. Оболочечные эффекты в термодинамике невырожденной плазмы // Препринт ИПМ. 1984. № 8.

11. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б., Новиков В.Г. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. 400 с.

12. Cody W.J., Thacher Jr., Henry C. Rational Chebyshev approximations for Fermi – Dirac integrals of orders -1/2, 1/2 and 3/2 // Math. Comp. 1967. Vol. 21. № 99. P. 30–40.

13. Киржниц Д.А., Шпатаковская Г.В., Лозовик Ю.Е. Статистическая модель вещества // УФН. 1975. Вып. 117. № 1. С. 3–47.

14. GNU Scientific Library [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.gnu.org/software/gsl/.

15. Шпатаковская Г.В. Квазиклассическая модель строения вещества // УФН. 2012. Вып. 182. № 5. С. 457–494.

УСТАНОВКА ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОВОДЯЩИХ ТУГОПЛАВКИХ ВЕЩЕСТВ В ОКРЕСТНОСТИ ИХ ТОЧКИ ПЛАВЛЕНИЯ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА

*Сенченко В.Н.¹, Беликов Р.С.^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН ²Московский физико-технический институт

*pyrolab@ihed.ras.ru

Рассматривается метод исследования теплофизических свойств веществ при высоких давлениях и температурах, основанный на быстром нагреве электрическим током. При скоростях нагрева $10^6 - 10^8$ К/с на созданной установке определяется комплекс теплофизических свойств тугоплавких веществ (например, карбидов тяжелых металлов, смесей карбидов и графита) в твердой и жидкой фазе: удельная энтальпия, удельная теплоемкость, удельное сопротивление, плотность, теплота плавления, изменение объема при плавлении, температура плавления.

Ключевые слова: теплофизические свойства, фазовые переходы, нагрев импульсом тока, оптическая пирометрия.

EXPERIMENTAL SETUP FOR INVESTIGATION OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF REFRACTORY MATERIALS NEAR THE MELTING POINT BY PULSE HEATING TECHNIQUE

Senchenko V.N.¹, Belikov R.S.^{1,2}

¹Joint Institute for High Temperatures RAS, ²Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

An experimental technique based on fast electrical heating for investigation of thermophysical properties of materials under high pressures and at high temperatures is considered. The developed setup allows to define the wide range of thermophysical properties of refractory materials (e.g. heavy-metal carbides, carbide-graphite mixes) such as specific enthalpy, specific heat capacity, specific resistivity, density, melting heat, volume changes during heating and melting temperature in solid and liquid phase with the heating speed of 10^6 - 10^8 K/s.

Keywords: thermophysical properties, phase transitions, pulse heating technique, optical pyrometry.

Введение

Метод исследования и созданная установка нацелены на получение сведений о свойствах тугоплавких карбидов тяжелых металлов (ниобия, молибдена, вольфрама, тантала), которые хорошо совместимы с карбидом урана и являются перспективными материалами для создания керамического ядерного топлива для высокотемпературных атомных реакторов нового поколения. Очевидно, что для решения актуальных задач создания нового реакторного топлива и задач безопасности необходима достоверная экспериментальная информация о жидких тугоплавких металлах и их карбидах при высоких температурах и давлениях. Сегодня литературные данные для тугоплавких карбидов в этой области температур практически отсутствуют. К примеру, свойства карбидов при высоких температурах, приведенные в справочных изданиях [1, 2], получены для температур, не превышающих 2500-3000 К, а для более высоких температур экстраполированы. Также следует отметить, что поведение таких веществ в области температур, близких к температуре плавления или превышающих ее, в настоящее время не изучено. Изменение состава (отклонение от стехиометрии) карбидов металлов при их нагреве до высоких температур вызывает дополнительные трудности. В частности, возникает необходимость проводить исследования таких веществ при высоком давлении окружающего газа. Одним из методов, подходящих для исследования карбидов, является метод быстрого объемно однородного нагрева проводников импульсом электрического тока [3, 4]. В настоящей работе описана новая установка, реализующая метод импульсного нагрева с выключением греющего тока для исследования свойств электропроводных материалов при температурах, близких к температуре плавления, изучения их поведения при фазовых переходах в условиях высокого давления буферного газа. Опробование новой экспериментальной установки и методики было выполнено на образцах из технически чистого тантала.

Описание метода и установки

На рис. 1 показана блок-схема экспериментальной установки, основными элементами которой являются: камера высокого давления, система высокого давления, высоковольтный импульсный источник тока, быстродействующий пирометр, система регистрации электрических величин и обработки данных.

Суть метода заключается в быстром нагреве образца до T_{nn} и выше за время от 50 мкс до единиц мс за счет объемного выделения тепла в образце при прохождении по нему электрического тока большой плотности. Нагрев осуществляется в изобарических условиях в камере высокого давления при статическом давлении буферного (инертного) газа. Введенная энергия или энтальпия H(t) может быть определена путем измерения импульса тока I(t) и падения напряжения e(t) между потенциальными зондами в средней части образца:

$$H(t) = \frac{1}{m} \left\{ \int_{0}^{t} \left[I(t)e(t) - \varepsilon_{T}\sigma S(T(t)^{4} - T_{0}^{4}) - q_{\Sigma} \right] dt + H_{0} \right\},$$
(1)

где ε_T – интегральная излучательная способность материала образца, σ – постоянная Стефана – Больцмана, S – площадь поверхности образца, заключенной между потенциальными зондами, m – масса части образца, заключенной между потенциальными зондами, H_0 – начальная энтальпия образца, T_0 – температура окружающей образец среды, q_{Σ} – мощность тепловых потерь за счет теплопроводности в узлы крепления образца и теплоотдачи в буферный газ. Таким образом, измеряя температуру поверхности образца во время эксперимента T(t), ток I(t) и напряжение e(t), можно определить зависимость $H_P(T)$ и $C_P(T)$ путем дифференцирования выражения (1).



Рис. 1. Схема установки с нагревом образца импульсом электрического тока в условиях высокого статического давления буферного газа

При высоком темпе ввода энергии 10⁶–10⁸ К/с потери тепла за счет излучения составляют не более нескольких десятых процента, и их можно учесть при расчете энтальпии и теплоемкости. Согласно оценке, потери за счет теплопроводности в элементы крепления и теплоотдачи в буферный газ составляют менее 0.1 %, т.е. их величина лежит за пределами погрешности измерений, и поэтому они не принимаются в расчет.

Камера высокого давления (КВД). Общий вид камеры с трансформатором тока показан на рис. 2. КВД рассчитана на работу при давлениях газа до 7000 бар. В камере предусмотрен специальный электроввод, обеспечивающий подвод греющего тока к образцу и вывод сигнала с двух потенциальных зондов. Четыре световых окна, расположенные под углом 90° друг относительно друга, обеспечивают возможность проведения различной оптической диагностики: измерения температуры образца, скоростной фотографии и теневой регистрации размеров. Окна КВД изготовлены из искусственного сапфира, имеют диаметр 10 и толщину 8 мм. Электроввод, уплотненный по принципу «обращенного конуса», представляет собой коаксиальную систему, состоящую из центрального стального стержня и четырех слоев ZrO₂ толщиной 0.5 мм и меди толщиной 0.25 мм. Центральный стержень служит для подвода импульса тока, а два коаксиальных медных слоя – для вывода сигнала с потенциальных зондов. Камера подключается к системе высокого давления при помощи толстостенной трубки из нержавеющей стали, рассчитанной на давление до 7000 бар. Высоковольтный импульсный источник тока. Источник тока емкостного типа представляет собой конденсаторную батарею с максимальной запасаемой энергией 120 кДж и рабочим напряжением 5 кВ, управляемый игнитронами ИРТ-3. Максимальный разрядный ток источника составляет 25 кА. Напряжение на батарее конденсаторов может быть выбрано в пределах 500–5000 В. Для формирования формы импульса тока, близкой к прямоугольной в разрядную цепь последовательно с образцом включено регулируемое сопротивление R_{per}, представляющее, собой набор малоиндуктивных сопротивлений, а дополнительная цепь RL_{per}, включенная последовательно, формирует фронт импульса тока длительностью в пределах 20–250 мкс.



Рис. 2. Камера высокого давления, смонтированная на установке

Система высокого давления. Для создания высокого давления инертных газов используется газовая система, состоящая из мембранного компрессора модели 46-14060-2 фирмы Newport Scientific Inc с коэффициентом сжатия 1:14, поршневого воздушного компрессора, необходимого для работы мембранного компрессора, толстостенных соединительных трубок, рассчитанных на давление 7000 бар. Для измерения давления в системе используется прецизионный датчик давления 1-P3MB-2000 фирмы HBM с классом точности 0,1.

Пирометр с микросекундным быстродействием. Ключевую роль при реализации метода играет надежное измерение температуры образца. Прямое измерение температуры образца пирометром через инертный газ позволяет использовать весь арсенал современных методов оптической пирометрии, что затруднительно при использовании капилляров или непрозрачной промежуточной среды. Однако изменение температуры в широкой области 2000–7000 К, малые размеры образцов (диаметр/ширина ~1 мм) и большие темпы нагрева (более 10^6-10^8 K/c) осложняют измерения температуры и не позволяют использовать типовые пирометры, представленные на рынке. Поэтому возникает необходимость разработки методики измерения температуры и создания специального многоканального оптического микропирометра, подходящего для измерений в таких условиях. Авторами был разработан новый быстродействующий пирометр, обеспечивающий измерение температуры в указанной области при скоростях нагрева образов dT/dt до 10^8 K/c и обладающий погрешностью измерений и чувствительностью на уровне стационарных пирометров. В табл. 1 приведены технические характеристики пирометра.

Таблица 1

Технические характеристики пирометра

Диапазон измеряемых яркостных температур	2000–7000 K
Число яркостных каналов пирометра	2
Эффективная длина волны 1 канала	0.65 мкм
2 канала	0.90 мкм
Инструментальная погрешность измерения яркостной температуры в процентах от из-	± 0,2 %
меряемого значения	
Диаметр площадки визирования на объекте, d (L = 150 мм)	0.5 мм
Время установления выходного напряжения до 0.1 % (T>2200K)	6 мкс

Пирометр содержит общий оптический тракт и два идентичных электронных канала для каждой длины волны ($\lambda_1 = 0,65$ мкм, $\lambda_2 = 0,90$ мкм). Особенностью пирометра является широкий диапазон рабочих температур 2000–7000 К, в котором интенсивность излучения изменяется примерно в сотни раз ($\lambda_1 = 0,65$ мкм). Для регистрации сигнала с таким большим динамическим диапазоном при сохранении высокой точности измерения необходимо либо производить переключение диапазонов измерения во время регистрации, либо уменьшить динамический диапазон сигнала. Для сжатия динамического диапазона сигнала в пирометре применен быстродействующий прецизионный логарифмический усилитель (ЛУ), что позволяет проводить измерения температуры в одном диапазоне, без переключений. Естественно, что для обеспечения стабильности и воспроизводимости измерений электронный канал должен иметь хорошую температурную и долговременную стабильность. В пирометре для обеспечения температурной стабильности фотодиоды и ЛУ были установлены в термостатированном корпусе. Температура корпуса поддерживается постоянной с погрешностью, не превышающей ±0,1 К.



На рис. 4 показаны результаты калибровки пирометра по пирометрической лампе и приведена погрешность калибровки пирометра.



Рис. 4. Результаты проверки быстродействия пирометра и погрешность калибровки по пирометрической лампе

Измерения

Одним из важных узлов установки является система формирования мощного импульса тока с возможностью выключения, в том числе и в реальном времени по сигналу от внешнего устройства. Испытания показали, что система позволяет формировать импульсы тока величиной 10–15 кА и длительностью от 50 до 1000 мкс без возникновения периодических колебаний на нагрузках от 0.1 Ом до 5 мОм. На рис. 5*а* показана форма импульса тока длительностью ~ 50 мкс на активной нагрузке 0.1 Ом. Из рисунка видно отсутствие каких-либо выбросов при включении и выключении тока. Погрешность измерений тока определяется характеристиками трансформатора тока и не превышает 0.5 %.

На этапе тестирования установки использовались образцы в виде прямоугольного параллелепипеда с размерами 0.3x1.0x12 мм, вырезанные из листового технически чистого тантала Та. Опыты проводились в камере высокого давления (КВД), заполненной инертным газом (Аг) при давлении ~150 бар. Была проведена серия экспериментов и определены режимы нагрева образцов из технически чистого тантала до температур более 5000 К. Получены первые экспериментальные данные по температуре в экспериментах длительностью порядка 50–200 мкс и скоростях нагрева до 10⁸ К/с. Экспериментальная термограмма с минимально достижимым временем нагрева для танталового образца сечением 0.8х0.3 мм показана на рис. 5*6*.



Рис. 5: *а*) Форма импульса тока длительностью ~ 50 мкс на нагрузке 0.1 Ом, *б*) Температура образца из тантала, измеренная в эксперименте

При расчете истинной температуры образца использовались литературные данные [1, 5]. Измеренная температура плавления тантала составила 3295±50К. Такой результат хорошо согласуется с литературными данными, в частности [6].

Выводы

Предварительные эксперименты на новой установке с нагревом образца током длительностью 50–1000 мкс показали пригодность оборудования и метода для исследования теплофизических свойств тугоплавких веществ в области высоких температур 2000–7000 К в условиях высокого статического давления буферного газа, обеспечивающего прямое измерение температуры образца. Благодаря широкому диапазону регулирования скорости нагрева (тока), установка позволяет работать с различными электропроводящими материалами: металлами, карбидами, графитами.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-08-00925 – (08-202) – а.

Литература

1. Мармер Э.Н., Гурвич О.С., Мальцева Л.Ф. Высокотемпературные материалы. М.: Металлургия, 1967. 215 с.

2. Котельников Р.Б. и др. Особо тугоплавкие элементы и соединения: справ. пособие. М.: Металлургия, 1969. 376 с.

3. Baitin A.V., Lebedev A.A., Romanenko S.V., Senchenko V.N., Sheindlin M.A. The melting point and optical properties of solid and liquid carbon at pressures of up to 2 kbar // High Temperatures – High Pressures. 1990. V. 21. P. 157–170.

4. Boivineau V., Pottlacher G. Thermophysical properties of metals at very high temperatures obtained by dynamic heating techniques: recent advances // Int. J. Materials and Product Technology. 2006. V. 26. Nos. 3/4. P. 217–246.

5. Pottlacher G., Seifter A. Microsecond laser polarimetry for emissivity measurements on liquid metals at high temperatures – application to tantalum // International Journal of Thermophysics. 2002. V. 23. N 5. P. 1281–1291.

6. Глушко В.П., Гурвич Л.В. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т.4. Ч. 2. М.: Наука, 1982. 560 с.

ИЗМЕРЕНИЕ 2D ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В НАУЧНЫХ И ПРОМЫШЛЕННЫХ ПРИМЕНЕНИЯХ

*Сенченко В.Н., Капустин Д.И.

Объединенный институт высоких температур РАН

*pyrolab@ihed.ras.ru

Рассматриваются методы измерения температурных полей и их приборная реализация для различных прикладных применений. Так, в работе описаны две оригинальные системы для измерения 2D температурных полей: первая (инфракрасная система) предназначена для измерения температурных полей в микроэлектронике, а вторая (высокоскоростная система) предназначена для измерения температурных полей в высокотемпературных гетерогенных плазменных потоках.

Ключевые слова: температурные поля, оптическая пирометрия, оптические свойства, высокотемпературные гетерогенные потоки.

MEASUREMENT OF 2D TEMPERATURE FIELDS IN SCIENTIFIC AND INDUSTRIAL APPLICATIONS

Senchenko V.N., Kapustin D.I.

Joint Institute for High Temperatures RAS

Experimental methods of temperature field measurements and their instrument implementation for various applications are described. Two original systems for measurement 2D temperature fields are presented, the first IR system is intended for measurement of temperature in microelectronic, and the second high-speed system is intended for measurement of temperature fields in high-temperature heterogeneous plasma flows.

Keywords: temperature fields, optical pyrometry, optical properties, high-temperature heterogeneous jets.

Введение

Трудно назвать область техники или технической физики, где бы не требовалось измерять температуру твердых, жидких или газообразных веществ. В частности, современная экспериментальная теплофизика исследует различные процессы теплового воздействия на вещество, и поэтому в теплофизическом эксперименте измерение температуры выходит на первое место. В современной промышленности и энергетике также внедряется большое количество новых тепловых процессов,протекающих в экстремальных условиях при высоких температурах, например: сжигание углеводородного топлива в авиационных двигателях, теплообмен в ядерных реакторах, плазменное термическое напыление, лазерная сварка, лазерная резка и т.д. Как правило, эти процессы характеризуются трехмерным распределением температуры, которое определяет происходящие тепловые процессы и связанные с ними величины (термические напряжения, изменение размеров и т.д.). Поэтому в указанных приложениях существует необходимость в измерении температурных полей: к примеру, в микроэлектронике при контроле тепловых сопротивлений интегральных микросхем необходимо измерять 2D температурные поля для определения наиболее нагретой зоны кристалла микросхемы [1].

Необходимо отметить, что сегодня существует необходимость в создании измерительной системы, позволяющей исследовать бесконтактным способом динамические процессы горения и механизмы образования NO_x, CO, дыма на выходе камер сгорания авиационных двигателей. Такие измерения необходимы для проверки расчетных моделей физико-химических процессов, происходящих в камерах сгорания и для оптимизации проектируемых двигателей нового поколения. Одной из ключевых является задача регистрации 2D полей температуры бесконтактным способом в заданном сечении на выходе из камеры сгорания.

В работе описаны две оригинальные системы для измерения температурных полей: первая (инфракрасная система) предназначена для измерения 2D температурных полей в микроэлектронике, а вторая (высокоскоростная система) предназначена для измерения температурных полей в высокотемпературных гетерогенных газовых потоках. Разработанная инфракрасная система измерения 2D температурных полей интегральных микросхем имеет следующие характеристики: диапазон измеряемых температур 30–150 °С, пространственное разрешение 18 мкм, разрешение ± 0.2 °С, инструментальная погрешность ± 0.5 °С, спектральный диапазон 8.0–12.0 мкм, время измерения 0,6 с.

Вторая система высокоскоростной диагностики 2D поля температуры позволяет регистрировать температуру частиц в гетерогенных потоках. Система имеет следующие характеристики: диапазон измеряемых температур 1000–3500 °C, диапазон измеряемых скоростей 10–600 м/с, минимальный размер регистрируемых частиц 10 мкм, рабочее расстояние 120–300 мм, инструментальная погрешность ±1 %, время измерения составляет 3–100 мкс.

Инфракрасная система для измерения 2D полей температуры кристаллов интегральных микросхем

Принцип работы. Инфракрасная пирометрическая система для измерения 2D распределения температуры поверхности кристаллов микросхем с микронным разрешением разработана на базе микроболометрической матрицы. Принцип измерения температуры основывается на выделении части спектра теплового излучения из всего потока тепловой энергии, испускаемой нагретым телом, с помощью спектральных фильтров, и преобразовании этого излучения в электрический сигнал с помощью микроболометрической матрицы на аморфном кремнии, которая имеет максимум чувствительности в ИК-диапазоне спектра 7–14 мкм. Аналоговый сигнал с матрицы после усиления поступает на 16-битный аналого-цифровой преобразователь – и далее, после коррекции чувствительности и замены плохих пикселей, цифровой код передается через USB-интерфейс в ПК. Затем рассчитываются соответствующие 2D поля температуры согласно калибровке на модели АЧТ.

Измерение температуры и перенос температурной шкалы. Фотоприемник регистрирует сигнал, пропорциональный интенсивности теплового излучения, который можно рассчитать путем интегрирования мощности излучения в пределах телесного угла ω и в интервале длин волн $\lambda_1 - \lambda_2$ с учетом геометрического фактора оптической системы прибора. Интервал длин волн определяется фильтрами, диапазоном спектральной чувствительности микроболометрической матрицы, оптическими свойствами промежуточной среды и измеряемого объекта. Очевидно, что в процессе измерений телесный угол остается постоянным, поэтому, если пренебречь эффектами второго порядка малости, такими как зависимость индикатрисы излучения объекта от температуры, то интеграл по ω войдет в коэффициент преобразования *К*. Выражение для расчета сигнала, измеряемого ИК-приемником, можно записать в виде:

$$U(T) = K \cdot \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \varepsilon_{\lambda,T} \cdot C_1 \cdot \lambda^{-5} \cdot \left(e^{\frac{C_2}{\lambda \cdot T}} - 1 \right)^{-1} d\lambda = K \cdot \varepsilon_{\lambda_1 - \lambda_2,T} \cdot \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} C_1 \cdot \lambda^{-5} \cdot \left(e^{\frac{C_2}{\lambda \cdot T}} - 1 \right)^{-1} d\lambda , \quad (1)$$

где K – коэффициент преобразования системы, ${}^{\mathcal{E}} \lambda$.Т – излучательная способность, $\overline{\mathcal{E}}_{\lambda_1 - \lambda_2, T}$ – эффективная излучательная способность, C_1 – первая постоянная излучения. Уравнение калибровки системы можно записать в виде:

$$1/T_{map.} = \sum_{n} A_n \cdot f(U)^n, \qquad (2)$$

где Т_{пир.} – температура, измеряемая системой, *n* = 3, *A_n* – коэффициенты находятся методом наименьших квадратов (МНК) во время калибровки по эталонной модели АЧТ.

При измерении температуры реальных тел необходимо вносить поправку на излучательную способность, т.е. необходимо знать $\overline{E}\lambda_1 - \lambda_2 T$. При расчете излучательной способности решается уравнение (2) относительно $T_{\text{пир.}}$ и затем для найденного значения U при заданной температуре объекта T_0 рассчитывается $\overline{E}\lambda_1 - \lambda_2 T$. Затем можно измерять истинную температуру объекта в интервале температур, к примеру, $\pm (20-30)$ °C от температуры T_0 , в которой была определено значение $\overline{E}\lambda_1 - \lambda_2 T$. Это связано с тем, что излучательная способность кристалла микросхемы в ИК-диапазоне изменяется, как правило, незначительно. К примеру, черная акриловая краска, которая используется при испытании микросхем, имеет излучательную способность $\varepsilon \approx 0.8$, которая изменяется на 0.04 в диапазоне температур 40–120 °C [1]. Это вносит дополнительную ошибку в определении температуры менее 1.0 °C в диапазоне 40–120 °C.

Технические характеристики и конструкция. Изображение объекта формируется в плоскости микроболометрической матрицы с помощью специального инфракрасного объектива с асферическим оптическим элементом. Увеличение объектива составляет ≈ 1.7 раза, что обеспечивает пространственное разрешение 18 мкм. Измеряемый сигнал от микроболометрической матрицы в значительной степени зависит от температуры матрицы и от фоновой температуры. Поэтому при разработке системы был создан термостат для матрицы. Матрица была демонтирована из штатного корпуса и помещена на медную пластину, которая служила теплоотводом. На другом конце был установлен термохолодильник. Узел с матрицей и датчиком температуры был теплоизолирован. Путем регулирования температуры холодного 28

спая термохолодильника по сигналу от датчика температуры осуществлялась регулировка термостата. Разработанный прецизионный широтно-импульсный регулятор поддерживал температуру матрицы на уровне 16±0.01 °C.

Технические характеристики и калибровка системы. Разработанная инфракрасная система для измерения 2D полей температуры обеспечивает характеристики, приведенные в табл. 1.

Таблица 1

Технические характеристики инфракрасной системы

Диапазон измеряемых температур, °С	35–150
Погрешность измерения (на модели АЧТ), не более °С	± 0.5
Разрешение измерений температуры, °С	± 0.2
Пространственное разрешение, мкм	18
Размер поля визирования составляет, мм	5.76×4.32
Рабочее расстояние до объекта, мм	12.7 ± 0.5
Ширина спектрального интервала, Δλ мкм	8.0-12.0
Время измерения поля температуры, не более сек	0.6
Размер измерительного блока, мм	200×82×74

Калибровка системы выполняется в интервале температур 35–150 °С с шагом порядка 10 °С по эталонному АЧТ с апертурой не менее 38 мм. Затем рассчитываются калибровочные коэффициенты и записываются в файл. Погрешность калибровки не превышает ± 0.5 °С в указанном диапазоне температур.

Результаты измерений 2D полей температуры кристаллов интегральных микросхем. Система предназначена для измерения 2D полей температуры микросхем в режиме измерения относительного приращения температуры при изменении режимов работы испытываемой микросхемы.



X=91;Y=180;

Рис. 1. Разностное поле температур, измеренное при испытании микросхемы

Такие измерения проводятся в два этапа. На первом этапе измеряется поле температуры микросхемы, которая закреплена на изотермическом радиаторе, и на микросхему не подается напряжение питания. Поэтому при отсутствии источников тепловыделения можно считать, что поле температур микросхемы однородно, причем температуру микросхемы можно приравнять к температуре радиатора [1]. В этом предположении можно рассчитать поле излучательной способности в каждой точке объекта и использовать эти данные на втором этапе для измерений. На втором этапе измерений на микросхему подается напряжение питания и измеряется поле температуры приращения с учетом излучательной способности измеренной на первом этапе. На рис. 1 показано разностное поле температур, измеренное при испытании микросхемы при подаче напряжения питания, мощность потребления составляла P_{эд}=1.16 Вт.

Из рис. 1 видно, что кристалл нагрет неравномерно, около контактных площадок подвода питания и размещения защитных диодов тепловыделение максимально и приращение температуры составляет 6.0–7.4 °С. В центре и на максимальном удалении приращение составляет 4.0 °С и 3.2 °С соответственно. На этом рисунке для примера показаны результаты измерений перегрева кристалла микросхемы без черного покрытия, используемого для увеличения излучательной способности. Излучательная способность в точке с координатами X=91, Y= 180 составляла 0.258, а измеренная величина ΔT хорошо согласуется с измерениями в соседних точках, имеющих излучательную способность 0.4–0.5.

Система регистрации 2D полей температуры в высокотемпературных гетерогенных потоках

Гетерогенные плазменные потоки широко используются для нагрева частиц и плазменного напыления покрытий. Плазменное напыление – наукоемкая технология, сочетающая в себе сложные физические процессы: получение низкотемпературной плазмы в плазмотроне, нагрев и ускорение частиц в плазменной струе, а также взаимодействие частиц с поверхностью образца, на который наносится покрытие [4–5]. Высокая плотность теплового потока, подводимого от плазмы к частицам (10^7-10^9 BT/м²), позволяет использовать для напыления частицы из материалов с различными теплофизическими свойствами и обеспечивать высокую производительность процесса напыления [6]. Однако в настоящее время зависимость между параметрами установок для плазменного напыления, такими как сила тока дуги плазмотрона, способ подачи порошка в плазменную струю, расход плазмообразующего и транспортирующего газа и др., и свойствами получаемого покрытия изучена недостаточно. Наиболее важными параметрами процесса плазменного напыления являются распределение температуры и скорость напыляемых частиц. Система высокоскоростной регистрации 2D полей температуры позволяет изучать распределение температуры и скорость частиц, движущихся в плазменной струе.

Наиболее перспективными для решения поставленной задачи являются методы анализа цифровых изображений частиц. К примеру, сегодня получили распространение различные PIV-методы. Однако эти методы не подходят для автоматического обнаружения треков нагретых частиц, поэтому для этой цели были разработаны оригинальный метод и соответствующее программное обеспечение. Разработанный алгоритм и система позволяют контролировать температуру, скорость, размеры отдельной частицы, а статистически усредненные величины возможно использовать для контроля и управления процессом. Регистрация изображений производится цифровой измерительной ИК-камерой, которая обеспечивает необходимое быстродействие (3–50 мкс) и другие метрологические характеристики. Алгоритм автоматического распознавания следа частиц по 12-битовым серым изображениям, полученным скоростной фотосъемкой потока частиц, позволяет определить основные характеристики движущихся частиц:

- длину следа частиц;
- максимальную интенсивность по длине следа частицы;
- поперечный размер следа частиц с учетом угла следа;
- угол наклона следа частиц относительно границ изображения.
- Алгоритм процесса обработки включает в себя три основных этапа:

• этап предобработки исходного изображения – подавление высокочастотных шумов на исходном изображении;

• этап выделения следа частиц – определение точек, принадлежащих следу частицы, и формирование результирующего следа;

• этап определения требуемых характеристик следа частицы.

Технические характеристики и конструкция системы регистрации. В системе используется специальная ПЗС-камера с коротким временем экспозиции (3–50 мкс), которое наряду с увеличением объектива определяет максимальную скорость частиц, которые сможет зарегистрировать система. В качестве фотоприемника в камере используется ПЗС-матрица, изготовленная по технологии ExView, которая обеспечивает высокую чувствительность в ИК-области спектра. Встроенный АЦП обеспечивает низкий уровень шума, не более 8е⁻ электронов на пиксель для серых изображений с разрядностью 12 бит.



Рис. 2. Система для регистрации 2D полей температуры, размещенная на стенде с плазмотроном

Поэлементное оцифровывание сигналов ПЗС-матрицы дает интенсивность излучения в каждом пикселе, которая используются для определения температуры, скорости и диаметра частицы. Внешний вид измерительной ПЗС-камеры показан на рис. 2. Объектив системы работает с увеличением M_0 = 0.25–0.5 и позволяет визировать область плазменной струи размером до 35×25×20 мм (ширина × высота × глубина). В оптическом тракте системы размещается интерференционный фильтр с максимумом в пределах $\lambda_{max} = 750-950$ нм и полосой пропускания $\Delta\lambda_{0.5}$ от 15 до 100 нм.

Выбор длины волны фильтра с максимумом пропускания в пределах указанного диапазона практически исключает засветку от излучения плазмы в коротковолновой части спектра и позволяет выполнять измерения в непосредственной близости от плазматрона.

Камера регистрирует треки светящихся частиц при коротких временах экспозиции и позволяют использовать разработанный алгоритм для измерения яркостной температуры, скорости и размеров отдельной частицы. Температура определяется по средней интенсивности излучения трека, которая измеряется в узком спектральном интервале, определяемом интерференционным фильтром. Диапазон измеряемых скоростей лежит в пределах 10–600 м/с, минимальный регистрируемый размер частицы составляет 10 мкм. В табл. 2 приведены технические характеристики системы.

Таблица 2

Технические характеристики системы для регистрации 2D полей температуры

Диапазон измеряемых температур. °С	1000-3500
Разрешение измерений, °С	± 5
Минимальный размер частиц, мкм	10
Диапазон измеряемых скоростей, м/с	10–600
Рабочая длина волны Л _Р , нм (определяется фильтрами)	600–1000
Инструментальная ошибка измерения температуры, %	± 1
Рабочее расстояние L, мм	150-300
Время измерения (экспозиции), мкс	3–1000
Размер измерительного блока, мм	200×82×74

Результаты измерений температуры частиц в плазменной струе. Алгоритм автоматического распознавания следа частиц позволяет определить основные характеристики частиц в потоке:

- длину следа частиц;
- максимальную интенсивность по длине следа частицы;
- поперечный размер следа частиц с учетом угла.

Если в дополнение к этим характеристикам известны время экспозиции τ , коэффициент увеличения объектива M_o , и выполнена калибровка абсолютной чувствительности камеры по модели АЧТ, то в результате можно определить яркостную температуру частицы T_s , скорость V и поперечный размер d. Для расчета скорости, размеров и температуры частиц используются следующие выражения:

скорость частицы	$V_i = \frac{L_i \delta}{\tau I_{i, \text{ M/C}}}$
средняя скорость частиц в потоке	$\overline{V} = \frac{\sum_{i=1}^{N} V_i}{N},$
размер частицы	$d_i = W \frac{\delta}{I_{i, MKM}}$
температура частицы	$T = \left(a_1 + b_1 ln \left(\frac{I_0}{Int} \times e \times \tau_{eff}\right)\right)^1, K$

где l_i – длина трека в пикселях, τ – время экспозиции, δ – размер пикселя, $\xi = \delta/M_o$ – масштабный коэффициент, $\tau_{eff} = k_l \times V_i/W_i$, k_l – коэффициент, определяемый при геометрической калибровке, W_i – ширина трека в пикселях a_l , b_l , I_0 – коэффициенты, определяемые при калибровке, Int – интенсивность излучения трека, ε – спектральная излучательная способность материала частицы в максимуме пропускания интерференционного фильтра.

Погрешность измерений зависит от увеличения объектива, размера и скорости частиц и ряда других параметров. К примеру, при оптимальном выборе времени экспозиции и увеличения треки имеют длину порядка 100–250 пикселей, а ширину 2–5 пикселей. При разрешении алгоритма 0.1–0.2 пикселя погрешность измерения ширины составит \pm 2–5%, а скорости – не более \pm 0.5–1%. Инструментальная погрешность измерения яркостной температуры не превышала \pm 1.5%.

Для проверки работоспособности методики были проведены эксперименты на оборудовании для плазменного термического напыления в ОИВТ РАН. Были проведены эксперименты по измерению температуры частиц на разном расстоянии от сопла плазматрона. Результаты расчёта температуры частиц из оксида алюминия диаметром 40 мкм [7], а также температура частиц, определенная экспериментально, представлены на рис. 3.



Рис. 3. Расчетные и экспериментальные значения температуры частиц Al₂O₃. Диаметр частиц – 40 мкм, сила тока дуги 300 A, напряжение дуги – 75 B, расход плазмообразующего газа – 3 г/с

По данным рис. З видно, что температура частиц, определенная экспериментально, близка к среднемассовой температуре частицы в точке с координатой y = 140 мм. Согласно расчетным данным, на участке траектории y=100 - 160 мм частица достигает температуры плавления. Заметим, что на этом участке перепад температуры по радиусу частицы незначителен [7]. На рис. 4 показано окно программы системы в режиме измерения суммарной интенсивности излучения плазменной струи с частицами из Al_2O_3 по радиусу. Видно, что интенсивность свечения плазменной струи по радиусу имеет профиль с небольшой асимметрией, что позволяет сделать заключение, что для регистрации полей температур достаточно выполнить измерения в одной проекции.



Рис. 4. Распределение интегральной интенсивности излучения плазменной струи по радиусу

Выводы

1. Создана и испытана инфракрасная система для измерения 2D полей температуры кристаллов интегральных микросхем на базе тепловизионной микроболометрической матрицы. Система позволяет регистрировать 2D поля температуры в диапазоне 35–150 °C, измерять излучательную способность и разностное поле температур. Поле разности температур кристалла микросхемы в рабочем режиме и в обесточенном состоянии используется для расчета максимального теплового сопротивления «кристалл – корпус» при производстве микросхем. В ходе работы была решена проблема стабильности измерений и влияния теплового фона при продолжительных измерениях.

Испытания системы показали, что система позволяет измерять перепады температур менее ~1 °C, а также обнаруживать дефекты, возникающие из-за механических напряжений при монтаже кристаллов в корпус, которые проявляются в локальных перегревах поверхности микросхемы.

2. Созданы методика и измерительная система для диагностики 2D полей температуры и скорости частиц (оксидов и металлов) при их нагреве в высокотемпературной плазменной струе. Экспериментально определены средние значения температуры и скорости, а также изменение скорости частиц вдоль оси струи при различных режимах работы плазмотрона. Эти данные позволяют выбрать режим, когда средняя температура частиц близка к температуре плавления, а поля температуры и скоростей частиц являются достаточно однородными.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №11-08-12117-офи-м-2011.

Библиография

1. Закс Д.И. Параметры теплового режима полупроводниковых микросхем. М.: Радио и связь, 1983. 128 с.

2. Лефевр А. Процессы в камерах сгорания ГТД. М.: Мир, 1986. 566 с.

3. Абрашкин В.Ю. Исследование полей температуры газа на выходе из камер сгорания малоразмерных ГТД // Известия Самарского научного центра РАН. 2006. Т. 8, № 4. С. 1136–1141.

4. Ильющенко А.Ф., Кундас С.П., Достанко А.П. и др. Процессы плазменного нанесения покрытий: теория и практика. Минск: Армита-Маркетинг, Менеджмент, 1999, 544 с.

5. Fauchais P. and Vardelle M. Sensors in spray processes // J. Therm. Spray Tech. 2010. V. 19. No. 4. P. 668–694.

6. Fauchais P., Montavon G. Plasma spraying: from plasma generation to coating structure // Advances in Heat Transfer. 2007. V. 40. P. 205–344.

7. Домбровский Л.А., Исакаев Э.Х., Сенченко В.Н., Чиннов В.Ф., Щербаков В.В. Эффективность ускорения, нагрева и плавления частиц в высокоэнтальпийных плазменных струях // ТВТ. 2012. Т. 50, № 2. С. 163–171.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИХРЕВЫХ КАСКАДОВ ДЛЯ СДВИГОВОГО СЛОЯ

Фортова С.В.

Институт автоматизации проектирования РАН

fortova@icad.org.ru

На основе численного моделирования исследуется задача о сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды. Изучается влияние размера расчетной области и начальных условий на возникновение каскада неустойчивостей и переход течения в турбулентное. Показано, что при переходе течения в турбулентную стадию возникает вихревой каскад, который соответствует развитию каскада вихрей в энергетическом и далее – инерционном интервалах.

Ключевые слова: математическое моделирование, сдвиговые слои, энергетический каскад.

NUMERICAL SIMULATION OF THE EDDY CASCADES IN SHEAR LAYER

Fortova S.V.

Institute for Computer Aided Design RAS

The initial stage of turbulence development via hydrodynamic instabilities, the formation of vortices and their mixing is investigated in a compressible inviscid shear flow. Direct numerical simulation showed that the transition to chaos occurs through an eddy cascade of instabilities, which corresponds to the Richardson–Kolmogorov–Obukhov energy cascade. The critical sizes of the computational domains and the boundary conditions required for turbulent motion to develop are determined.

Keywords: mathematical simulation, shear layers, energy cascade.

Введение

Большинство задач механики сплошных сред включают в себя стадию турбулентного движения. К таким задачам можно отнести ударно-волновые эксперименты, струйные течения в следе за движущимся телом, взрыв сверхновых в астрофизике, течения крови в медицине. Несмотря на многообразие турбулентных течений в природе, они все еще остаются наименее изученными и являются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Для анализа структуры и развития турбулентного движения большое значение имеет исследование процессов, связывающих зарождение турбулентности и переход к стадии развитого масштабного турбулентного течения.

В 1920 году Ричардсоном [1] была предложена концепция энергетического каскада, основанная на идее измельчения вихревой структуры турбулентности до масштабов теплового движения молекул. Спустя 20 лет она нашла свое отражение в работах Колмогорова и Обухова [2, 3], что привело к теперь хорошо известной спектральной структуре энергетического каскада: при достаточно больших числах Рейнольдса распределение плотности энергии пульсаций по волновым числам разбивается на ближний интервал малых чисел (энергетический), где энергия генерируется в основном неустойчивостями крупных вихрей, дальний интервал больших чисел (вязкий), где энергия диссипирует в тепло через мелкомасштабные пульсации, и расположенный между ними инерционный интервал спектра, где энергия не генерируется и не диссипирует, а передается от меньших волновых чисел к большим [2]. Согласно [2], этот обмен слабо зависит от неустойчивости крупномасштабного течения и числа Рейнольдса, определяемого исходным течением. Реализующим его физическим процессом служит потеря устойчивости последовательно формирующимся основным течением и возникновение нового поля скоростей с более мелкой вихревой структурой.

В настоящей работе предложенный сценарий развития турбулентности Ричардсона – Колмогорова – Обухова рассмотрен на примере задачи о сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды.

Для сдвиговых слоев из-за наличия больших градиентов скоростей влияние вязкости и стенок на общие характеристики макроструктур течения практически несущественно. Это позволяет не учитывать эффекты вязкости и исследовать динамику течения на базе моделей идеальной среды, а именно – уравнений Эйлера.

Течения, рассматриваемые в настоящей работе, соответствуют энергетическому и инерционному интервалам энергетического спектра. Для расчета течений в вязком интервале, где энергия диссипирует в тепло через мелкомасштабные пульсации, необходимо использовать модели, учитывающие вязкость и описываемые уравнениями Навье – Стокса [4].

В настоящей работе показано, что развитие турбулентности происходит в случае, когда инерционные члены в уравнениях начинают преобладать над напряжениями, обусловленными вязкостью, пара сил, возникающая из поля давления, создает крупную структуру и в течении появляются вихри. Дальнейшее развитие течения заключается в эволюции крупных вихрей и в генерации ими высокочастотной части спектра. Основной задачей при этом является изучение общей динамики и природы развития турбулентного течения через вихревой каскад неустойчивостей.

Существуют различные подходы к исследованию вихревых каскадов. В работе [5] на основе численного решения уравнений Навье – Стокса предложено развитие турбулентности в сдвиговом слое с учетом вязкости. Однако, как показали расчеты, ее влияние при формировании вихревого движения несущественно. В работах [6, 7] изучен переход к турбулентности для трехмерного плоского слоя смешения через неустойчивость Кельвина – Гельмгольца. К 2005 году на основе решения уравнений идеальной среды, т.е. без учета влияния вязких эффектов, были получены вихревые каскады сдвиговой неустойчивости для течения при большом градиенте сдвиговой скорости и случайном поле скоростей в узкой полосе возмущений в начальный момент времени [8]. В работе [9] авторам удалось получить аналогичное турбулентное течение (с бесконечным набором волновых чисел) при условиях уже детерминированного возмущений, приводящим к неустойчивостям, в данном случае служат только начальные значения, задача была «очищена» от хаотичности.

В настоящей работе на основании численных экспериментов изучено турбулентное движение на примере сдвигового слоя и проанализирована схема формирования турбулентного ядра. Она основана на каскаде неустойчивостей, которые появляются в виде более мелких вихревых колец, возникающих на более крупном вихревом кольце предыдущей неустойчивости.

Ввиду чрезвычайной сложности и нелинейности турбулентных течений адекватным инструментом их изучения является численное моделирование [4]. Для расчетов использовались монотонные диссипативноустойчивые разностные схемы с положительным оператором, хорошо себя зарекомендовавшие для расчета крупномасштабных течений. Эти схемы имеют второй порядок точности на гладких решениях и, являясь монотонными, не используют ни искусственную вязкость, ни сглаживание, ни процедуры ограничения потока, часто использующиеся в современных схемах вычислительной динамики жидкости.

В представленной работе численное моделирование было выполнено на основе технологии параллельного программирования MPI с использованием указанной разностной схемы на вычислительных сетках до 1 млн ячеек.

Математическая модель и численная методика

Для численного исследования используется модель сжимаемого невязкого газа. Исходной для построения численных схем расчета является полная система уравнений Эйлера, записанная в декартовых координатах в дивергентной форме [13]. Это уравнения для плотности среды:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{V}) = 0,$$

уравнения для трех компонент плотности импульса

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{V}) = -\frac{\partial P}{\partial x},$$
$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{V}) = -\frac{\partial P}{\partial y},$$
$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w \mathbf{V}) = -\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g,$$

и уравнение для плотности полной энергии:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P)\mathbf{V}) = -\rho g w$$

Здесь *t* – время, (x, y, z) – координаты; $\mathbf{V} = (u, v, w)$ – вектор скорости; ρ – плотность; g – сила тяжести; $E = e + \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}/2$ – удельная полная энергия и *e* – удельная внутренняя энергия. Для замыкания системы уравнений требуется уравнение состояния. В данной работе используется уравнение состояния идеального газа $\mathbf{P} = (y + 1)\rho e$.

Все вычисления выполнены в системе измерения СИ.

При численном моделировании мы использовали монотонные диссипативно-устойчивые разностные схемы с положительным оператором, не требующим введения подсеточной турбулентности и специальных фильтров для моделирования свободной развитой турбулентности [10–12]. Предлагаемая методика является обобщением явной гибридной схемы [12]. Эта схема имеет второй порядок точности на гладких решениях и, являясь монотонной, не использует ни искусственную вязкость, ни сглаживание, ни процедуры ограничения потока (flux limiter), часто использующиеся в современных схемах вычислительной динамики жидкости. Для модельного линейного уравнения переноса это есть комбинация схем с ориентированными и центральными разностями. Для этой схемы в применении к уравнению переноса условие монотонности выполняется строго, т.е. любой монотонный набор значений функции в узлах сетки остается монотонным и через шаг по времени. В данной методике переключение между схемами с центральными и ориентированными разностями (определяющее квазимонотонность с сохранением второго порядка аппроксимации) выполняется отдельно для каждой характеристики и зависит от знака соответствующей характеристики и знака одного дополнительного параметра.

Наша вычислительная модель не учитывает вязкие явления и поверхностное натяжение. Тем не менее сама конструкция схемы с требованием монотонности обеспечивает некоторый нелинейный диссипативный механизм, который обеспечивает затухание коротковолновых гармоник. Другими словами, гармоники с длиной волны, меньшей, чем некоторая эффективная длина волны λ_i , гасятся. Это подтверждается нашими расчетами. Очевидно, λ_i приблизительно равняется нескольким шагам вычислительной конечно-разностной сетки. С помощью данной методики мы выполнили большую серию расчетов различных видов неустойчивостей [8–11], результаты которых показывают хорошее согласие с теорией и экспериментом.

Задача о сдвиговом слое

Рассматривается начальная стадия возникновения турбулентности в трехмерном сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды. В качестве расчетной области используется трехмерный параллелепипед в прямоугольной системе координат XYZ (рис. 1). В качестве граничных условий на верхней и нижней границе расчетной области были выбраны условия непротекания, на остальных – условия периодичности.



Рис. 1. Расчетная область и основные параметры течения

Начальное возмущение компонент скорости задавались в следующем виде: *I-й вариант* (одномодовое возмущение скорости) $v = -V, 0 \le z \le bound1$, $v = V, bound2 \le z \le L_z$, $v = 2V(z - \pi), bound1 < z < bound2$; $bound1 = \pi - 0.5, bound2 = \pi + 0.5$;
$$\begin{split} u &= 0,2 * \sin(2\pi * y) * \cos(\pi * z), \\ w &= 0,2 * \sin(2\pi * y) * \cos(\pi * z). \\ \textbf{2-i вариант (многомодовое возмущение скорости)} \\ v &= -V, 0 \leq z \leq bound 1, \\ v &= V, bound 2 \leq z \leq L_z, \\ v &= 2V(z - \pi), bound 1 < z < bound 2; \\ bound 1 &= \pi - 0.5, bound 2 = \pi + 0.5; \end{split}$$
 $\begin{aligned} u &= \sum_{i} ampl[i] * \sin(a[i]y) * \sin(b[i](z - c[i])), \\ w &= \sum_{i} ampl[i] * \sin(a[i]y) * \sin(b[i](z - c[i])). \end{aligned}$

Количество мод изменялось от 1 до 15. При этом параметры возмущения выбирались следующим образом: амплитуда возмущения ampl[i] = 2/i; частоты a[i] = 1/i; b[i] = 2i; сдвиг c[i] = i.

Начальная концентрация частиц во всей расчетной области равна 1. Скорость потока в начальный момент времени V = -5 м/с снизу сдвигового слоя и V = 5 м/с сверху.

$$L_x = 2\pi, \pi, \pi/2, \pi/4, \pi/8;$$

 $L_z = 2\pi, \pi$.

Исследовались различные размеры расчетной области: $L_y = 2\pi, \pi, \pi/2, \pi/4, \pi/8;$

Исследуется эволюция структуры сдвигового течения с конечной в поперечном сечении областью постоянного ненулевого градиента скорости с высотой сдвигового слоя, равной 1. Начальный этап развития турбулентности состоит из формирования одной крупной структуры (аналогично двумерному случаю), по форме напоминающей вихревой рулон. Затем на поверхности рулона набегающий «ламинарный» поток образует вторичные неустойчивости в виде вихревых рулонов меньшего размера [9]. Таким образом, наличие очередных неустойчивостей на поверхности предыдущих приводит к потере стабильности течения и вызывает развитие вихревого каскада. На рис. 2 продемонстрировано развитие турбулентности за счет возникновения такого типа неустойчивостей.



Рис. 2. Развитие вихревого каскада. Изоповерхности условной концентрации и соответствующее распределение турбулентной энергии вдоль направления Y в различные моменты времени – 7, 12, 17. Спектр кинетической на развитой стадии турбулентности в момент времени t = 28

Исследование размерности области, мод и амплитуды начального возмущения приводит к следующим результатам. Турбулизация течения происходит только на определенных модах возмущений двух компонент скорости. В других случаях наблюдаются последующие коллапс вторичного вихря и «ламинаризация» потока. При малой ширине области в поперечном направлении течение представляет собой устойчивую во времени крупную структуру, что не противоречит основным положениям двумерной теории Бэтчелора [14]. При следующих размерах области в Х-направлении $\pi/4 \le Lx \le 2\pi$ наблюдается распад крупного вихря и переход течения в турбулентное через каскад неустойчивости. При размерах области $0 \le Lx \le \pi/4$ крупный вихрь устойчив во времени. Количество мод, величина амплитуды, частоты и сдвига начального многомодового возмущения скорости существенно не меняют развитую картину течения. Рост амплитуды возмущения компонент скорости приводит к увеличению динамики развития турбулентного течения.

На рис. 2 также показано распределение турбулентной энергии вдоль направления Y. Заметно, что на стадии зарождения неустойчивости в момент времени t = 7 энергия течения начинает концентрироваться в середине расчетной области. В дальнейшем, при t = 12, энергия возрастает и достигает своего максимума в центре сформировавшейся крупной структуры. Таким образом, в турбулентном течении крупные вихри не только определяют структуру течения, но и несут его основную энергию [1–3, 10, 11]. В дальнейшем, при переходе течения в турбулентную стадию, энергия распределяется по масштабам вихревого каскада. То есть в течение всей эволюции энергия постепенно переходит от крупных вихрей к более мелким и в конечном итоге диссипирует в тепло, что соответствует теории Ричардсона – Колмогорова – Обухова [7, 8].

Перейдем к описанию спектральных характеристик формирующегося течения. Спектральное представление кинетической энергии рассматривается в середине области по вертикальной координате. Исследуя возникавшие картины турбулентности, удалось проследить процесс формирования некоторого устойчивого участка спектра для пульсаций компонент скорости. На рис. 2 также представлено распределение энергии пульсаций $E = \left(\left\langle u^{'2} \right\rangle + \left\langle v^{'2} \right\rangle + \left\langle w^{'2} \right\rangle \right) / 2$ по волновым числам продольных пульсаций со средним наклоном –59° = arctg (–5/3) на инерционном участке спектра. Для инерционного интервала из соображений подобия были выведены следующие оценки для распределения энергии пульсационного движения E(k) [2] поля скорости:

$$E(k) \approx \Theta^{2/3} k^{-5/3},$$

где k – волновое число, Θ – скорость диссипации энергии на единицу массы, -5/3 показатель спектра. Данное уравнение называется законом -5/3 Колмогорова и выполняется для любой турбулентной задачи на инерционном интервале. Проведенный анализ показателя спектра α для задачи о сдвиговом слое $E(k) \approx \Theta^{2/3} k^{\alpha}$ показывает, что расчетные данные описывают спектральные характеристики течения с точностью до 30 %.

Выводы

Изучены общая динамика и природа развития турбулентности, т.е. эволюция крупномасштабных образований и статистическое представление непрерывного потока энергии по каскаду вихрей для сдвигового слоя. Прямым численным моделированием показано, что переход к хаосу осуществляется через вихревой каскад неустойчивости, который соответствует энергетическому каскаду Ричардсона – Колмогорова–Обухова. Наличие инерционного участка в спектре является наглядным свидетельством того, что при переходе течения в турбулентную стадию энергия распределяется по масштабам вихревого каскада и подтверждает теорию Колмогорова–Обухова [2, 3]. Показано, что именно трехмерная постановка является решающей для возникновения турбулентности.

Библиография

1. Richardson L.F. The supply of energy from and to atmospheric eddies // Proc. Roy. Soc. London. 1920. V.97A. P. 354–373.

2. Колмогоров А.Н. Локальная структура турбулентности в несжимаемой жидкости при очень больших числах Рейнольдса // Докл. АН СССР. 1941. Т. 30, № 4. С. 299–303.

3. Обухов А.М. О распределении энергии в спектре турбулентного потока // Изв. АН СССР. Сер. геогр. и геофиз. 1941. Т. 5, № 4. С. 453–466.

4. Белоцерковский О.М., Опарин А.М., Чечеткин В.М. Турбулентность: новые подходы. М.: Наука, 2002. 286 с.

5. Hoffman J., Johnson C. On transition to turbulence in shear flow // Preprint Royal Institute of Technology Kunliga Tekniska Hogskolan, 2002. P. 30.

6. Rogers M.M., Moser R.D. The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: the Kelvin–Helmholtz rollup // Journal of Fluid Mechanics. 1992. V. 243. P. 183–226.

7. Rogers Michael M., Moser Robert D. The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: pairing and transition to turbulence // Journal of Fluid Mechanics.1993. V. 247. P. 275–320.

8. Belotserkovskii O.M., Chechetkin V.M., Fortova S.V., Oparin A.M. The turbulence of free shear flows // Proc. Internat. Workshop "Hot points in astrophysics and cosmology". Dubna, 2005. P. 191–209.

9. Белоцерковский О.М., Фортова С.В. Макропараметры пространственных течений в свободной сдвиговой турбулентности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50, № 6. С. 1126–1139.

10. Опарин А.М. Численное моделирование проблем, связанных с интенсивным развитием гидродинамических неустойчивостей // Сб. «Новое в численном моделировании: алгоритмы, вычислительные эксперименты, результаты». Сер. «Кибернетика: неограниченные возможности и возможные ограничения». М.: Наука, 2000. С.63–90.

11. Oparin A.M. Numerical study of hydrodynamic instabilities // Computational Fluid Dynamics Journal. 2001. V. 10. No. 3. P. 327–332.

12. Белоцерковский О.М., Гущин В.А., Коньшин В.Н. Метод расщепления для исследования течений стратифицированной жидкости со свободной поверхностью // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1987. Т. 27, № 4. С. 594–609.

13. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1978. 736 с.

14. Бетчелор Дж.К. Теория однородной турбулентности. М.: Иностранная литература, 1955. 197 с.

15. Белоцерковский С.О., Мирабель А.П., Чусов М.А. О построении закритического режима для плоского периодического течения // Известия АН СССР. Сер. физ. атмосф. и океана. 1978. Т. 14, № 1. С. 11–20.

16. Inogamov N. Statistics of long-wavelength fluctuations and the expansion rate of Richtmyer-Meshkov turbulence zone // JETP LETTERS. V. 75. No. 11. P. 547–551.

17. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М., Демьянов А.Ю. Взаимодействие мод возмущений при неустойчивости Рэлея – Тейлора // Докл. АН СССР. 1986. Т. 288. С. 1071–1074.

УДАРНО-МЕТАМОРФИЧЕСКИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ ПОРОДООБРАЗУЮЩИХ МИНЕРАЛОВ ПРИРОДНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СЛАНЦЕВ ЮЖНОГО УРАЛА

Белятинская И.В.^{1,2}, Фельдман В.И.¹, Милявский В.В.², Бородина Т.И.², *Вальяно Г.Е.², Беляков А.А.¹

¹МГУ им. М.В. Ломоносова ² Объединенный институт высоких температур РАН

*vlvm@ihed.ras.ru

Изучены природные кристаллические сланцы Южного Урала после ступенчатого ударно-волнового сжатия в ампулах сохранения плоской геометрии. Исследованы ударно-метаморфические трансформации породообразующих минералов (плагиоклаз, калиевый полевой шпат, скаполит, клинопироксен, амфибол, биотит, гранат). Выявлены существенные различия в степени и характере диаплектовых изменений меланократовых минералов при различных способах нагружения.

Ключевые слова: импактиты, ударный метаморфизм, диаплектовые изменения, минералы.

SHOCK-METAMORPHIC TRANSFORMATIONS OF ROCK-FORMING MINERALS OF NATURAL SOUTHERN URALS' CRYSTALLINE SCHISTS

Belyatinskaya I.V.^{1,2}, Feldman V.I.¹, Milyavskii V.V.², Borodina T.I.², Valiyano G.E.², Belyakov A.A.¹

¹Faculty of Geology, Lomonosov Moscow State University ² Joint Institute for High Temperatures RAS

Natural crystalline schists of the Southern Urals have been studied after stepwise shock compression with the use of recovery assemblies of planar geometry. Shock-metamorphic transformations of rock forming minerals (plagioclase, potassium feldspar, scapolite, clinopyroxene, amphibole, biotite, garnet) have been researched. Significant differences in the extent and nature of diaplectic changes of melanocratic minerals are revealed under different methods of loading.

Keywords: impactites, shock metamorphism, diaplect changes, minerals.

Введение

Импактные процессы, возникающие при падении внеземных тел на земную поверхность, еще полвека назад рассматривались как интересные, но скорее экзотические, нежели значимые геологические феномены. С внедрением в область современных научных изысканий планетарного зондирования и интенсивным развитием технического оснащения ученых представления о важности ударных процессов радикально поменялись. Новейшие исследования показывают, что поверхности практически всех планет Земной группы покрыты астроблемами (эродированными останцами большого кратера, образованного в результате удара метеорита или кометы), а изучение сохранившихся частей самых ранних кор этих планет Земной группы констатирует проявления импактных процессов на всех этапах развития Солнечной системы. Таким образом, процессы ударного метаморфизма, связанные с соударением космических тел с планетами, наряду с вулканизмом являются главнейшими, определяющими состав коры и строение поверхности этих планет.

Изучение геологии, петрологии и механизмов формирования природных импактных структур (астроблем) и горных пород ударного метаморфизма вносит важный вклад в представления о строении и развитии литосферы Земли, имеет большое значение для воссоздания общей картины ее возникновения. При исследованиях природных импактных процессов часто прибегают к их физическому моделированию в лабораторных условиях, в том числе в ампулах сохранения плоской геометрии. Эксперименты по моделированию ударных процессов с последующим изучением явлений, происходящих в минералах горных пород под воздействием ударных волн, крайне важны при диагностике и изучении природных астроблем, так как лабораторные эксперименты по ударно-волновому нагружению горных пород позволяют изучить влияние ударных волн на минералы и породы в хорошо контролируемых условиях.

Методика исследования

Данная работа является продолжением серии экспериментов по ступенчатому ударно-волновому сжатию с использованием природных кристаллических пород [1–3]. Нагружение природных кристаллических пород проводилась с применением сборок сохранения плоской геометрии по методике, описанной в работах [1–4]. Максимальные значения давления в образцах достигались в течение нескольких циркуляций волн в образце (ступенчатое ударно-волновое сжатие) и составляли 26, 36 и 52 ГПа [4]. Конструкция сборки сохранения рассчитана так, чтобы столкновения волн разрежения, возникающих в системе после ударно-волнового нагружения (а следовательно, и максимальные растягивающие напряжения) происходили не в зоне образца, а в специальных жертвенных кольцах и пластинах. Это позволяет уцелеть ампуле сохранения с исследуемым образцом. Изучение преобразований минералов в сохраненных образцах проводилось с использованием методов оптической микроскопии, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), микрозондового и рентгенофазового анализа (РФА) [5].

Проведено изучение закономерностей ударно-метаморфических преобразований породообразующих минералов амфиболитов (амфибол, плагиоклаз, клинопироксен, скаполит) и сланцев (гранат, биотит, плагиоклаз и калиевый полевой шпат). Для проведения экспериментов на Южном Урале были отобраны образцы полосчатых амфиболитов (протерозойские толщи, развитые к востоку от г. Миасс) и кварц-полевошпат-биотит-гранатовых сланцах (карьер Радостный, северо-запад поля развития Тараташского метаморфического комплекса).

Текстура исходного амфиболита линзовидно-полосчатая с ярко выраженными меланократовыми (зелено-серые) и лейкократовыми (светло-серые) полосами. Меланократовые полосы сложены амфиболплагиоклазовыми сланцами (амфибол 50 об. %, плагиоклаз 45 об. %). Лейкократовые полосы представляют собой клинопироксен-скаполитовые сланцы (клинопироксен 30 об. %, скаполит 70 об. %). Мощность полос варьируется от нескольких миллиметров до нескольких сантиметров. Исходный плагиоклаз (Pl^{l}) из амфиболита обладает существенно натровым составом и отвечает границе олигоклаза – андезина (An_{28-33}). Исходный амфибол (*Cam*) относится к группе моноклинных кальциевых амфиболов (согласно микрозондовому анализу, является магнезиогастингитом). Исходный клинопироксен (*Cpx*) относится к кальциевым моноклинным пироксенам (ряда диопсид-геденбергита). Исходный скаполит (*Scp*) относится к кальциевым скаполитам – миццонитам (0,53–0,71 мейонитового компонента).

Исходный кварц-полевошпат-биотит-гранатовый сланец (гранат 40–45 об. %, биотит 40–45 об. %, плагиоклаз (*Pl*) и калиевый полевой шпат (*Kfs*) суммарно – 10–15 об. %) обладает гетеробластовой порфиробластовой структурой и лепидо-гранобластовой структурой основной массы. Исходный плагиоклаз из кварц-полевошпат-биотит-гранатового сланца является андезином (An₃₆₋₃₈). Исходный гранат (*Grt*) по химическому составу относится к группе пиральспитов и является существенно альмандиновым. Биотит (*Bt*), слагающий исходный сланец, является аннит-флогопитом.

По данным РФА, все исследованные фазы хорошо кристаллизованы и имеют размеры ОКР выше 100 нм. Подробное описание исходных пород и слагающих их минералов представлено в работах [5–6].

Результаты экспериментов

Изучение влияния ударных волн, возникающих при ступенчатом ударно-волновом сжатии в ампулах сохранения плоской геометрии, на исследуемые породы выявило два этапа трансформаций породообразующих минералов: твердофазовый этап и этап плавления. Для твердофазового этапа характерны в основном механические преобразования минералов (образование трещин, полос смятия и планарных элементов, аморфизация). Этап плавления заключается, собственно, в плавлении минералов (частичном или полном) и кристаллизации импактного расплава. Химические преобразования некоторых породообразующих минералов могут проявляться как на твердофазовом этапе, так и на этапе плавления.

Интенсивность преобразований в каждом минерале различна. При 26 ГПа все минералы подвергаются только механическим преобразованиям. Наибольшие изменения, как механические, так и химические, претерпевают плагиоклаз и калиевый полевой шпат.

Преобразования плагиоклаза изучались в обеих породах. С ростом ударной нагрузки степень кристалличности плагиоклаза в обеих породах сильно падает (см. табл. 1). Плагиоклаз сильно аморфизован уже при 26 ГПа. Согласно данным РФА, кристаллического плагиоклаза в образцах, подвергнутых на-

¹ Условные обозначения на рисунках и в тексте соответствуют общепринятой международной символике для минералов [7]: Pl – плагиоклаз; Kfs – калиевый полевой шпат; Scp – скаполит; Cpx – кальциевый клинопироксен; Cam – кальциевый моноклинный амфибол; Bt – биотит; Grt – гранат.

грузке в 26 ГПа, остается 11–12 %. На выполненных в СЭМ фотографиях отчетливо видны небольшие реликты кристаллического плагиоклаза, которые сохраняют анизотропность под оптическим микроскопом. В СЭМ они отличаются более темным цветом и обилием грубых трещин, которые отсутствуют в аморфизованной плагиоклазовой массе (рис. 1). Кроме того, для реликтов кристаллического плагиоклаза в полосчатом амфиболите характерно диспергирование, т.е. уменьшение размера кристаллитов с 100 нм в исходном образце до 25 нм при 26 ГПа и 15 нм при 36 ГПа (табл. 1). При 52 ГПа он аморфизован полностью в обеих породах.

Таблица 1

Ударное да	вление, ГПа	Исходные породы	26	36	52
Полосчатый амфиболит	Количество кристаллического плагиоклаза, об.	100	12	6	0
	Размер ОКР, нм	100	25	15	< 1
Количество кристаллическо <i>Qtz-Fs-Bt-Grt</i> сланец плагиоклаза, о		100	11	0	0
	Размер ОКР, нм	100	100	< 1	< 1

TT					
Изменение к	ристалличности	плагиоклазов с	DOCTOM V	ларнои	нагрузки
			po • 10111 /	Aubrio	



Рис. 1. Реликты кристаллического плагиоклаза (более темный цвет на изображениях в отраженных электронах, сильно трещиноваты) среди аморфизованной плагиоклазовой массы (более светлый цвет) из испытавшего нагрузку 26 ГПа амфибол-плагиоклазового сланца

Наравне с интенсивными механическими преобразованиями для плагиоклаза характерны значимые химические трансформации, отчетливо проявленные при 36 и 52 ГПа (при 26 ГПа значимых химических преобразований плагиоклаза не зафиксировано ни в одной из рассматриваемых пород).

Химические преобразования плагиоклаза, как и механические, в обеих породах аналогичны. Рассмотрим подробнее особенности трансформаций минерала на примере плагиоклаза из полосчатого амфиболита. При 36 ГПа наблюдается изменение химического состава аморфизованного плагиоклаза, из которого интенсивно выносится Na⁺ (рис. 2). В то же время в реликтах кристаллического плагиоклаза при 36 ГПа количество каких-либо элементов статистически значимо не изменяется. При 52 ГПа, помимо Na⁺, из аморфизованного плагиоклаза начинает выноситься и Ca²⁺.

Кроме того, в аморфизованном плагиоклазе происходит снижение суммы катионов (с 1,0 ф.е. в исходном плагиоклазе до 0,77–0,86 ф.е. при 36 ГПа и 0,72–0,86 ф.е. при 52 ГПа, см. табл. 2) и изменение суммы $Al^{3+}+Si^{4+}$ (в исходном плагиоклазе $\Sigma Al^{3+},Si^{4+}=4,00\pm0,01$, а в аморфизованном – ΣAl^{3+} , $Si^{4+}=4,05\pm0,01$ при 36 ГПа и $\Sigma Al^{3+},Si^{4+}=4,06\pm0,02$ при 52 ГПа, см. табл. 2) с ростом ударной нагрузки. Эти факты свидетельствуют о начале плавления минерала, т.к. очевидно начало разложения алюмосиликатных тетраэдров.

Для калиевого полевого шпата также характерны и механические, и химические преобразования. Характер механических преобразований минерала очень схож с трансформациями плагиоклаза. Механические трансформации калиевого полевого шпата заключаются в растущей с ростом ударной нагрузки степени аморфизации. Кроме того, как и для плагиоклаза, фиксируется диспергирование кристаллических реликтов минерала. Химические изменения калиевого полевого шпата заключаются в выносе калия, интенсивность которого растет с увеличением ударной нагрузки. Значимого изменения содержания остальных элементов ни при одной из изученных ударных нагрузок не зафиксировано. Однако наблюдается увеличение дисперсии химического состава минерала с ростом ударной нагрузки и уменьшение суммы катионов до 0,86 ф.е. при 52 ГПа вместо 1.0 ф.е. у исходного калиевого полевого шпата. Изменения суммы Al+Si в калиевых полевых шпатах не зафиксировано ни при одной из изученных ударных нагрузок.



Рис. 2. Изменение содержания натрия в плагиоклазах исходных (сплошные кружки) и подвергнутых ударно-волновому нагружению (контурные кружки для реликтов кристаллических плагиоклазов и крестики для аморфизованных) амфибол-плагиоклазовых сланцев в зависимости от величины ударной нагрузки

Таблица 2

Изменение суммы катионов и суммы Al³⁺+Si⁴⁺ с ростом ударной нагрузки в аморфизованном плагиоклазе полосчатого амфиболита

Ударное давление, ГПа	Сумма катионов, ф.е.	Сумма Al ³⁺ +Si ⁴⁺ , ф.е.
0 (исх. породы)	1,00	4,00±0,01
26	0,96–1,0	4,00±0,01
36	0,77–0,86	4,05±0,01
52	0,72–0,86	4,05±0,02

Преобразования скаполита при ступенчатом ударно-волновом нагружении сходны с трансформациями полевых шпатов. Скаполит также сильно аморфизуется уже при 26 ГПа – количество кристаллического скаполита уменьшается при этой нагрузке в 4,6 раза по сравнению с исходной породой. При 52 ГПа весь скаполит аморфизован. Значимых химических преобразований скаполита не зафиксировано.

Механические преобразования в биотите происходят как на твердофазном этапе преобразований (полосы смятия (рис. 3), которые фиксируются уже при нагрузке 26 ГПа), так и на этапе плавления (на границах зерен биотита при 26 ГПа иногда видны следы начала его плавления).



Рис. 3. Характер механических преобразований биотита (полосы смятия) в испытавшем ударную нагрузку 26 ГПа кварц-полевошпат-биотит-гранатовом сланце

С увеличением ударной нагрузки зоны плавления биотита становятся шире. Максимальная степень его плавления наблюдается при 52 ГПа (в пределах зерен биотита часто наблюдается большое количество пустот (рис. 4) – полости, которые возникают при «вскипании» расплава, то есть при уходе из биотитового расплава флюидной фазы). Можно выделить два типа стекла, образующегося по биотиту: однородное стекло (в нем нет признаков кристаллизации) и стекло с микровключениями ярко-белой фазы (рис. 4).



Рис. 4. Плавление биотита в испытавшем ударную нагрузку 52 ГПа кварц-полевошпат-биотитгранатовом сланце: *а* – два типа стекол, образованных по биотиту при ударной нагрузке 52 ГПа; *б* – детальное изображение стекла с новообразованными микровключениями

По аналогии с результатами других экспериментов с плоскими и сферическими сходящимися ударными волнами, где из аналогичного расплава кристаллизовался рингвудит, идентифицированный химически и методом СКР [8–11], и основываясь на ярком цвете новообразований, можно предположить, что в данном случаем мы также имеем дело с глиноземистым рингвудитом.

Значимых изменений химического состава кристаллического биотита ни при одной из изученных нагрузок не выявлено, однако с ростом ударной нагрузки наблюдается увеличение дисперсии в содержаниях некоторых элементов. Химические преобразования выявлены для образованных при нагрузке 52 ГПа стекол по биотиту – стекла получаются различного состава.

Амфибол при изученных нагрузках также подвергается и механическим, и химическим преобразованиям. Механические трансформации амфибола выражаются прежде всего в развитии трещиноватости при 26 и 36 ГПа. Также наблюдается диспергирование и аморфизация минерала, степень которых увеличивается с ростом ударных нагрузок. Интерпретация химических преобразований амфибола существенно затруднена сложной кристаллохимической структурой минерала (подробнее см. [5]). Сложность заключается в наличии неравнозначных кристаллографических позиций, внутри которых элементы имеют разное координационное число, чего нет, например, в структурах плагиоклаза и клинопироксена. Кроме того, некоторые элементы могут обладать разными валентностями.

Среди механических преобразований клинопироксена наблюдается только сильное растрескивание минерала, степень которого нарастает по мере увеличения ударной нагрузки. Аморфизации в клинопироксене не фиксируется. Значимых химических преобразований клинопироксена при исследованных ударных нагрузках также не зафиксировано.

Гранат при исследованных ударных нагрузках подвергается в основном механическим преобразованиям, которые заключаются в интенсивном растрескивании. Степень трещиноватости граната увеличивается с ростом ударной нагрузки. При нагрузке 52 ГПа наблюдаются следы плавления краев зерен граната. По данным РФА гранат сохраняет свою кристалличность при всех изученных ударных нагрузках. Значимых изменений химического состава кристаллического граната не выявлено, однако очевидно увеличение дисперсии химического состава граната с ростом ударной нагрузки.

Заключение

Сравнивая характер ударно-метаморфических преобразований породообразующих минералов в условиях ступенчатого ударно-волнового сжатия, мы видим, что аналогичные фазовые превращения (например, плавление) в разных минералах наступают при различных ударных нагрузках, что объясняется различной кристаллохимической структурой минералов.

Ранее было показано, что степень ударного метаморфизма минералов в сферических сходящихся ударных волнах нарастает в ряду: каркасные – слоистые – ленточные – цепочечные силикаты и алюмосиликаты – силикаты с одиночными тетраэдрами [12]. В настоящей работе эта закономерность зафиксирована и при плоском ступенчатом ударно-волновом сжатии.

Сравнение результатов преобразования породообразующих минералов при ступенчатом ударноволновом сжатии с их диаплектовыми изменениями в природе и в экспериментах со сферическими сходящимися ударными волнами [2–3; 9–11; 13–15] показывает, что во всех трех случаях механические деформации минералов происходят при практически одинаковом ударном давлении. В то же время при плоском ступенчатом сжатии образование полиминеральных ударно-термических агрегатов (УТА) не зафиксировано вплоть до давления 52 ГПа, в то время как в сферических ударных волнах уже начиная с 40 ГПа по амфиболу, биотиту и гранату возникают УТА, содержащие высокоплотные полиморфные модификации: рингвудит, высокоплотная пироксеновая фаза и др.

Возможные причины перечисленных расхождений можно условно разделить на две группы: (1) причины, связанные с исследуемым материалом, и (2) – связанные с условиями нагружения (плоское ступенчатое ударно-волновое сжатие и сжатие сферической сходящейся ударной волной в лабораторных экспериментах, сжатие расходящейся от места падения метеорита ударной волной при реальных импактных событиях). К первой группе можно отнести различия в структурно-текстурных характеристиках пород, использованных теми или иными исследователями, разные количества одних и тех же минералов в образцах и колебания состава использованных минералов. Ко второй группе можно отнести различия в максимальных температурах и давлениях, во времени действия максимального давления на образец, в остаточной (пост-ударной) температуре, во времени остывания до температуры красного каления, а также различия в локальных температурах, реализующихся вблизи пор и трещин. Некоторые из них (например, более высокая температура материала при сжатии его до одного и того же давления сферической сходящейся волной по сравнению с плоским ступенчатым сжатием) достаточно очевидны, другие же требуют более тщательного анализа и проведения специальных численных расчетов при помощи двумерных и трехмерных гидродинамических кодов и широкодиапазонных уравнений состояния. Работа в этом направлении уже ведется.

Библиография

1. Милявский В.В., Сазонова Л.В., Белятинская И.В. и др. Ударный метаморфизм плагиоклаза и амфибола при ступенчатом ударно-волновом сжатии полиминеральных горных пород // Физика и техника высоких давлений 2007. Т. 17. № 1. С. 126–136.

2. Сазонова Л.В., Милявский В.В., Бородина Т.И. и др. Ударный метаморфизм плагиоклаза и амфибола (экспериментальные данные) // Физика Земли. 2007. № 8. С. 90–96.

3. Фельдман В.И., Сазонова Л.В., Милявский В.В. и др. Ударный метаморфизм некоторых породообразующих минералов // Физика Земли. 2006. № 6. С. 32–36.

4. Жук А.З., Бородина Т.И., Милявский В.В., Фортов В.Е. Ударно-волновой синтез карбина из графита // Доклады Академии Наук. 2000. Т. 370. № 3. С. 328–331.

5. Белятинская И.В., Фельдман В.И., Милявский В.В. и др. Ударно-метаморфические преобразования породообразующих минералов полосчатого амфиболита Южного Урала // Вестник Московского Университета. Сер. 4: Геология. 2010. № 5. С. 27–37.

6. Белятинская И.В., Фельдман В.И., Милявский В.В. и др. Трансформации породообразующих минералов при ступеначатом ударно-волновом сжатии // Вестник Московского Университета. Сер. 4: Геология. 2012. Т. 4. № 1. С. 29–39.

7. Kretz R. Symbols for rock-forming minerals // Amer. Mineralogist. 1983. Vol. 68. P. 277-279.

8. Козлов Е.А., Сазонова Л.В., Фельдман В.И. и др. Образование рингвудита при ударно-волновом нагружении двуслюдяно-кварцевого сланца: экспериментальные данные // Докл. АН, 2003. Т. 390, № 4. С. 571–573.

9. Сазонова Л.В., Фельдман В.И., Козлов Е.А. и др. Особенности образования глиноземистого рингвудита при ударно-волновом нагружении (экспериментальные данные) // Геохимия. 2006. № 2. С. 161–166.

10. Фельдман В.И., Сазонова Л.В., Козлов Е.А., Жугин Ю.Н. Особенности трансформации некоторых минералов в ударных волнах – сравнение природных и экспериментальных данных // Препринт ВНИИТФ № 199. Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ. Снежинск, 2002. 25 с.

11. Фельдман В.И., Сазонова Л.В., Козлов Е.А. Ударный метаморфизм некоторых породообразующих минералов (экспериментальные и природные данные) // Петрология. 2006. Т. 14. № 6. С. 576–603.

12. Козлов Е.А., Сазонова Л.В., Фельдман В.И. и др. Некоторые факторы, контролирующие преобразования минералов в горных породах при ударно-волновом нагружении // Фазовые превращения при высоких давлениях: тез. докл. Черноголовка, 2002. С. 13.

13. Козлов Е.А., Сазонова Л.В., Белятинская И.В. Химические особенности трансформации граната в ударных волнах (по результатам экспериментов) // Электр. науч.-инф. журн. «Вестник Отделения наук о земле РАН». М.: ОИФЗ РАН. 2004. № 1 (22). С. 37.

14. Сазонова Л.В., Козлов Е.А., Жугин Ю.Н. Ударный метаморфизм плагиоклаз-гранат-пироксеновой горной породы в сферических волнах напряжения // Геохимия. 1997. Т. 357. № 3. С. 395–398.

15. Фельдман В.И., Сазонова Л.В., Козлов Е.А. Высокобарические полиморфные модификации некоторых минералов в импактитах: геологические наблюдения и экспериментальные данные // Петрология. 2007. Т. 15, № 3. С. 241–256.

ПЕРЕХОД ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ В МЕТАНО-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСИ В УЗКОМ КАНАЛЕ

Иванов К.В., <u>Бакланов Д.И.</u>, ^{*}Голуб В.В., Головастов С.В., Баженова Т.В., Котельников А.Л., Бивол Г.Ю.

Объединенный институт высоких температур РАН

*golub@ihed.ras.ru

В работе исследован переход горения в детонацию в метано-кислородной смеси в узком канале с форкамерой большего диаметра. Представлены результаты исследования влияния геометрических параметров форкамеры на переход горения в детонацию в обедненной метано-кислородной смеси в канале с субкритическим диаметром 3 мм. Авторами работы предлагается безразмерный критерий эффективности влияния форкамеры на переход горения в детонацию. Критерий учитывает энерговыделение в форкамере, детонационную способность смеси, время сгорания смеси в форкамере и время индукции смеси, а также геометрические размеры форкамеры.

Ключевые слова: переход горения в детонацию, метано-кислородная смесь, субкритический диаметр, преддетонационное расстояние.

DEFLAGRATION-TO-DETONATION TRANSITION IN METHANE-OXYGEN MIXTURE IN NARROW CHANNEL

Ivanov K.V., <u>Baklanov D.I.</u>, Golub V.V., Golovastov S.V., Bazhenova T.V., Kotelnikov A.L., Bivol G.Yu.

Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences

It was investigated the deflagration-to-detonation transition in methane-oxygen mixture in narrow channel connected to a forechamber of a bigger diameter. The results of forechamber geometrical parameters effect on deflagration-to-detonation transition in poor methane-oxygen mixture in a channel of subcritical diameter of 3 mm are presented. A non-dimensional criterion of the forechamber effectiveness on deflagration-to-detonation transition takes into account an energy release in the forechamber, detonation ability of mixture, burning time of mixture in the forechamber, induction time of mixture and geometrical dimensions of the forechamber.

Keywords: deflagration-to-detonation transition, methane-oxygen mixture, subcritical diameter, predetonation distance.

Введение

На сегодняшний день стационарная газовая детонация в каналах представляется хотя и сложным, но достаточно изученным явлением. Процессы, происходящие в ускоряющемся пламени и волне детонации, хорошо описываются существующими моделями, которые позволяют с достаточной точностью рассчитывать параметры на фронте детонационной волны. Однако при переходе к малым масштабам, когда диаметр канала становится порядка характерного размера неоднородности пламени, например, детонационной ячейки, возникает ряд таких явлений, как спиновая и галопирующая детонация, которые невозможно объяснить в рамках существующих теорий. Для их корректного описания необходимо применять модели, учитывающие трехмерный характер происходящих процессов, которые на сегодняшний момент еще окончательно не разработаны. Кроме того, граничные эффекты, такие как теплопотери в стенки – в узких каналах они становятся сравнимыми с тепловым эффектом реакции – и потери импульса за счет вязкого прилипания, становятся столь существенны, что оказывают значительное влияние на пределы существования и скорость стационарной детонации, а также пределы перехода горения в детонацию.

Примером технического использования газовой детонации в каналах с околокритическим диаметром могут служить устройства для введения лекарственных препаратов безыгольным методом. Существующие устройства имеют ряд недостатков: низкую удельную плотность энергии, запасенной в одном портативном устройстве – приборы на основе сжатого газа; отсутствие портативности – приборы на основе лазерного импульса; ядовитые продукты сгорания – приборы на основе твердых ВВ.

Всех этих недостатков можно избежать, если для разгона струи лекарства использовать энергию газовой детонации [1]. Основной научной и технической проблемой для применения газовой детонации в подобном устройстве является получение детонационной волны на малых расстояниях (до 300 мм) от места инициирования. Среди всех способов возбуждения детонации в газе наиболее предпочтительным для технических приложений является переход горения в детонацию (ПГД), так как не требует большого начального вложения энергии.

Расстояние, на котором возникает волна детонации, тем меньше, чем меньше диаметр канала, в котором распространяется горение. Таким образом, для минимизации объема газа, сгорающего в недетонационном режиме, и сокращения физического размера устройств является целесообразным возбуждать волну детонации в узких каналах, а в пределе – около- или субкритического диаметра. Однако на пути использования узких каналов для сокращения преддетонационного расстояния встают описанные выше характерные проблемы, связанные с отклонением процесса ПГД от классического сценария.

Согласно работе [2], в осесимметричных трубках постоянного поперечного сечения диаметром 2 мм минимальное начальное давление, при котором наблюдался переход горения в детонацию в кислородноводородной смеси, составляло 2,17 атм при энергии инициирования 0,4 Дж. При этом критический диаметр канала для этой смеси при атмосферном давлении менее миллиметра. По мнению авторов, отсутствие ПГД при меньших давлениях объясняется большими теплопотерями в стенки и низкой скоростью пламени на начальном этапе.

Минимальный (предельный) диаметр канала, в котором распространяется стационарная детонационная волна в метано-кислородной стехиометрической смеси при атмосферном давлении, оказывается порядка 1 мм [3] и резко возрастает для бедных смесей (стехиометрический коэффициент ER<1) (ER – коэффициент избытка горючего по мольной концентрации).

Для уменьшения преддетонационного расстояния известно применение расширения в детонационном канале так называемой форкамеры [4], которая также может быть использована для возбуждения ПГД в критических условиях. В связи с ускорением фронта пламени в канале вследствие расширения продуктов сгорания газа в форкамере на начальном этапе достигается смещение баланса между выделяемой в ходе реакции и диссипирующей энергиями в положительную сторону, что в конечном итоге приводит к реализации ПГД.

Используя форкамеру в начале детонационного канала, авторы работы [2] показали возможность получения детонации в водородо-кислородной стехиометрической смеси при атмосферном давлении в трубках диаметром 1, 1,5 и 2 мм на расстоянии 120-150 калибров.

В данной работе описываются исследования влияния геометрических параметров форкамеры на переход горения в детонацию в обедненной (ER=0,33) метано-кислородной смеси в канале с субкритическим диаметром 3 мм. Авторами работы предлагается безразмерный критерий осуществимости перехода горения в детонацию. Критерий учитывает энерговыделение в форкамере, детонационную способность смеси, время сгорания смеси в форкамере и время индукции смеси, а также геометрические размеры форкамеры

Целями экспериментального исследования формирования детонации в метано-кислородной смеси в каналах с субкритическим диаметром являлись определение эволюции скорости фронта пламени вдоль оси канала в зависимости от геометрических параметров форкамеры, а также разработка универсального безразмерного критерия эффективности форкамеры, учитывающего факторы, влияющие на процесс перехода горения в детонацию.

Экспериментальный стенд

Эксперименты проводились на стенде, включающем в себя пульт управления, систему газового снабжения, блок поджига, систему регистрации и детонационный канал с форкамерой [3].

Рабочая часть установки состояла из цилиндрического детонационного канала с гладкими стенками, диаметром 3 мм и общей длиной более 600 мм. В одном из торцов канала (рис. 1) располагалась форкамера большего диаметра, в которой производился поджиг горючей смеси. Магистрали откачки, подачи газовой смеси и магистраль на манометр были вынесены на противоположный от форкамеры торец детонационного канала, чтобы избежать влияния газа, сгорающего в них, на процесс ПГД в канале.



Рис. 1. Схема основной части экспериментальной установки: *FC* – форкамера; *S* – свеча, закрепленная в подвижном блоке; *PT* – датчик давления; *I* – магистраль, ведущая к манометру; *2* – магистраль откачки; *3* – магистраль подачи газа; *K1–K3* – краны

Конструкция форкамеры позволяла изменять длину форкамеры от 3 мм до 34 мм и ее внутренний диаметр – от 10 мм до 26 мм. Эксперименты проводились при четырех диаметрах и пяти длинах форкамеры, которые были подобраны так, чтобы образовывались группы с близкими объемами. Точные конфигурации форкамеры, которые использовались в экспериментах, приведены в таблице 1.

Таблица 1

Конфигурации форкамеры, использовавшиеся в экспериментах: *V* – объем форкамеры; *E* – энергия сгорания смеси в форкамере; *d* – диаметр форкамеры;

L – длина форкамеры, единицы измерения (мм) и отношение длины к диаметру

V, мл	1,05 ± 0,05	$2,59 \pm 0,07$	$4,14 \pm 0,08$	6,71 ± 0,15	10,65 ± 0,04
Е, Дж	5,9	14,5	23,1	37,5	59,5
d, мм	L, мм / калибры				
26		5 / 0,19	8 / 0,31		20 / 0,77
20		8 / 0,4	13 / 0,65	21 / 1,05	34 / 1,7
16	5 / 0,31	13 / 0,81	21 / 1,31	34 / 2,13	
10		34 / 3,4			

Смесь поджигалась плоской свечой у дальнего от детонационного канала торца форкамеры с помощью блока инициирования. Энергия разряда составляла 0,1 Дж.

Для регистрации скорости распространения волны горения вдоль канала были установлены 14 фотодатчиков. Расстояния между ними указаны на рис. 1 в мм. Для детектирования волны детонации соосно с пятым от форкамеры фотодатчиком располагался датчик давления РСВ. Таким образом, можно было устанавливать присутствие сформировавшейся детонационной волны на расстоянии 194 мм от входа в детонационный канал или измерять в этом сечении время от поджатия смеси в форкамере до появления продуктов сгорания в канале.

Сигналы с фотодатчиков регистрировались с помощью четырех четырехлучевых осциллографов Tektronix. По зарегистрированным интервалам времени между срабатыванием соответствующих фотодатчиков рассчитывалась средняя скорость фронта пламени вдоль канала. Погрешность измерения скорости определялась погрешностью измерения временных интервалов и длин секций и составляла 2 %.

В экспериментах использовалась метано-кислородная смесь с ER=0,33. Аппроксимация экспериментальных данных о ширине детонационной ячейки, полученных в работе [5], дает значение критического диаметра канала порядка 3,5–5 мм. Таким образом, использовавшийся канал диаметром 3 мм являлся субкритическим для этой смеси, и возникающая в результате ПГД детонация не может распространяться стационарно в таком канале. Скорость Чепмена – Жуге в широком канале для этой смеси составляет 1881±20 м/с.

Смесь составлялась в буферном баллоне по парциальным давлениям, регистрируемым с помощью образцового манометра, и выдерживалась не менее суток до полного перемешивания компонентов. Перед составлением смеси буферный баллон вакуумировался в течение часа, после чего продувался метаном и снова откачивался в течение не менее 15 минут.

Эксперименты проводились следующим образом: перед каждым опытом установка и магистрали откачивались в течение 20 минут, чтобы удалить водяные пары из системы. После этого открывался

кран подачи горючей смеси К3, а кран откачки закрывался, и установка наполнялась горючей смесью до необходимого давления. Давление в установке отслеживалось с помощью образцового манометра. По достижении необходимого давления в установке кран закрывался и вручную подавался сигнал с блока поджига на свечу. Перед каждой серией опытов установка проверялась на герметичность.

Влияние энергии, выделяющейся в форкамере, на режим ПГД

Получены экспериментальные данные для форкамер различного диаметра. Пример приведен на рис. 2. Точки на графиках соответствуют серединам участков между соседними фотодатчиками.

На большей части экспериментальных кривых наблюдается немонотонное ускорение фронта пламени вдоль канала: при меньших объемах форкамеры (и, соответственно, меньших энергиях, выделяющихся в форкамере при сгорании газа) точке возникновения детонации предшествует локальный максимум скорости, расположенный в зависимости от объема форкамеры на 65–83 калибрах канала. В этом режиме ПГД возникает на втором этапе ускорения фронта пламени при превышении им скорости 1,5 км/с, а преддетонационное расстояние зависит от объема и геометрических параметров форкамеры. При достаточно больших объемах форкамеры увеличение скорости горения происходит монотонно, и детонация возникает на длине порядка 50–65 калибров канала.

За скачком скорости, превышающим по величине скорость Чепмена – Жуге и означающим возникновение детонации, во всех случаях наблюдалось замедление фронта пламени. Такое поведение характерно для распространения детонации в субкритическом канале и означает дальнейшее затухание и распад детонационной волны или ее распространение в галопирующем режиме.

Для форкамеры диаметром 16 мм локальный максимум скорости фронта пламени, предшествующий ПГД, наблюдается при энергии газа в форкамере, не превышающей значения порядка 30 Дж. При большей энергии ускорение пламени происходило монотонно с переходом в детонацию на расстоянии, равном примерно 65 калибрам канала.

В экспериментах с форкамерой диаметром 20 мм (рис. 2) наблюдались аналогичные зависимости режимов ПГД от энергии сгорающего в форкамере газа, однако режим ПГД с монотонным ускорением пламени наблюдался при энергии газа в форкамере, превышающей значение порядка 48 Дж. Преддетонационное расстояние в этом случае составляло порядка 54 калибров канала.



Рис. 2. Скорость распространения фронта пламени в узком канале с форкамерой диаметром 20 мм

В случае форкамеры диаметром 26 мм локальный максимум скорости фронта пламени наблюдался для энергий сгорания газа в форкамере, меньших 60 Дж. Перехода горения в детонацию с монотонным ускорением фронта пламени не наблюдалось.

Представленные результаты показывают, что энергия сгорающего в форкамере газа не может являться универсальным критерием эффективности форкамеры, так как, например, при использовании форкамер длиной 34 мм и диаметром 16 и 22 мм наблюдается непрерывное ускорение фронта пламени, в то время как при больших энергиях, выделяющихся в форкамере диаметром 26 мм, ускорение фронта происходит в два этапа. Следовательно, при создании критерия необходимо учитывать другие факторы, например, время сгорания газа в форкамере.

Влияние времени сгорания газа в форкамере на режим ПГД

Очевидно, что время сгорания газа в форкамере определяется наибольшим геометрическим размером – длиной или радиусом (так как поджиг смеси производится на оси симметрии форкамеры).

Для определения времени сгорания газа в форкамере экспериментально определялось время от поджигания смеси в форкамере до появления продуктов сгорания в канале. В случае, когда длина камеры больше ее радиуса, то это время характеризует время полного сгорания смеси в форкамере. Когда длина камеры меньше ее радиуса, то это время корректировалось на отношение радиуса к длине, так как сгорание продолжается и после того, как продукты сгорания появились в канале.

В том случае, когда время сгорания постоянно (например: длина форкамеры 5 мм и 8 мм меньше ее радиуса 13 мм), влияние энергии на скорость пламени в начале канала не наблюдается. Как только время сгорания начинает возрастать, начальная скорость пламени в канале увеличивается, а преддетонационное расстояние сокращается.

Исследование влияния энергии сгорания газа в форкамере на режим ПГД проводилось для форкамер объемом 2,6 мл (14,5 Дж) и 4,18 мл (23,1 Дж).

При E = 14,5 Дж преддетонационное расстояние незначительно сокращается при увеличении времени сгорания смеси в форкамере. При этом наблюдается локальный максимум на графике скорости фронта пламени.

При E = 23,1 Дж (рис. 3) наблюдается более сильное воздействие времени сгорания на преддетонационное расстояние. Увеличение времени сгорания смеси в форкамере менее чем в два раза (при изменении размеров камеры с 26х8 и 20х13 мм до 16х21 мм) приводит к сокращению преддетонационного расстояния с 150 до 100 калибров канала, в то время как при энергии 14,5 Дж увеличение времени сгорания более чем в три раза (с 26х5, 20х8 и 16х13 мм до 10х34) практически не уменьшает его.



Рис. 3. Скорость распространения фронта пламени в узком канале при энергии сгорания газа в форкамере 23,1 Дж (объем 4,18 мл)

Таким образом, в зависимости от энергии, выделяющейся в форкамере, интенсивность влияния времени сгорания горючей смеси на преддетонационное расстояние оказывается различной. Следовательно, по отдельности в качестве критерия эффективности форкамеры не подходит ни энергия газа, сгорающего в форкамере, ни время, в течение которого происходит поджатие продуктов горения.

Критерий возникновения ПГД

Известно [6], что на процесс перехода горения в детонацию оказывает влияние путь, пройденный пламенем в относительных единицах (калибрах). Для труб с D >> λ отношение преддетонационного расстояния к диаметру канала X_D/D лежит в интервале от 15 до 100. Наибольшие значения соответствуют воздушным смесям. Чем меньше отношение диаметра канала к размеру детонационной ячейки λ , тем сильнее увеличивается преддетонационное расстояние в канале, и при достаточно малом диаметре канала возникает режим, в котором инициированное горение не переходит в детонацию, несмотря на то, что диаметр канала может быть больше критического (для распространения детонации Чепмена – Жуге) [2].

На основе экспериментальных данных предложен безразмерный критерий ГИБ, учитывающий эти факторы:

$$\Gamma U \mathcal{B} = \frac{E_{xum}}{E_{\kappa p}} \cdot \frac{t_{cop}}{t_{und}} \cdot \frac{L}{D},$$

где *Е*_{хим} – энергия горючей смеси, запасенная в форкамере [Дж],

Е_{кр} – энергия, необходимая для возникновения трехмерной детонации в месте поджига [Дж],

*t*_{гор} – время полного сгорания горючей смеси в форкамере [сек],

*t*_{инд} – время индукции горючей смеси [сек],

L – длина форкамеры [м],

D – диаметр форкамеры [м].

Параметр учитывает: энерговыделение в форкамере (E_{xum}) в зависимости от состава смеси, детонационную способность смеси (E_{xp}); время полного сгорания горючей смеси в форкамере (t_{cop}); относительное расстояние, пройденное фронтом пламени в форкамере (L/D), и химическую активность горючей смеси (t_{und}).

Как видно из графика, изображенного на рис. 4, при увеличении критерия ГИБа скорость фронта пламени на начальном отрезке узкого канала возрастает. Для форкамер с наибольшим критерием ГИБа переход горения в детонацию наблюдается с монотонным ускорением пламени и преддетонационное расстояние для них оказывается наименьшим и находится в диапазоне 50–65 калибров канала.



Рис. 4. Скорость распространения фронта пламени в узком канале с форкамерами с различным критерием эффективности (ГИБ)

При уменьшении значения критерия ГИБа меньше 150 наблюдается немонотонное ускорение фронта пламени и появление локального максимума скорости. При этом чем меньше значение критерия, тем больше преддетонационное расстояние. Форкамера диаметром 10 мм и длиной 34 мм обладает наименьшим критерием ГИБа, поэтому преддетонационное расстояние в этом случае оказывается наибольшим и достигает 140 калибров канала.

Выводы

В работе проведено экспериментальное исследование формирования детонации в метано-кислородной смеси в каналах с субкритическим диаметром и получена экспериментальная зависимость распределения скорости фронта пламени от времени сгорания горючей смеси и энергии, выделяющейся в форкамере.

Обнаружены режимы перехода горения в детонацию с немонотонным ускорением фронта пламени в метано-кислородной смеси в узком канале и выявлено влияние времени сгорания горючей смеси в форкамере и энергии, выделяющейся в ней, на реализацию различных режимов перехода горения в детонацию.

Предложен критерий эффективности форкамеры, который учитывает три фактора, влияющие на переход горения в детонацию. Входящие в него параметры нормированы на критическую энергию инициирования детонации, которая характеризует детонационную способность смеси, время индукции самовоспламенения, определяющее химическую активность смеси и диаметр форкамеры. Критерий позволяет учесть конструктивные особенности форкамеры и состав горючей смеси, что позволяет оценивать эффективность форкамеры в различных условиях и оптимизировать конструкцию форкамеры.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (СП-1782.2012.1), РФФИ (13-08-01227 A) и Президиума РАН («Горение и взрыв»).

Библиография

1. Голуб В.В., Баженова Т.В., Бакланов Д.И., Иванов К.В., Кривокорытов М.С. Применение детонации водородо-воздушной смеси в устройствах для безыгольной инъекции // Теплофизика высоких температур. 2013. Т. 51, № 1. С. 147–150.

2. Hsu Y.C., Chao Y.C. An experimental study on flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in narrow tubes // CD-Proc. of the 22nd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Minsk, Belarus. 2009. P. 0160.

3. Бакланов Д.И., Голуб В.В., Иванов К.В., Кривокорытов М.С. Переход горения в детонацию в канале с диаметром меньше критического диаметра существования стационарной детонации // Теплофизика высоких температур. 2012. Т. 50, № 2. С. 258–263.

4. Akbar R., Kaneshige M.J., Schultz E., Shepherd J.E. Detonations in H2-N2O-CH4-NH3-O2-N2 mixtures. Technical Report FM97-3, Explosion Dynamics Laboratory, California Institute of Technology, 1997. 194 p.

5. Смирнов Н.Н. Газовая и волновая динамика. М.: Айрис-пресс, 2005. 378 с.

6. Нетлетон М. Детонация в газах. М.: Мир, 1989. 280 с.

СОСТАВНАЯ СВЕРХУПРУГАЯ И ПЛАСТИЧЕСКАЯ УДАРНАЯ ВОЛНА, ВЫЗВАННАЯ КОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

*Хохлов В.А., Иногамов Н.А., ¹Жаховский В.В., Анисимов С.И., Петров Ю.В.

ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН ¹Университет Южной Флориды, США

*khokhlov@landau.ac.ru

При воздействии коротких лазерных импульсов (пико-, фемтосекундного диапазона) на металлы наблюдается возникновение сверхупругих ударных волн. Это ударные волны (VB), движущиеся как упругие, несмотря на то, что давление за фронтом такой волны значительно превышает классический предел упругости Гюгонио. Обычно одновременно с такой волной наблюдается следующая за ней пластическая ударная волна, причем в течение заметного времени они движутся практически синхронно, как единая сложная волна. В работе представлена структура такой сложной УВ в алюминии по результатам молекулярно-динамического моделирования с использованием двухтемпературного термогидродинамического расчета и в сопоставлении с результатами экспериментов.

Ключевые слова: воздействие коротких импульсов лазерного излучения на вещество, ударные волны, сверхупругость.

COMPLEX SUPERELASTIC AND PLASTIC SHOCK WAVE, CAUSED BY A SHORT LASER PULSE

Khokhlov V.A., Inogamov N.A., ¹Zhakhovsky V.V., Anisimov S.I., Petrov Yu.V.

Landau ITP RAS ¹Univercity of South Florida, Tampra, USA

Under the action of short laser pulses (pico-, femtosecond) on metal the appearance of superelastic shock waves is observed. There are shock waves (SW), moving like elastic, despite the fact that the pressure behind the front of such wave is much higher than the classical Hugoniot elastic limit. Usually at the same time with such wave, there is the following it plastic shock wave, and for a significant time, they move almost simultaneously, as a single complex wave. The paper presents the structure of such a complex SW in aluminum based on the results of molecular dynamics simulations using a two-temperature thermo-hydrodynamic calculations and compared with experimental results.

Keywords: the action of short-pulse laser radiation on matter, shock waves, superelasticity.

Введение

Применение лазеров с короткими (пико- и фемтосекундного диапазона, а в последнее время – и более короткими) достаточно мощными импульсами с использованием технологии «накачка-зонд» («pump-probe») позволило изучать свойства вещества на новом уровне. При таких экспериментах лазерный импульс разделяется, основной (pump) импульс воздействует на мишень, а слабый отщепленный (probe) импульс, пройдя через линию задержки, используется для микроинтерферометрического измерения смещения поверхности мишени в области либо воздействия основного импульса, либо противоположной стороны пленки. Это позволяет повысить на несколько порядков временное разрешение и пространственную точность по сравнению с известными методиками VISAR и ORVIS [1–4].

В экспериментах возможно наблюдение за поверхностями мишени. Изучить процессы в объёме и понять внутреннюю динамику процесса позволяет численное моделирование.

При короткоимпульсном лазерном воздействии на металлы греющее лазерное излучение сначала поглощается электронами и затем передается решетке. Время установления температуры отдельно в электронной и ионной подсистемах мало по сравнению с другими характерными временами даже для фемтосекундных импульсов, а характерное время электрон-ионной релаксации сопоставимо с длительностью импульса или велико. Это позволяет говорить о двухтемпературном состоянии вещества с температурой электронной подсистемы значительно больше ионной (фононной) $T_e >> T_i$. Хотя длительность это-

го состояния $\tau \sim c_e / \alpha$ (где c_e – электронная теплоемкость, α – коэффициент электрон-ионного те-

плообмена) невелика (для алюминия это несколько пикосекунд), за время двухтемпературной стадии формируется горячий приповерхностный слой, существенно влияющий на всю дальнейшую динамику. Благодаря большой температуропроводности электронной подсистемы $\chi_e = \kappa_e / c_e$ (теплопроводность металла κ практически вся обеспечивается электронами, $\kappa \approx \kappa_e$, а электронная теплоемкость c_e заметно меньше ионной (фононной) и общей теплоемкости вещества) тепловая волна движется со скоростью заметно больше скорости звука в веществе – и формируется прогретый слой толщиной $d_T \sim \sqrt{\chi_e \tau} \approx \sqrt{\kappa_e / \alpha}$, в алюминии порядка сотни нм. Это оказывает существенное влияние на всю последующую динамику. Для изучения этой стадии процесса нами используется двухтемпературный термогидродинамический код (2Т-ГД). Затем результаты такого расчета используются при задании начальных условий молекулярно-динамического моделирования (МД). Существует заметный интервал времени, в течение которого переход от термогидродинамического расчета к молекулярно-динамическому моделированию приводит к практически совпадающим результатам. В дальнейшем МД является значительно более информативным и позволяет проследить явления, в том числе неравновесные, плохо описываемые гидродинамикой.

Как отмечалось выше, поглощение короткого (пико-, фемтосекундого) лазерного импульса приводит к быстрому росту температуры (сначала электронной, затем ионной) за время, за которое вещество мишени не успевает заметно сдвинуться, т.е. при практически неизменной твердотельной плотности. Такой изохорический нагрев приповерхностного слоя мишени приводит к резкому возрастанию давления в нем. Акустическая разгрузка этого сдавленного слоя создает волну сжатия, бегущую вглубь мишени, и вторую волну, которая, отражаясь от свободной поверхности мишени, становится волной растяжения (в экспериментах с пленками на прозрачной подложке, через которую приходит греющий импульс, эта волна уходит в стекло, но в области контакта все равно возникает волна растяжения, следующая за волной сжатия, хотя и более слабая). Опрокидывание волны сжатия вследствие её нелинейности приводит к возникновению ударной волны (УВ). В таких созданных короткоимпульсным лазерным воздействием ударных волнах наблюдается необычное сочетание параметров: волна движется как упругая с «упругой» скоростью (в приближении однородного вещества модуль упругости *K* увеличивается на

 $\frac{4}{3}G$, где G – модуль сдвига) и без заметного затухания, хотя давление за ней значительно превосходит

классический предел упругости Гюгонио (HEL) [1–3]. Как показано в работе [5], параметры такой «сверхупругой» УВ соответствуют продолжению адиабаты Гюгонио за HEL. При относительно небольшой интенсивности излучения возможна одиночная сверхупругая ударная волна, при большей интенсивности возникает сложная структура, состоящая из сверхупругой УВ и следующей за ней пластической УВ. Такие УВ наблюдались, в частности, в экспериментах [6] и [7], где использовались такие же лазерные импульсы, но более толстые пленки. Ниже будет рассмотрена структура такой сложной сверхупругой и пластической УВ по результатам молекулярно-динамического моделирования в условиях, соответствующих экспериментам [6, 7]: лазерный импульс длительностью 120 фс и мощностью 7,7*10¹³ Вт/см² (с учетом отражения поглощаемая энергия 2,6 Дж/см²) воздействует на алюминиевые пленки различной толщины.

Результаты расчетов

Как отмечалось выше, лазерный импульс поглощается электронами в узком приповерхностном скин-слое, поднимая в нем электронную температуру $T_e >> T_i$. Затем, благодаря большой температуро-проводности $\chi_e = \kappa_e / c_e$ электронной подсистемы (теплопроводность металла κ практически вся обеспечивается электронами, $\kappa \approx \kappa_e$, а электронная теплоемкость c_e заметно меньше ионной (фононной) и общей теплоемкости вещества), за время электрон-ионной релаксации ($\tau \sim c_e / \alpha$, где α – коэффициент электрон-ионного теплообмена, для алюминия ~ 7 пс) формируется прогретый слой толщиной $d_T \sim \sqrt{\chi_e \tau} \approx \sqrt{\kappa_e / \alpha}$, в алюминии порядка сотни нм. Движение тепловой волны в это время оказывается сверхзвуковым. На рис. 1 показаны профили электронной (штриховые линии) и ионной (сплошные линии) температур по результатам 2T-ГД расчета.



Рис. 1. Профили температуры (*T*, K) на малых временах (2Т-ГД расчет). Здесь и на последующих рисунках цифрами на кривых обозначены моменты времени в пикосекундах после максимума лазерного импульса. Стрелками указаны участки, из которых в дальнейшем формируются упругая (El SW) и пластическая (Pl SW) ударные волны и дополнительная акустическая волна (ACW)

В МД-моделировании поглощение энергии берется таким, чтобы температура соответствовала ионной температуре в 2Т-ГД расчете. Хотя электронные температуры велики, вклад энергии и давления электронной подсистемы в суммарные энергию и давление при таких временах и дальше незначителен.



Рис. 2. Профили давления (*P*, ГПа) на малых временах (МД-моделирование). Стрелками указаны участки, из которых в дальнейшем формируются упругая (El SW) и пластическая (Pl SW) ударные волны и дополнительная акустическая волна (ACW)

Когда выходящая из прогретого слоя волна сжатия догоняет ушедший вперед на двухтемпературной стадии фронт плавления, в области их пересечения на профиле давления возникает дополнительный излом (рис. 3). Этот участок служит затравкой, на которой формируется упругая УВ. Хотя формирование упругой УВ происходит на участке, значительно опережающем основную волну сжатия, в упругом

веществе скорость продольного звука $c_{el} = \sqrt{(K + \frac{4}{3}G)/\rho}$ с учетом вклада модуля сдвига оказывается

того же порядка, что скорость звука в следующей за ней волне с большим сжатием, но без сдвигового вклада, отсутствующего в пластическом веществе и жидкости.



Рис. 3. Излом профиля температуры и давления при пересечении волны сжатия и фронта плавления (указан меткой М), служащий затравкой упругой УВ

Акустическая волна быстро обгоняет фронт плавления, но в веществе за упругим фронтом при давлениях, превышающих предел упругости, начинают развиваться пластические деформации, и сдвиговый вклад пропадает (рис. 4). Это хорошо видно по профилю сдвигового напряжения (str – штриховая линия на рис. 4).



Рис. 4. Профили температуры (*T*), давления (p_{xx}) и сдвигового напряжения (*Str*, штриховая линия) в момент времени t = 25,6 пс

В результате вглубь вещества бежит упругая волна, со временем опрокидываясь в ударную (стрелка El SW на рис. 5), вещество за этой волной некоторое время остается упругим, несмотря на большое давление, но затем развиваются пластические деформации, и следом бежит пластическая волна (стрелка Pl SW), более сильная, но из-за отсутствия сдвигового вклада имеющая практически такую же скорость. В области разрушения упругого состояния сначала образуется излом профиля давления (рис. 5, ACW), а затем возникает дополнительная акустическая волна, догоняющая упругую УВ (рис. 6).



Рис. 5. Формирование упругой (El SW) и пластической (Pl SW) упругих волн и дополнительной акустической волны (ACW). Здесь и на последующих рисунках профили давления (сплошные линии) и сдвигового напряжения (штриховые линии)





В дальнейшем такие акустические волны периодически возникают в области разрушения упругого состояния, метастабильного при давлении больше предела упругости, и, двигаясь в сжатом упругом веществе, догоняют упругую УВ, подталкивая её (рис. 7). Давление за упругой УВ при этом превышает 25 ГПа.





Пластическая УВ сначала немного догоняет упругую, затем в течение заметного времени движется практически синхронно с упругой. На больших временах пластическая УВ, за которой следует только волна разряжения, постепенно теряет энергию и начинает отставать от упругой.

Метастабильное сверхупругое состояние вещества разрушается спонтанно до прихода пластической волны. Из появляющейся при этом области разряжения выходят две акустические волны. Одна догоняет упругую УВ, другая движется навстречу УВ, проходит через пластическую волну, еще больше ослабляя ее, и проходит дальше навстречу движению УВ (рис. 8). После этого дополнительные акустические волны не возникают.



Рис. 8. Распад метастабильного сверхупругого состояния вещества перед приходом пластической волны и волна разряжения, движущаяся навстречу движению УВ

В дальнейшем пластическая волна продолжает затухать, превращаясь просто во фронт пластической деформации, который продолжает замедляться и в конце концов останавливается, фиксируя толщину пластически деформированного слоя. Упругая же УВ продолжает движение вглубь вещества со своей «упругой» скоростью (рис. 9 и 10).



Рис. 9. Движение упругой и пластической УВ (фронта пластических деформаций) на больших временах

Суммарный график движения упругой (жирные линии) и пластической УВ и дополнительных акустических волн (штриховые линии) и экспериментальные результаты [2] и [3] показаны на рис. 10. При одновременном существовании нескольких дополнительных акустических волн отложены координаты той, которая имеет большую амплитуду.



Рис. 10. Движение упругой УВ (El SW – жирные линии), пластической УВ – фронта пластических деформаций (Pl SW – тонкие линии) и дополнительной акустической волны (штриховые линии). Melt – штрихпунктирная линия – положение фронта плавления. Экспериментальные точки [6] – упругая УВ (Evans – El – прямой крест) и пластическая УВ (– Pl – косой крест) и [7] (Hyang – звезды)

Обсуждение результатов

Как видно из рис. 10, наши расчеты хорошо соответствуют результатам экспериментов [6] и [7]. В работе [6] было отмечено существование упругого предвестника и основной пластической УВ без обсуждения того факта, что давление за упругой волной значительно превышает классический предел упругости. По нашим представлениям, несмотря на большое давление за упругой УВ, вещество за ней остается в метастабильном сверхупругом состоянии, пока не разовьются пластические деформации. В работе [7] попытка интерпретировать зарегистрированную ими УВ как пластическую привело к существенно завышенным оценкам начального давления в волне, находящимся в противоречии с величиной поглощенной энергии. Движение же упругой УВ, по нашим расчетам, хорошо соответствует результатам [3].

К настоящему времени наблюдению сверхупругих ударных волн посвящено большое число работ. В работе [8] показано, что при относительно небольшой интенсивности излучения возможно появление одиночной упругой УВ, амплитуда которой может превышать классический предел упругости Гюгонио, а при большей возникают сложные структуры, рассмотренные выше. Такие же сложные УВ, как рассмотренная выше для алюминия, изучены в пленках никеля с помощью МД моделирования с использованием 2Т-ГД расчетов и в сопоставлении с экспериментальными результатами [9, 10].

Презентацию с иллюстрирующими видеофильмами можно взять на сайте сектора лазеров и плазмы ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН:

http://laser.itp.ac.ru/presentations/Elbrus2012Khokhlov.zip.

Авторы благодарят за поддержку Российский фонд фундаментальных исследований.

Библиография

1. Ашитков С.И., Агранат М.Б., Каннель Г.И., Комаров П.С., Фортов В.Е. Поведение алюминия вблизи предельной теоретической прочности в экспериментах с фемтосекундным лазерным воздействием // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92, № 8. С. 568–573.

2. Armstrong M.R., Crowhurst J.C., Bastea S., and Zaug J.M. Ultrafast observation of shocked states in a precompressed material // J. Appl. Phys. 2010. V. 108. P. 023511 (9 p.).

3. Whitley V.H., McGrane S.D., Eakins D.E., Bolme C.A., Moore1 D.S. and Bingertet J.F. The elastic-plastic response of aluminum films to ultrafast laser-generated shocks // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. P. 013505 (4 p.).

4. Temnov V.V., Sokolowski-Tinten K., Zhou P., and von der Linde D. Ultrafast imaging interferometry at femtosecond-laser-excited surfaces // J. Opt. Soc. Am. B. 2006. V. 23. P. 1954–1964.

5. Жаховский В.В., Иногамов Н.А. Упруго-пластические явления в ультракоротких ударных волнах // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92, № 8. С. 574–579.

6. Evans R., Badger A.D., Fallies F., Mahdieh M., and Hall T.A. Time- and Space-Resolved Optical Probing of Femtosecond-Laser-Driven Shock Waves in Aluminum // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 3359.

7. Huang Li, Yang Y., Wang Y., Zheng Z. and Su W. Measurement of transit time for femtosecond-laserdriven shock wave through aluminium films by ultrafast microscopy // J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42. P. 045502.

8. Inogamov N.A., Khokhlov V.A., Petrov Y.V., Anisimov S.I., Zhakhovsky V.V., Demaske B.J., Oleynik I.I., White C.T., Ashitkov S.I., Khishchenko K.V., Agranat M.B., Fortov V.E. Ultrashort elastic and plastic shockwaves in aluminum // AIP Conference Proceedings. 2012. V. 1426. P. 909–912.

9. Demaske B.J., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.F., White C.T., Oleynik I.I. MD simulations of laserinduced ultrashort shock waves in nickel // AIP Conference Proceedings. 2012. V. 1426. P. 1163–1166.

10. Zhakhovsky V.V., Demaske B.J., Inogamov N.A., Khokhlov V.A., Ashitkov S.I., Agranat M.B. and Oleynik I.I. Super-elastic response of metals to laser-induced shock waves // AIP Conference Proceedings. 2012. V. 1464. P. 102–112.

КОНТИНУАЛЬНО-АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ АЛЮМИНИЯ

*Фокин В.Б., Левашов П.Р., Поварницын М.Е., Хищенко К.В.

Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва

*vladimir.fokin@phystech.edu

Разработана комбинированная модель, объединяющая молекулярно-динамический подход с континуальным представлением электронной подсистемы, позволяющая описывать взаимодействие лазерного излучения с веществом. С помощью электронной подсистемы описываются эффекты поглощения лазерной энергии электронами в зоне проводимости, электрон-ионный обмен, электронная теплопроводность. Атомная подсистема воспроизводит процессы плавления, испарения, нуклеации, разрушения, спинодального распада. С помощью комбинированной модели исследована зависимость глубины кратера от интенсивности излучения при абляции алюминия и проведено сравнение с экспериментальными данными.

Ключевые слова: молекулярная динамика, лазерная абляция, электронная подсистема.

CONTINUUM-ATOMISTIC MODELING OF LASER ABLATION OF ALUMINUM

Fokin V.B., Levashov P.R., Povarnitsyn M.E., Khishchenko K.V.

Joint Institute for High Temperatures

A hybrid model for simulation of laser-matter interaction which combines the molecular dynamics method with continuum approach for electronic subsystem is developed. The effects of the laser energy absorption by the conduction band electrons, the electron-ion coupling and the thermal conductivity of electrons are described with the aid of electronic subsystem. The atomic subsystem is responsible for simulation of the melting, evaporation, nucleation, disintegration and spinodal decomposition. Using the model a crater depth dependence on the laser intensity is investigated, and the comparison with experimental findings for aluminum is performed.

Keywords: molecular dynamics, laser ablation, electron subsystem.

Цели исследования

В наше время благодаря появлению новых технологий и уменьшению размера и энергопотребления различных технических устройств возрастает необходимость в создании и совершенствовании физических моделей, способных описывать различные процессы в веществе на атомарном уровне. Гидродинамический подход, основанный на осреднении величин по времени и пространству в элементарном объеме, очевидно, неприменим на нанометровых масштабах, когда велики относительные флуктуации параметров и значительное влияние оказывают поверхностные эффекты. В этом случае более корректными являются атомистические подходы, которые позволяют моделировать такие системы и естественным образом учитывать атомарную структуру кристаллической решетки, влияние примесей, наличие дислокаций, кинетику фазовых переходов, явления нуклеации и откола при растяжении вещества и многие другие процессы. При этом динамика такой системы, состоящей из атомов (или молекул), будет определяться главным образом выбором потенциала межчастичного взаимодействия. Современные потенциалы воспроизводят с высокой точностью различные свойства вещества, такие как кривая плавления, кривая испарения, скорость звука, модуль сдвига [1]. Однако такие потенциалы не учитывают (или учитывают слишком грубо) свойства электронной подсистемы, которая играет чрезвычайно важную роль при лазерном нагреве, используемом во многих современных высокотехнологических приложениях. Возможным решением проблемы является объединение атомистического подхода для атомов (или молекул) с континуальной моделью электронной подсистемы, свойства которой описываются с помощью термического уравнения состояния, а также моделей транспортных и оптических свойств. Такая комбинированная модель будет воспроизводить динамику вещества как во время, так и после лазерного воздействия, учитывая поглощение излучения, эффекты, связанные с теплопроводностью, процессы плавления решетки, нуклеацию и откол вещества. Одна из первых попыток учесть влияние температуры электронов на потенциал взаимодействия была предпринята в работе [2] для описания двухтемпературных эффектов при моделировании абляции золота короткими лазерными импульсами. В данной работе рассматривается модель на основе подхода [3] и ее использование применительно к моделированию взаимодействия с веществом.

Модель

Будем изучать взаимодействие лазерного излучения с веществом с помощью гибридной модели, развивая идеи работы [3]. В нашей модели используются широкодиапазонные коэффициенты электронной теплопроводности и электрон-ионного обмена [4], коэффициент электронной теплоемкости рассчитывается по уравнению состояния для алюминия [5], а поглощенная энергия находится из решения уравнения Гельмгольца для электромагнитного поля на меняющемся во времени профиле комплексной высокочастотной диэлектрической проницаемости [6]. В этом состоят отличия от модели [3], где все эти коэффициенты (электронной теплоемкости, электронной теплопроводности и электрон-ионного обмена) были постоянными, а поглощение лазерного излучения моделировалось по закону Бугера.

В рассматриваемой модели вещество состоит из двух подсистем – атомной и электронной.



Рис. 1. Пространственное расположение мишени и направление воздействия лазерного импульса

Атомная подсистема состоит из частиц, взаимодействующих между собой, а потенциал межчастичного взаимодействия описывается по модели внедренного атома (EAM – embedded atom model) [7]. Для молекулярного моделирования атомной подсистемы используется параллельный код LAMMPS [8]. В качестве потенциала межчастичного взаимодействия использован потенциал EAM, разработанный для алюминия в работе [1] в широком диапазоне степеней сжатия. Этот потенциал калибровался по экспериментальным данным для алюминия при низких температурах и по данным первопринципных расчетов.

Согласно модели ЕАМ [7], полная энергия *i*-го атома *E_i* определяется как

$$E_{i} = H_{\alpha}\left(\sum_{i \neq j} \rho_{\beta}(r_{ij})\right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}),$$

где r_{ij} – расстояние между атомами *i* и *j*, ϕ – парная функция потенциала, ρ_{β} – вклад в электронную плотность заряда атома *j* типа β в том месте, где располагается атом *i*, и *H* – функция погружения, которая представляет собой энергию, требуемую для того, чтобы поместить атом *i* типа α в электронное облако.

Электронная подсистема моделируется в рамках континуального подхода, представляющего электроны как сплошную среду, у которой есть такие характеристики, как температура, давление, теплоемкость, теплопроводность, коэффициент электрон-ионного обмена, и эти свойства описываются по модели Томаса – Ферми [5]. Электронная жидкость движется вместе с атомами со скоростью их коллективного движения (процесс мгновенной подстройки и отсутствие разделения зарядов). Для всей системы выполняется условие полной электронейтральности. Исследуемое вещество помещено в прямоугольный ограничивающий параллелепипед $0 \le x \le L_x$, $0 \le y \le L_y$, $0 \le z \le L_z$, рис. 1. Параллелепипед вытянут по оси *z*, на боковых гранях (x = 0, $x = L_x$, y = 0, $y = L_y$) ставятся периодические граничные условия, на гранях z = 0, $z = L_z$ – свободные, позволяющие атомам, обладающим высокой скоростью, покидать область расчета. Излучение распространяется в плоскости x - z и падает нормально на поверхность вещества.

Для каждого атома можно записать уравнение движения в виде:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i + \xi_i m_i \mathbf{v}_i^T, \qquad (1)$$

где m_i – масса *i*-го атома, \mathbf{r}_i – радиус-вектор положения этого атома, t – время, \mathbf{F}_i – сила, действующая на этот атом со стороны остальных атомов, ξ_i – коэффициент трения, учитывающий влияние электронной жидкости на *i*-й атом, $\mathbf{v}_i = \{u_i, v_i, w_i\}$ – скорость частицы, \mathbf{v}_i^T – тепловая скорость частицы (скорость частицы в системе отсчета, связанной со скоростью центра масс атомов, окружающих *i*-й атом).

Для дальнейшего изложения необходимо ввести понятие элементарного объема V. Такой объем мал по сравнению с размером тела, но его характерный размер больше межатомного расстояния. В этом объеме помещается много частиц $N \gg 1$, поэтому можно определить тепловую скорость *i*-го атома внутри этого объема:

$$\mathbf{v}_i^T = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}^c \,. \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{v}^c = \{u^c, v^c, w^c\}$ – скорость центра масс вещества внутри объема *V*, которая вычисляется с помощью очевидной формулы:

$$\mathbf{v}^{c} = \sum_{i=1}^{N} (m_{i} \mathbf{v}_{i}) / \sum_{i=1}^{N} m_{i} .$$
(3)

В работе [3] показано, что коэффициент ξ_i отвечает за процесс выравнивания температур электронной и атомной подсистем. Распределение скоростей частиц ионной подсистемы близко к максвелловскому с характерным временем установления < 1 пс, что позволяет ввести ионную температуру в объеме *V*. Температура атомов внутри объема *V* вычисляется как мера средней кинетической энергии, приходящейся на один атом

$$T_{ion} = \frac{1}{3k_B N} \sum_{i=1}^{N} m_i (\mathbf{v}_i^T)^2 .$$
(4)

Здесь k_B – константа Больцмана. Для всех атомов внутри этого объема коэффициент ξ_i одинаков [3],

$$\xi_i \equiv \xi_V = \frac{\gamma V (T_{el} - T_{ion})}{\sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{v}_i^T)^2} = \frac{\gamma V (T_{el} - T_{ion})}{3k_B N T_{ion}},$$
(5)

где T_{el} – температура электронов в объеме V, $\gamma(\rho, T_{ion}, T_{el})$ – коэффициент электрон-ионного обмена, плотность $\rho = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} m_i$.

Для электронной жидкости решается одномерное по z (поскольку $L_z >> L_x$ и $L_z >> L_y$) уравнение теплопроводности в виде:

$$\rho C_{el} \frac{\partial T_{el}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_{el} \frac{\partial T_{el}}{\partial z} \right) - \gamma (T_{el} - T_{ion}) + Q_L, \tag{6}$$

где $C_{el}(\rho, T_{el})$ – электронная теплоемкость, $\kappa_{el}(\rho, T_{ion}, T_{el})$ – коэффициент электронной теплопроводности, $Q_L(z, t)$ – объемный энерговклад (плотность мощности) от лазерного излучения.

Результаты исследования и обсуждение

С помощью разработанной комбинированной модели были проведены расчеты лазерной абляции алюминия при различных интенсивностях лазерного воздействия. Длительность гауссова импульса составляла $\tau = 100$ фс на полувысоте пиковой интенсивности, длина волны 800 нм, рассматривалось нормальное падение на мишень. Поверхность мишени находилась при z = 0 нм и толщина мишени составляла 1 мкм ($0 \le z \le 1$ мкм) при общей области расчета $-0.5 \le z \le 1.5$ мкм. Перед началом моделирования система приводится в тепловое ($T_{el} = T_{ion} = 300$ К) и механическое (P = 0) равновесие, соответствующее состоянию вещества при нормальных условиях. Максимум импульса задавался в различные моменты времени, чтобы набрать статистику по глубине абляции, которая, как оказалось, существенным образом зависит от конфигурации системы.

Лазерное излучение поглощается электронами на глубине скин-слоя (~10 нм) в течение нескольких десятков фемтосекунд. Затем происходит передача тепловой энергии электронов вглубь мишени за счет электронной теплопроводности, и одновременно с этим процессом нагретая электронная подсистема начинает взаимодействовать с ионной подсистемой, приводя к ее нагреву. В некоторых областях происходит плавление решетки, эти области перемежаются с областями, где частично сохранилась кристаллическая структура. На графике, приведенном на рис. 2, эти области жидкой фазы видны как участки, на которых исчезают пилообразные флуктуации плотности при *z* > 200 нм.



Рис. 2. Распределение плотности в мишени для импульса с интегральной плотностью излучения $F = 2.6 \text{ Дж/см}^2$. Моменты времени: (a) – 50 пс; (b) – 75 пс; (c) – 100 пс

Эти флуктуации характерны только для кристаллической фазы вещества и являются следствием упорядоченной структуры расположения атомов. Для нахождения плотности образец вещества разбивается вдоль оси z (см. рис. 1) на элементарные объемы плоскостями, параллельными плоскостям, образуемым узлами кристаллической решетки. Флуктуации плотности возникают из-за того, что период кристаллической решетки в общем случае не является кратным периоду вычислительной сетки, и в два рядом лежащих элементарных объема может попасть разное количество плоскостей кристаллической решетки, в которых, главным образом, и сосредоточены атомы вещества. В отличие от этих осцилляций, наблюдаемые при z < 100 нм провалы плотности обусловлены процессом роста пор в веществе.

Сразу после прохождения лазерного импульса в образце возрастает давление, вещество начинает расширяться, возникают волны сжатия и растяжения. Вещество начинает движение в область с более низким давлением, возникает ударная волна, движущаяся вглубь образца, а за ней формируется волна разгрузки, которая движется по расплавленному образцу. Профиль волн давления и разгрузки в различные моменты времени представлен на рис. 3.



Рис. 3. Распределение давления в мишени для импульса с интегральной плотностью излучения $F = 2.6 \text{ Дж/см}^2$. Моменты времени: (a) – 50 пс; (b) – 75 пс; (c) – 100 пс

Отрицательное давление в волне разгрузки достигает в расчетах величины порядка –2 ГПа. При этом откол вещества происходит в жидкой фазе, преимущественно в той области, где давление держится отрицательным в течение характерного времени ~10 пс. В этой области успевают возникнуть поры (рис. 4), которые начинают расти и затем сливаются между собой, что в конечном итоге приводит к фрагмента-

ции образца. Давление в месте роста пор постепенно релаксирует к нулевому значению [см. рис. 3(c) при $z \le 100$ нм].



Рис. 4. Фрагмент системы атомов $0 \le z \le 160$ нм для импульса с интегральной плотностью излучения $F = 2.6 \text{ Дж/см}^2$. Моменты времени: (a) – 50 пс; (b) – 75 пс; (c) – 100 пс

Примерно через 100 пс после прохождения импульса процесс формирования новых фрагментов образца заканчивается. Суммарную массу, которая отделилась от образца в процессе фрагментации, можно отождествлять с аблированной массой вещества. Подсчитав эту массу, можно найти глубину кратера Δ, получающуюся в ходе такого эксперимента:

$$\Delta = m/(\rho_0 S),\tag{7}$$

где m – значение аблированной массы, полученной в расчетах, ρ_0 – начальная плотность алюминия, S – площадь поперечного сечения образца, используемого в моделировании. На рис. 5 приведена зависимость глубины абляции от интегральной плотности излучения, полученная в ходе выполнения данной работы. Кинетика процесса откола во многом определяется видом потенциала межчастичного взаимодействия, и данный вопрос исследовался в работе [1]. Используемый нами потенциал наиболее точно описывает холодную кривую в алюминии, что важно при моделировании значительных растяжений вещества. Наблюдаемое нарушение симметрии в образце (рис. 4) связано с тем, что процесс формирования откола стохастический и, как было установлено в процессе моделирования, результаты вычислений чувствительны к незначительным изменениям начальных данных (скоростей и положений атомов). По этой причине результаты по глубине абляции вещества усреднялись по нескольким расчетам с различной начальной конфигурацией системы и вычислялось среднее значение глубины и среднеквадратичное отклонение (рис. 5).

С помощью проводимых расчетов по абляции будут построены кинетические модели разрушения в жидкой и кристаллической фазах при различных скоростях растяжения вещества. В частности, результаты МД-моделирования содержат информацию о времени появления и роста пор, формировании откольных слоев в зависимости от температуры образца, скорости его растяжения. Эти данные можно использовать для нахождения коэффициентов полуэмпирических моделей разрушения [9]. Такие модели необходимы для проведения крупномасштабного моделирования с помощью континуальных подходов.



Рис. 5. Глубина абляции алюминия ∆ в зависимости от интегральной плотности излучения F для фемтосекундных импульсов на длине волны 800 нм. Результаты моделирования – синие квадраты, эксперимент из работы [10] – красные треугольники, и работы [11] – зеленые кружки. Погрешность при моделировании вычислена путем усреднения нескольких расчетов с различной начальной конфигурацией скоростей атомов

Выводы

Разработана комбинированная модель, объединяющая молекулярно-динамическую систему для атомов с континуальной моделью для электронной подсистемы. Наличие электронной подсистемы позволяет описывать такие процессы, как поглощение лазерного излучения, электрон-ионный обмен энергией, электронную теплопроводность. При моделировании оптических, термодинамических и переносных свойств использованы широкодиапазонные модели, описывающие вещество в диапазоне от холодного конденсированного состояния до горячей разреженной плазмы. Проведенные по разработанной модели расчеты динамики абляции алюминиевой мишени под действием фемтосекундных лазерных импульсов показали хорошее согласие с экспериментальными данными по глубине абляции. Кроме того, модель позволяет проследить в динамике такие важные для понимания процесса абляции вещества явления, как гомогенное плавление, нуклеация и откол в жидкой фазе при сверхбыстром растяжении.

Авторы работы признательны Куксину А.Ю. за плодотворное обсуждение разработанной модели. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №13-08-01179 и №13-02-91057) и Президента Российской Федерации (грант № НШ-6614.2014.2).

Библиография

1. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // Appl. Surf. Sci. 2009. V. 255. P. 9592–9596.

2. Стариков С.В., Стегайлов В.В., Норман Г.Э. и др. Лазерная абляция золота: эксперимент и атомистическое моделирование // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93, № 11. С. 719–725.

3. Ivanov D., Zhigilei L. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 064114.

4. Povarnitsyn M.E., Andreev N.E., Apfelbaum E.M., Itina T.E., Khishchenko K.V., Kostenko O.F., Levashov P.R., Veysman M.E. A wide-range model for simulation of pump-probe experiments with metals // Applied Surface Science. 2012. V. 258. P. 9480–9483.

5. Shemyakin O.P., Levashov P.R., Obruchkova L.R., Khishchenko K.V. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas-Fermi model // J. Phys. A: Math. Theor. 2010. V. 43. P. 335003.

6. Povarnitsyn M.E., Andreev N.E., Levashov P.R. et al. Dynamics of thin metal foils irradiated by moderate-contrast high-intensity laser beams // Physics of Plasmas. 2012. V. 19, No. 2. P. 023110.

7. Daw Murray S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B 1984. V. 29 P. 6443–6453.

8. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://lammps.sandia.gov.

9. Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Писарев В.В. и др. Кинетическая модель разрушения простых жидкостей // Теплофизика высоких температур. 2010. Т. 48, № 4. С. 536–543.

10. Colombier J.P., Combis P., Bonneau F., Le Harzic R., Audouard E. Hydrodynamic simulations of metal ablation by femtosecond laser irradiation // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 165406.

11. Hashida M., Semerok A., Gobert O., Petit G., Wagner J.-F. Ablation thresholds of metals with femtosecond laser pulses // Proc. SPIE. 2000. V. 4423. P. 178.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ МИШЕНЯМИ

Агранат М.Б.¹, *Андреев Н.Е.¹, Иванов М.И.², Нестеренко А.О.², Овчинников А.В.¹, Петровский В.П.¹, Ромашевский С.А.¹, Чефонов О.В.¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН ²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова

*andreev@ras.ru

Статья посвящена экспериментальным исследованиям взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с интенсивностью излучения на образце ~10¹⁷÷10¹⁸ Вт/см² с различными твердотельными мишенями, включая мишени с наноструктурированной поверхностью. Представлены результаты измерений выхода характеристического рентгеновского излучения при использовании наноструктурированных мишеней и экспериментов по регистрации жесткого рентгеновского излучения в зависимости от величины наносекундного предымпульса.

Ключевые слова: фемтосекундные импульсы, рентгеновское излучение, плазма.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF INTERACTION OF FEMTOSECOND LASER PULSES WITH THE NANOSTRUCTURED TARGETS

Agranat M.B.¹, Andreev N.E.¹, Ivanov M.I.², Nesterenko A.O.², Ovchinnikov A.V.¹, Petrovskiy V.P.¹, Romashevskiy S.A.¹, Chefonov O.V.¹

Joint Institute for High Temperatures RAS The Federal State Unitary Enterprise All-Russia Research Institute of Automatics

Paper is devoted to experimental investigation of interaction of femtosecond laser pulses with intensity of $\sim 10^{17} \div 10^{18}$ W/cm² with various solid-state targets, including targets with a nanostructured surface. The results of measurements of characteristic X-rays yield from nanostructured targets and of experiments on registration of the hard X-rays depending on the nanosecond prepulse value are presented.

Keywords: femtosecond pulses, X-ray radiation, plasma.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований жесткого рентгеновского излучения лазерной плазмы, которое возникает при взаимодействии мощных фемтосекундных лазерных импульсов интенсивностью излучения на образце ~10¹⁷÷10¹⁸ Вт/см² с различными твердотельными мишенями, включая мишени с наноструктурированной поверхностью. Целью экспериментов являлось исследование эффективности генерации жесткого тормозного и характеристического рентгеновского излучения фемтосекундной высокотемпературной плазмы.

Эксперименты выполнялись с помощью излучения мультитераваттной фемтосекундной титансапфировой лазерной системы на длине волны 800 нм, длительностью импульса 40±5 фс, энергией импульса до 250 мДж и частотой повторения 10 Гц.

Взаимодействие лазерного излучения с мишенями осуществлялось в вакуумной камере, которая была соединена с вакуумной камерой временного компрессора и откачивалась вакуумной станцией с турбомолекулярным насосом до остаточного давления 10^{-4} мм рт.ст. Пучок излучения лазерной системы диаметром 30 мм фокусировался на мишень параболическим зеркалом с фокусным расстоянием 254 мм (рис. 1).



Рис. 1. Экспериментальная схема исследований

Для установки мишени в фокальную плоскость параболического зеркала и перемещения мишени на чистое место перед каждым лазерным импульсом использовался трехкоординатный моторизованный мишенный узел. Минимальный шаг перемещения мишени составлял 1.25 мкм. Контроль положения мишени относительно фокальной плоскости параболы осуществлялся с помощью оптической системы 1, состоящей из фотографического объектива, настроенного на бесконечность, и ПЗС-камеры, расположенной в фокальной плоскости объектива. Пространственное распределение лазерного пучка на мишени при оптимальной настройке схемы фокусировки представлено на рис. 2.



Рис. 2. Пространственное распределение интенсивности лазерного импульса в фокальной плоскости параболического зеркала

Как видно на рис. 2, диаметр пучка по уровню 1/е составлял 15 мкм относительно максимума интенсивности. Точность позиционирования мишени с использованием такой схемы составляла ±10 мкм. Энергия излучения лазерной системы контролировалась в каждом импульсе. Для этого часть излучения лазерного импульса (~2 %) ответвлялась с помощью плоскопараллельной пластины (рис. 1) на измеритель энергии. Регулировка энергии импульса осуществлялась с помощью поляризационного ослабителя, расположенного между регенеративным и многопроходным усилителями и состоящего из полуволновой пластины и поляризатора.

Регистрация спектров характеристического рентгеновского излучения в экспериментах осуществлялась с помощью фокусирующего кристаллического спектрометра, выполненного по схеме Гамоша [1–3]. На рис. 3 приведена фотография основных элементов, входящих в состав спектрометра.



Рис. 3. Общий вид спектрометра Гамоша: 1 – цилиндрический кристаллодержатель; 2 – кассета для рентгеновских фильтров; 3 – детектор TCD 1304AP

Кристаллодержатель был закреплен в двухкоординатной юстировочной оправе. На входе кристаллодержателя для уменьшения влияния быстрых электронов и рассеянного рентгеновского излучения на сигнал детектора была установлена бленда, состоящая из свинцовой пластины толщиной 1 мм и лавсановой пленки толщиной 4 мкм. В качестве диспергирующего элемента в спектрометре использовался кристалл слюды (2d = 19.84 Å) размером 80 мм × 80 мм и толщиной 20 мкм. Кристалл-анализатор был изогнут по цилиндрической поверхности кристаллодержателя с радиусом R = 20 мм. Регистрация спектров K_{α} -излучения производилась в пятом порядке отражения (n = 5). В качестве детектора рентгеновского излучения использовалась ПЗС–линейка TCD 1304AP, представляющая собой одномерный массив с 3724 элементами, рсположенными последовательно друг за другом (ПЗС-линейка). Размер одного элемента (пикселя) составлял 8 мкм × 200 мкм. Площадь чувствительной области детектора составляла 200 мкм × 29.8 мм. Для увеличения эффективности регистрации рентгеновского излучения с детектора было удалено защитное покровное стекло.

Для регистрации интегрального выхода непрерывного жесткого рентгеновского излучения в диапазоне энергий квантов от нескольких десятков кэВ до нескольких МэВ использовался сцинтилляционный детектор ССДИЗ7 производства ФГУП ВНИИА [4]. Сцинтилляционный детектор ССДИЗ7 предназначен для преобразования плотности потока импульсного нейтронного и рентгеновского излучения в электрический аналог (импульс тока на выходе детектора) и может быть использован в системах регистрации однократных и редкоповторяющихся импульсов ионизирующего излучения различных физических установок. Общий вид детектора приведен на рис. 4.



Рис. 4. Общий вид детектора ССДИ37: 1 – сцинтиллятор; 2 – ФЭУ; 3 – светодиод; 4 – делитель; 5 – корпус; 6 – плата шунтирования; 7 – свинцовый колпак; 8 – розетка СР-75-155ПВ; 9 – розетка высоковольтная ТВШР45.010 (2 шт.); 10 – розетка ВNC-ВЈ; 11 – крышка платы шунтирования; 12 – клемма «земля»; 13 – розетка ВNC-ВЈ; 14 – гайка Детектор состоял из пластмассового сцинтиллятора типа ПС-Н2 диаметром 63 мм и высотой 63 мм, поверхность которого окрашена белой диффузно-отражающей эмалью ВЛ-548, фотоэлектронного умножителя ФЭУ-97, светонепроницаемого корпуса. Типовая спектральная характеристика детектора при регистрации гамма-излучения приведена на рис. 5.



Рис. 5. Спектральная характеристика детектора ССДИ37 при регистрации гамма-излучения

В ходе экспериментов с помощью кристаллического спектрометра была исследована зависимость абсолютного выхода K_{α} излучения в зависимости от типа мишени при облучении s-поляризованным лазерным излучением. Для исследований были использованы два типа мишеней: медная фольга толщиной 8 мкм и аналогичная фольга с наноструктурами на поверхности. Наноструктуры представляли собой металлические столбики, возвышающиеся над поверхностью подложки. Плотность распределения столбиков на поверхности составляла около 10^8 столбиков/см². Каждый столбик имел диаметр 400–500 нм, высота столбика была равна порядка 1 мкм. Плотность такой структуры составляла ~20 % от плотности меди. Медная поддерживающая подложка была получена электрохимическим осаждением. Этот слой мишени выступал в качестве основного материала для генерации K_{α} -излучения горячими электронами, возникающими при взаимодействии лазерных импульсов с наноструктурированной поверхностью мишени.

Типичные измеренные рентгеновские спектры для различных типов мишеней представлены на рис. 6.



Рис. 6. Спектры рентгеновского излучения из различных мишеней: медная фольга толщиной 8 мкм (726); медная фольга толщиной 8 мкм с медными столбиками на поверхности (717)

Анализ экспериментальных данных, представленных на рис. 7, показывает, что выход характеристического рентгеновского излучения для мишеней меди с наноструктурированной поверхностью в два раза выше, чем для мишеней без наноструктур.

Спектры получены путем накопления сигнала по 10 импульсам лазерного излучения. Расчет выхода характеристического излучения K_{α} выполнялся путем интегрирования спектра в интервале длин волн $\Delta \lambda = 0.01$ Å. Также в экспериментах с использованием рентгеновского детектора ССДИ37 был исследован выход жесткого рентгеновского излучения в зависимости от интенсивности и контраста падающего лазерного импульса при разных углах наблюдения при взаимодействии лазерного излучения с массивной мишенью меди. Детектор располагался на расстоянии 138 см от окна вакуумной камеры.

В экспериментах исследовалось влияние контраста лазерного импульса (отношение интенсивности основного нагревающего лазерного импульса к интенсивности предымпульса, опережающего основной на 10 нс) на выход жесткого рентгеновского излучения в зависимости от угла наблюдения. Измерения проводились в двух точках наблюдения: по нормали мишени и вдоль поверхности мишени под малым углом скольжения порядка 5°. Изменения наносекундного контраста лазерного импульса и размер пятна фокусировки сохранялись в диапазоне значений $10^2 – 10^7$, а энергия лазерного импульса и размер пятна фокусировки сохранялись постоянными для поддержания плотности мощности лазерного излучения на поверхности мишени порядка 10^{18} BT/см². Для каждого значения контраста лазерного импульса проводилось по пять отдельных опытов для набора статистики. На рис. 7 приведена зависимость выхода жесткого рентгеновского излучения при интенсивности 10^{18} BT/см² от величины контраста наносекундного предымпульса для малых углов наблюдения относительно поверхности мишени.



Рис. 7. Зависимость выхода жесткого рентгеновского излучения от величины наносекундного предымпульса (наносекундного контраста) лазерного импульса в области малых углов наблюдения относительно поверхности мишени

Кроме того, в данных экспериментах было зафиксировано наличие анизотропии в угловом распределении жесткого рентгеновского излучения при интенсивности лазерного излучения $\sim 10^{18}$ Bt/cm². Угловая зависимость выхода рентгеновского излучения показана на рис. 8.



Рис. 8. Зависимость выхода жесткого рентгеновского излучения от интенсивности при разных углах наблюдения (1 – по нормали мишени, 2 – почти вдоль поверхности мишени)

Выход жесткого рентгеновского излучения по нормали мишени (точка наблюдения 1, рис. 8) примерно в 2.5 раза превышает выход на углы, близкие к поверхности мишени (точка наблюдения 2, рис. 8). Это может быть связано с пространственной неоднородностью плотности расширяющейся плазмы в периферийном направлении от поверхности мишени в вакуум, что может привести к частичной экранировке рентгеновского излучения плазмой в данном направлении распространения излучения, а также изменить условия и эффективность генерации горячих электронов в этом направлении.

Таким образом, в результате экспериментальных исследований установлено, что применение наноструктурированных мишеней может быть использовано для увеличения выхода характеристического рентгеновского излучения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов с высоким контрастом и умеренной интенсивности.

Результаты экспериментов по регистрации жесткого рентгеновского излучения показали также, что при интенсивности лазерного импульса ~10¹⁸ Вт/см² роль наносекундного предымпульса становится существенной только при малых углах наблюдения относительно поверхности мишени, а в направлении по нормали мишени выход жесткого рентгеновского излучения практически не зависит от контраста лазерного импульса.

Библиография

1. Shevelko A., Antonov A., Grigorieva I., Kasyanov Yu., Yakushev O., Knight L., Wang Q. X-Ray focusing crystal von Hamos spectrometer with a CCD linear array as a detector // Advances in X-ray Analysis. 2002. V. 45. P. 433–440.

2. Shevelko A., Kasyanov Yu., Yakushev O., Knight L. Compact focusing von Hamos spectrometer for quantitative x-ray spectroscopy // Rev. Sci. Instrum. 2002. V. 73. P. 3458–3463.

3. Shevelko A., Yakushev O., Knight L., Wang Q. Absolute X-Ray calibration of laser produced plasmas using a CCD linear array and focusing crystal spectrometer // Proc. SPIE. 2001. V. 4504. P. 215–226.

4. ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.vniia.ru.

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ПРОБОЯ ХЛОРИДА НАТРИЯ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ЛАЗЕРНЫХ ПОЛЯХ

*Савинцев А.П., Гавашели Ю.О., Кяров А.Х.

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова

*pnr@kbsu.ru

Проанализирована зависимость порога лазерного и электрического пробоя хлорида натрия от длительности импульса в наносекундном – фемтосекундном диапазоне. Показано, что механизм пробоя в сильных электрических полях не остается постоянным, а определяется во многом длительностью импульса поля.

Ключевые слова: лазерный пробой, длительность импульса, порог пробоя, хлорид натрия.

STUDY OF BREAKDOWN MECHANISM OF SODIUM CHLORIDE IN STRONG ELECTRIC AND LASER FIELDS

Savintsev A.P., Gavasheli Yu.O., Kyarov A.Kh.

Kabardino-Balkarian State University

The dependence of the threshold of the laser and the electrical breakdown of sodium chloride on the pulse duration in the nanosecond – the femtosecond range analyzed. It is shown that the mechanism of breakdown in strong electric fields is not constant, but is largely determined by pulse field.

Keywords: laser breakdown, pulse duration, breakdown threshold, sodium chloride.

Для прозрачных твердых тел имеет место определенная зависимость порога пробоя от длительности коротких электрических и лазерных импульсов. Исследование характера подобной зависимости помогает понять механизмы и закономерности пробоя.

На основе экспериментальных данных, приведенных в [1], нами была проанализирована зависимость порога лазерного пробоя E плавленого кварца сфокусированным лазерным излучением от длительности импульса τ в наносекундном диапазоне (рис. 1), пикосекундном и фемтосекундном диапазоне (рис. 2) τ [2]. Построенные графики показали, что возможна аппроксимация полученных данных несколькими (двумя или тремя) прямыми с различным угловым коэффициентом:

$$K = \frac{\lg E_2[E, B/cM] - \lg E_1[E, B/cM]}{\lg(1/\tau_2)[\tau, c] - \lg(1/\tau_1)[\tau, c]}.$$



Рис. 1. Зависимость порога лучевого разрушения плавленого кварца от длительности лазерного импульса (наносекундный диапазон), аппроксимация тремя прямыми с различным угловым коэффициентом *К*


Рис. 2. Зависимость порога лучевого разрушения плавленого кварца от длительности лазерного импульса (пикосекундный и фемтосекундный диапазон), аппроксимация двумя прямыми с различным угловым коэффициентом *К*

С другой стороны, результаты, приведенные в [1], можно обработать стандартными параметрическими и непараметрическими моделями с использованием компьютерной программы математического моделирования Matlab 7. Программа Matlab 7 позволяет за короткое время «проиграть» с помощью изменения параметров различные конструктивные модели и избежать принципиальных ошибок.

Нами было установлено [3], что приближение данных наиболее адекватно проводится с использованием параметрической степенной модели $f(x) = ax^n$.

Численные значения K и n для плавленого кварца показаны в табл. 1. Отметим, что на участке 1 (рис. 1) при $\tau > 40$ нс наблюдается K = 0. Кроме того, величина K на участке 3 (рис. 1) и на участке 1 (рис. 2) одинакова (а именно, 0.14).

На рис. 1–2 видно, что в плавленом кварце зависимость порога лазерного разрушения от длительности лазерного импульса (в диапазоне 40 нс > $\tau \ge 16$ фс) может быть аппроксимирована несколькими прямыми с разным угловым коэффициентом. Можно выделить 4 участка с различным значением *K*: первый – $\tau \ge 40$ нс, второй – 40 нс $\ge \tau \ge 3$ нс, третий – 3 нс $\ge \tau \ge 5$ пс и четвертый – 5 пс > $\tau \ge 16$ фс.

Границы указанных участков располагаются для плавленого кварца, согласно рис. 1–2 и табл. 1, в области 40 нс, 3 нс и 5 пс.

Таблица 1

τ	40 нс ≥ т ≥ 3 нс	3 нс > τ ≥ 5 пс	5 пс > τ ≥ 16 фс
К	0.32 ± 0.02	0.14 ± 0.01	0.65 ± 0.03
n	0.36 ± 0.02	0.72 ± 0.04	-0.30 ± 0.02

Пороги лазерного разрушения плавленого кварца

Вышерассмотренный подход был применен нами и для анализа механизмов пробоя ионных кристаллов в сильных электрических полях.

Данные по порогам пробоя наносекундными электрическими импульсами были взяты из [4], пороги пробоя наносекундными и пикосекундными лазерными импульсами – из [5, 6], а пороги лучевого разрушения фемтосекундными лазерными импульсами – из наших экспериментальных работ [6, 7].

Как показали наши эксперименты [5], лучевая стойкость ионных кристаллов при воздействии наносекундных лазерных импульсов неплохо согласуется с порогами пробоя этих же кристаллов при воздействии коротких электрических импульсов наносекундной длительности (табл. 2).

Таблица 2

Пороги лазерного разрушения и пробоя при воздействии коротких электрических импульсов для ионных кристаллов

Кристалл	NaCl	KI				
Лучевой пробой						
τ	10 нс ≥ τ ≥ 800 пс	8 нс ≥ τ ≥ 2.5 нс				
К	0.32 ± 0.02	0.30 ± 0.02				
Пробой короткими электрическими импульсами						
τ	200 нс ≥ τ ≥ 40 нс	300 нс ≥ τ ≥ 30 нс				
К	0.34 ± 0.02	0.30 ± 0.02				

Зависимость критической напряженности электрического поля от длительности импульса в случае повреждения хлорида натрия приведена на рис. 3.

Численные значения К и n, соответствующие рис. 3, показаны в табл. 3.

Таблица 3

Пороги лазерного разрушения хлорида натрия

τ	10 нс ≥ τ ≥ 800 пс	800 пс > τ ≥ 30 пс	30 пс > τ ≥ 80 фс
К	0.32 ± 0.02	0.107 ± 0.005	0.40 ± 0.02
n	0.36 ± 0.02	$\textbf{0.78} \pm \textbf{0.04}$	0.20 ± 0.01



Рис. 3. Зависимость критической напряженности электрического поля от длительности импульса в случае повреждения хлорида натрия, аппроксимация пятью прямыми с различным угловым коэффициентом *K*: 1, 2 – пороги пробоя наносекундными электрическими импульсами, 3 – пороги пробоя наносекундными лазерными импульсами, 4 – пороги пробоя пикосекундными лазерными импульсами, 5 – пороги лучевого разрушения пикосекундными и фемтосекундными лазерными импульсами

Как свидетельствует рис. 3, для хлорида натрия нет полного согласия порогов лучевого пробоя (прямая 3) и пробоя в электрическом поле (прямая 2). Пороги лазерного пробоя ниже.

На рис. 3 видно, что в хлориде натрия зависимость порога лазерного разрушения от длительности лазерного импульса (в диапазоне 10 нс > $\tau \ge 80$ фс) может быть аппроксимирована рядом прямых с разным угловым коэффициентом. Можно выделить 3 участка с различным значением *K*: первый – 10 нс $\ge \tau \ge 800$ пс, второй – 800 пс $\ge \tau \ge 30$ пс и третий – 30 пс > $\tau \ge 80$ фс.

Границы указанных участков располагаются у хлорида натрия, согласно рис. 3 и табл. 3, в области 0.8 нс и 30 пс.

Каждый участок на зависимости порога разрушения прозрачных диэлектриков от длительности лазерного или электрического импульса может давать информацию о преобладающем механизме разрушения, работающем при данной длительности импульсов.

На участке 1 (рис. 1) это может быть лазерное разрушение, связанное с температурными напряжениями при неоднородном нагревании за счет малого остаточного поглощения излучения [9]; на участке 1 (рис. 3) – механический разрыв среды электрическим полем, например, по причине появления высоких давлений за счет электрострикции [4]; на участке 2 (рис. 1) и участке 2, 3 (рис. 3) – разрушение лавиной (лавинами) электронов за счет ударной ионизации [10]; на участке 3 (рис. 1), участке 1 (рис. 2) и участке 4 (рис. 3) – тепловой взрыв включений [1]; наконец, на последнем участке рис. 2 и рис. 3 – абляция [2].

В работе [1] высказано предположение о связи преобладающего механизма разрушения плавленого кварца и параметра *n*. В подтверждение этого можно привести табл. 4, где указаны округленные значения *n* для каждого диапазона длительности лазерных импульсов.

Таблица 4

Характерный параметр в случае лазерного разрушения ионных кристаллов и плавленого кварца

Диэлектрик	Параметры			
Хлорид натрия	τ	10 нс ≥ т ≥ 800 пс	800 пс > τ ≥ 30 пс	30 пс > τ ≥ 80 фс
	п	~1/2	~3/4	~1/4
Плавленый кварц	τ	40 нс ≥ т ≥ 3 нс	3 нс > τ ≥ 5 пс	5 пс > τ ≥ 16 фс
	n	~1/2	~3/4	~ -1/4

Поскольку зависимость порогов пробоя от длительности импульса поля в случае воздействия наносекундными электрическими импульсами и наносекундными лазерными импульсами описывается практически одним и тем же значением K(0.32) и n(0.36), есть основание полагать, что в обоих случаях преобладающим является один и тот же механизм – разрушение диэлектрика лавиной (лавинами) электронов за счет ударной ионизации [4].

Таким образом, преобладающий механизм пробоя прозрачных твердых тел (в т.ч. ионных кристаллов) в сильных электрических полях не остается постоянным, а определяется во многом длительностью импульса поля.

Работа поддержана в рамках базовой части госзадания Минобрнауки России КБГУ на 2014–2016 годы (проект 2014/54-2228).

Библиография

1. Маненков А.А. Проблемы физики взаимодействия мощного лазерного излучения с прозрачными твердыми телами в области сверхкоротких импульсов // Квантовая электроника. 2003. Т. 33, № 7. С. 639–644.

2. Savintsev A.P., Gavasheli D.Sh., Gavasheli Yu.O. Study of Breakdown Mechanism of Fused Quartz by Focused Laser Beam // Physics of Extreme States of Matter – 2011, 2011. P. 43–44.

3. Савинцев А.П., Гавашели Д.Ш., Гавашели Ю.О. К вопросу о пробое плавленого кварца сфокусированными лазерными пучками // Мат. III Межд. научно-технической конф. «Микро- и нанотехнологии в электронике». Нальчик: КБГУ, 2010. С. 97–99.

4. Воробьев А.А., Воробьев Г.А. Импульсный пробой твердых диэлектриков // Известия ТПИ. 1958. Т. 95. С. 3–15.

5. Савинцев А.П. Пороги пробоя щелочно-галоидных кристаллов и стекла под действием наносекундных импульсов // Физика экстремальных состояний вещества – 2005, 2005. С. 34–36.

6. Сверхкороткие световые импульсы / под ред. С.М. Шапиро. М.: Мир, 1981. 480 с.

7. Савинцев А.П. Оптическое повреждение поверхности хлоридов натрия и калия фемтосекундными лазерными импульсами // Письма в ЖТФ. Т. 34. Вып. 3. 2008. С. 66–69.

8. Савинцев А.П. Ионные диэлектрики в поле фемтосекундных лазерных импульсов // Физика экстремальных состояний вещества – 2005, 2005. С. 32–34.

9. Рэди Дж. Действие мощного лазерного излучения / под ред. С.И. Анисимова. М.: Мир, 1974. 468 с.

10. Келдыш Л.В. Кинетическая теория ударной ионизации в полупроводниках // ЖЭТФ. 1959. Т. 37, № 3. С. 713–727.

РІС МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНО-ПЛАЗМЕННОГО УСКОРЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ: ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ, РЕАЛИЗОВАННЫХ В КОДАХ LAPLAC И WAKE-EXI

*Баранов В.Е.¹, Пугачев Л.П.¹, Андреев Н.Е.^{1,2}, Левашов П.Р.^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН ² Московский физико-технический институт

*baranov.victor.27@gmail.com

Разработаны модель и пакет программ WAKE-EXI для описания и трехмерного (3D) моделирования в цилиндрически симметричной геометрии внешней инжекции и ускорения ультрарелятивистских электронных сгустков в сильно нелинейной кильватерной волне, возбуждаемой релятивистскиинтенсивным лазерным импульсом в плазменном волноводе. Проведенные тестовые расчеты лазерноплазменного ускорения электронов указывают на адекватность модели и эффективность ее реализации комплексом программ WAKE-EXI.

Ключевые слова: лазерно-плазменные взаимодействия, лазерно-плазменное ускорение электронов.

PIC MODELLING OF LASER-PLASMA ACCELERATION OF ELECTRONS: VERIFICATION OF MODELS FROM BY CODES LAPLAC AND WAKE-EXI

Baranov V.E.¹, Pugachev L.P.¹, Andreev N.E.^{1,2}, Levashov P.R.^{1,2}

¹Joint Institute for High Temperatures RAS ²Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

The model and program package WAKE-EXI were developed for 3D modelling of acceleration of ultrarelativistic electron bunches externally injected into the highly nonlinear plasma wave, wherein the plasma wave is excited by a relativistically intense laser pulse in the plasma channel. Carried out test calculations of laser plasma electron acceleration indicate the adequacy of the model and efficiency of its realization in the program package WAKE-EXI.

Keywords: laser-plasma interactions, laser-wakefield electron acceleration.

Задачи исследования

Прогресс и использование лазерно-плазменных ускорителей [1–3] во многих приложениях значительно зависит от возможности обеспечивать получения квазимоноэнергетического ускорения коротких электронных сгустков до высоких энергий [4]. Одной из возможностей создания стабильного и контролируемого ускорения электронов является внешняя инжекция электронных сгустков в кильватерное поле, возбуждаемое в умеренно нелинейном режиме коротким интенсивным лазерным импульсом, распространяющимся в волноводных структурах, таких как плазменный канал [5] или газонаполненный капиллярный волновод [6, 7]. Но доступные на текущий момент мощности коротких лазерных импульсов достигают уже петаваттного диапазона в единичном выстреле, и современные разработанные лазеры субпетаваттного и петаваттного класса позволяют генерировать в докритической плазме сильно нелинейные плазменные волны [8]. Такие волны могут быть использованы для более эффективного высокоградиентного лазерно-плазменного ускорения (LWFA) внешне инжектированных электронных сгустков энергий, превышающих 1 ГэВ. Поэтому исследование внешней инжекции электронных сгустков в сильно нелинейную плазменную волну очень важно для создания будущих лазерно-плазменных ускорителей. Для сравнения с результатами теоретического анализа необходимо проведение полномасштабного численного моделирования в трехмерной геометрии (3D) внешней инжекции, а также захвата и ускорения электронных сгустков сильно нелинейной плазменной волной, возбуждаемой релятивистски-интенсивным лазерным импульсом.

Результаты исследования

Разработана модель и реализован пакет программ для численного моделирования внешней инжекции электронных сгустков в сильно нелинейную плазменную волну и их дальнейшего захвата и ускорения в волне. Разработанный программный пакет WAKE-EXI (WAKE for External Injection) открывает возможность для исследования трехмерной (3D) динамики электронных сгустков, включая захват, сжатие и ускорение в сильно нелинейном режиме [9, 10]. Для расчета нелинейного распространения лазерного импульса и возбуждения кильватерных полей в трехмерной цилиндрически симметричной геометрии применена модель, использующая усреднение по высокой частоте лазерного импульса и реализованная в коде WAKE [10]. Для описания самосогласованной динамики ускоряемого сгустка электронов при его внешней инжекции и учете обратного влияния заряда сгустка на ускоряющее кильватерное поле, возбуждаемое лазерным импульсом, разработан и реализован модуль, использующий метод частиц в ячейках (PIC) и осуществляющий моделирование захвата и ускорения сгустка электронов в комплексе с кодом WAKE.

В разработанной модели и программном пакете WAKE-EXI предполагается, что электроны сгустка являются ультрарелятивистскими частицами и двигаются вдоль оси Z со скоростью v_Z , близкой к скорости света. Компоненты электрического и магнитного полей и силы, действующие на ускоряемые электроны сгустка, выражены через кильватерный потенциал в цилиндрически симметричной геометрии [3]: $\psi(\xi, \rho)$, где $\xi = k_{p0}(z - ct)$ и $\vec{\rho} = k_{p0}\vec{r_{\perp}}$ – сопутствующие безразмерные переменные, $k_{p0} = \omega_{p0}/c = (4\pi e^2 N_0/m)^{1/2}/c$ – нормированный обратный пространственный масштаб, $\vec{r_{\perp}} = \{x, y\} = r\{\cos\varphi, \sin\varphi\}$ – радиус-вектор в радиальном направлении, e и m – заряд и масса электрона, соответственно, C скорость света в вакууме и N_0 – невозмущенная электронная плазменная плотность на оси сгустка: $N_0 = n_0(r = 0)$. Динамика электронного сгустка под действием лазерного кильватерного поля и самосогласованных электромагнитных полей, возникающих из-за конечного заряда сгустка, рассчитана в Декартовой системе координат для корректного описания распределения поперечных импульсов и эмиттанса сгустка, как это сделанов коде LAPLAC (LAser PLasma ACceleration) [11, 12].

Для описания эффекта нагрузки (обратного влияния заряда сгустка на кильватерное поле) была выбрана оптимальная схема аппроксимации плотности сгустка на расчетную сетку. Для этой цели мы использовали двумерную (2D) схему пространственного взвешивания заряда частицы в две ближайшие «кольцевые» ячейки с помощью PIC метода [9].

В этой статье верификация программного пакета WAKE-EXI, разработанного для лазерноплазменного ускорения внешне инжектированных электронных сгустков в сильно нелинейном режиме, представлена сравнением с результатами моделирования в коде LAPLAC, полученными при выполнении условия его применимости (умеренно нелинейный режим LWFA).

Первым этапом была проведена верификация моделирования возбуждения лазерного кильватерного поля в умеренно нелинейном режиме, когда результаты обоих кодов, WAKE [10] и LAPLAC [11, 12], должны совпадать для достаточно широких (в сравнении с глубиной плазменного скин-слоя k_{p0}^{-1}) лазерных импульсов. Для этой цели был выбран широкий гауссовский лазерный импульс для данной плотности разреженной плазмы $n_0 = 10^{17} c M^{-3}$ с длиной волны $\lambda_L = 0.8 \ MKM$ с безразмерной амплитудой

$$a(\xi,\rho) = a_0 \exp\left(-\frac{(\xi-\xi_0)^2}{(\omega_p t_0)^2} - \frac{\rho^2}{(k_{p0} r_0)^2}\right),\tag{1}$$

где $k_{p0}r_0 = 5.3$, амплитуда лазерного импульса $a_0 = 0.5$ и длительность импульса $\omega_p t_0 = 1.0$. Моделирование было проведено как в однородной плазме, так и в плазменном канале с параболическим профилем плотности $n_e(r) = n_0 (1 + r^2 / R_{ch}^2)$, где $R_{ch} = 305 \ M\kappa M$ ($k_{p0}R_{ch} = 18.2$) В частности, результаты моделирования в плазменном канале проиллюстрированы на рис. 1.



Рис. 1. Огибающая амплитуды лазерного импульса (пунктирная линия – LAPLAC; кружки – WAKE) и максимум кильватерного поля на оси (сплошная линия – LAPLAC; квадраты – WAKE) в процессе распространения в плазменном канале $a_0 = 0.5$. Другие параметры расчета указаны в тексте Следующим этапом была проведена проверка программных модулей для ускорения частиц в кильватерных полях в обоих кодах – LAPLAC и WAKE-EXI – под действием заданной вынуждающей силы. Для простоты была выбрана гармоническая сила, распространяющаяся со скоростью света. Профиль поперечных и продольных сил был выбран таким образом, чтобы сымитировать движение под действием линейного кильватерного поля. Профили продольной и поперечной составляющих сил, действующих на частицы, изображены соответственно на рис. 2(а) и рис. 2(b). Сгусток тестовых частиц, как указано на рис. 2(а), помещён на границе фокусирующей фазы.



Рис. 2. Профиль: a) продольной составляющей, b) поперечной составляющей заданных тестовых сил, действующих на тестовые частицы сгустка

Так как в программном коде LAPLAC используется схема типа предиктор-корректор для расчёта динамики частиц, в программном комплексе WAKE-EXI был также использован предиктор-корректор для решения уравнения движения частиц. Для проверки корректности предиктор-корректора программные коды LAPLAC и WAKE-EXI были модифицированы – был убран предиктор-корректор для решения уравнений движения частиц. С помощью модифицированных кодов LAPLAC (nppc) и WAKE-EXI (nppc) (No Particle Predictor Corrector), а также LAPLAC и WAKE было проведено численное моделирование ускорения тестовых частиц в описанных выше заданных тестовых линейных кильватерных полях.

На рис. 3 приведена поперечная динамика отдельно взятой частицы во всех четырех кодах.





Следующим шагом была проведена верификация корректности реализованного пакета программ WAKE-EXI при численном моделировании динамики тестовых частиц, внешне инжектированных в максимум ускоряющей силы в умеренно нелинейную кильватерную волну, возбужденную интенсивным лазерным импульсом. Сравнение нового пакета программ было проведено с отлаженным и проверенным

ранее пакетом программ LAPLAC, используемым при условии возбуждения слабо нелинейных или умеренно нелинейных плазменных волн.

Инжектированный сгусток из 10⁶ тестовых частиц (без учета собственных электромагнитных полей, т.е. без учета эффекта нагрузки) имел Гауссовский профиль плотности с поперечной дисперсией $\sigma_{\perp} = 23.6 \ \text{мкм}$, продольной дисперсией, энергией инжекции $E_{inj} = 10 \ \text{МэB}$. Параметры лазерного импульса: $a_0 = 0.3$, $k_{p0}r_0 = 10$, $\omega_p t_0 = 0.5$. Плазма в расчете была однородной с плотностью $n_0 = 1.12 \times 10^{17} \ \text{сm}^{-3}$, что отвечает фазовому гамма-фактору $\gamma_{ph} = 100 \ (\gamma_{ph} = \sqrt{1 - V_{ph}^2 / c^2}, \ \text{где } V_{ph} - \text{фазо$ вая скорость кильватерной волны, <math>c — скорость света в вакууме).



Рис. 4. Средние характеристики сгустка тестовых частиц при распространении в кильватерной волне как функции длины ускорения L_{acc}, нормированной на длину дефазировки L_{ph} = 2πk_p⁻¹γ_{ph}², полученные моделированием кодом LAPLAC (точки) и WAKE-EXI (сплошная линия):
 а) средняя энергия, b) среднеквадратичная длина, с) отношение числа захваченных электронов к начальному числу электронов, d) среднеквадратичный радиус. Параметры инжектированного сгустка,

лазерного импульса и плазмы указаны в тексте

Следующим шагом была проверка корректности реализованного кода WAKE-EXI при учете самосогласованной динамики (включая эффект нагрузки) электронного сгустка, внешне инжектированного в умеренно нелинейную кильватерную волну, возбужденную интенсивным лазерным импульсом в однородной плазме.

Сравнение результатов, полученных моделированием в новом программном пакете, как и в предыдущем тестировании, было проведено с результатами отлаженного программного пакета LAPLAC. Для проведения сравнения заряд электронного сгустка был выбран таким образом, чтобы самосогласованное кильватерное поле: от лазерного импульса и собственное поле от сгустка, было слабо нелинейным, т.е. чтобы поперечный лапласиан от самосогласованного безразмерного кильватерного потенциала оставался по-прежнему малым $|\Delta_{\perp}\psi| \ll 1$ (что является условием применимости кода LAPLAC).

Электронный сгусток с зарядом $q_{inj} = 5nK\pi$, с гауссовским профилем плотности и энергией инжекции, как в предыдущем расчете ($\sigma_{\perp} = 23.6 \ M\kappa M$, $\sigma_{Z} = 31.8 \ M\kappa M$, $E_{inj} = 10 \ M\Im B$), был инжектирован в максимум ускоряющей силы кильватерного поля, возбуждаемого лазерным импульсом с параметрами из предыдущего расчета ($a_0 = 0.3$, $k_{p0}r_0 = 10$, $\omega_p t_0 = 0.5$) в однородной плазме с плотностью $n_0 = 1.12 \times 10^{17} cm^{-3}$ ($\gamma_{ph} = 100$).



Рис. 5. Средние характеристики электронного сгустка при распространении в кильватерной волне, как функции длины ускорения L_{acc}, нормированной на длину дефазировки L_{ph} = 2πk_p⁻¹γ_{ph}², полученные моделированием кодом LAPLAC (сплошная линия) и WAKE-EXI (точки): а) средняя энергия;
b) среднеквадратичная длина; с) отношение числа захваченных электронов к начальному числу электронов; d) среднеквадратичный радиус. Параметры инжектированного сгустка, лазерного импульса и плазмы указаны в тексте

Обсуждение результатов

Из рис. 1 видно, что возбуждение слабо нелинейной кильватерной волны, широкой в сравнении с глубиной плазменного скин-слоя k_{p0}^{-1} (когда поперечный Лапласиан кильватерного потенциала мал, $|\Delta_{\perp}\psi| << 1$, что является условием применимости кода LAPLAC), описывается одинаково в обоих кодах – WAKE-EXI и LAPLAC – с очень высокой степенью точности (~ 0.15 %).

Из рис. 3 по поперечной динамике отдельно взятой тестовой частицы сгустка, распространяющегося в тестовом линейном кильватерном поле, видно, что частица испытывает характерные бетатронные колебания, и характер колебаний полностью совпадает в кодах LAPLAC и WAKE-EXI (такое же полное совпадение наблюдается и в продольной динамике, и в динамике всего сгустка в целом). Результаты на рис. 3 представлены для моделирования с таким шагом по времени, при котором наступает сходимость результатов в программных кодах LAPLAC и WAKE-EXI (с использованием схемы типа предикторкорректор для решения уравнений движения частиц). Результаты моделирования с тем же шагом по времени в кодах LAPLAC (пррс) и WAKE-EXI (пррс) также представлены на рис. 3. Результаты моделирования отличаются, так как при таком шаге по времени ещё не достигается сходимость для схемы расчета без использования предиктор-корректора. Проверено, что использование предиктор-корректора помогает на порядок увеличить шаг по времени в расчетах, что позволяет производить численное моделирование лазерно-плазменного ускорения электронных сгустков программным пакетом WAKE-EXI на персональных ПК.

Как видно из рис. 4а–d, представленные средние характеристики электронного сгустка, полученные при моделировании ускорения сгустка в приближении тестовых частиц в умеренно-нелинейных кильватерных полях в однородной плазме, одинаковы в обоих кодах: разработанном WAKE-EXI и отлаженном ранее LAPLAC.

Финальное тестирование, отвечающее полностью самосогласованному расчету с учетом эффекта нагрузки сгустка конечного заряда и динамики лазерного импульса, представленное на рис. 5а-d сред-

ними характеристиками электронного сгустка, ускоряемого в умеренно нелинейной кильватерной волне, возбужденной в однородной плазме лазерным импульсом, демонстрируют очень хорошее совпадение результатов моделирования разработанного кода WAKE-EXI и отлаженного ранее кода LAPLAC на протяжении полной длины ускорения.

Выводы

Разработаны модель и пакет программ WAKE-EXI на базе кодов LAPLAC и WAKE для описания и трехмерного (3D) моделирования в цилиндрически симметричной геометрии внешней инжекции и ускорения ультрарелятивистских электронных сгустков в сильно нелинейной кильватерной волне, возбуждаемой релятивистски-интенсивным лазерным импульсом в плазменном волноводе. Проведённое полномасштабное сравнение результатов моделирования в цилиндрически симметричной геометрии внешней инжекции и ускорения ультрарелятивистских электронных сгустков в пределе умеренно нелинейной кильватерной волны, возбуждаемой релятивистски-интенсивным лазерным импульсом в плазменном волноводе, полученных с помощью разработанного кода WAKE-EXI, с результатами моделирования, полученными в отлаженном коде LAPLAC, показывает, что разработанный пакет программ WAKE-EXI может быть использован для исследования внешней инжекции электронных сгустков в сильно нелинейные плазменные волны, возбужденные релятивистски-интенсивными короткими лазерными импульсами для высокоградиентного ускорения электронов до энергий в несколько сотен ГэВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований по стратегическим направлениям Президиума РАН №1 «Фундаментальные проблемы математического моделирования» и гранта ГЗ №522.

Библиография

1. Esarey E., Schroeder C.B., Leemans W.P. Physics of laser-driven plasma-based electron accelerators // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81. P. 1229–1285.

2. Esarey E., Sprangle P., Krall J., Ting A. Overview of plasma-based accelerator concepts // IEEE Trans.Plasma Sci. 1996. V. 24. No 2. P. 252–288.

3. Andreev N.E., Gorbunov L.M. Laser-plasma acceleration of electrons // Physics–Uspekhi. 1999. V. 42. No 1. P. 49–53.

4. Schlenvoigt H.-P., Haupt K., Debus A., Budde F., J^{*}ackel O., Pfotenhauer S., Schwoerer H., Rohwer E., Gallacher J.G., Brunetti E., Shanks R.P., Wiggins S. M., Jaroszynski D.A. A compact synchrotron radiation source driven by a laser-plasma wakefield accelerator // Nature Phys. 2008. V. 4. P. 130–133.

5. Spence D.J., Hooker S.M. Investigation of a hydrogen plasma waveguide // Phys. Rev. E63. 2001. 015401.

6. Cros B., Courtois C., Matthieussent G., Di Bernardo A., Batani D., Andreev N., Kuznetsov S. Eigenmodes for capillary tubes with dielectric walls and ultraintense laser pulse guiding // Phys. Rev. E 65. 2002. 026405.

7. Osterhoff J., et al. Generation of Stable, Low-Divergence Electron Beams by Laser-Wakefield Acceleration in a Steady-State-Flow Gas Cell // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. No 8. 085002.

8. Pukhov A., Meyer-ter-Vehn J. Laser wake field acceleration: the highly non-linear broken-wave regime // Appl. Phys. B. 2002. V. 74. No 4. P. 355–361.

9. Pugachev L.P., Andreev N.E., Baranov V.E., Levashov P.R., Mora P. PIC simulation of laser wakefield acceleration of electrons in ponderomotive approximation // Book of Abstracts. XXVI International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, 2011. P. 31.

10. Mora P., Antonsen T. Kinetic modeling of intense, short laser pulses propagating in tenuous plasmas // Phys. Plasmas. 1997. V. 4. No. 1. P. 217–229.

11. Andreev N.E., Kuznetsov S.V. Laser Wakefield Acceleration of Finite Charge Electron Bunches // IEEE Trans. Plasma Sci. 2008. V. 36. No. 4. P. 1765–1772.

12. Andreev N.E., Baranov V.E., Cros B., Fortov V.E., Kuznetsov S.V., Maynard G., Mora P. Electron bunch compression and acceleration in laser wakefield // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2011. V. 653. No 1. P. 66–71.

МНОГОФОТОННЫЕ ЭФФЕКТЫ СИЛЬНОГО ПОЛЯ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРОНОВ ВЫСОКОЙ ЭНЕРГИИ С ОРИЕНТИРОВАННЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

Хоконов М.Х.

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова

khokon6@mail.ru

Развита каскадная теория многофотонного характера излучения электронов с энергиями выше 100 ГэВ, движущихся в сильных полях ориентированных кристаллов. Проводится анализ экспериментальных результатов в ЦЕРНе для кристалла кремния. Проанализированы границы применимости приближения постоянного поля.

Ключевые слова: сильные поля, ориентированные кристаллы, каскадные уравнения, многофотонный процесс.

STRONG FIELD MULTI-PHOTON EFFECTS IN INTERACTION OF HIGH ENERGY ELECTRONS WITH ORIENTED CRYSTALS

Khokonov M.Kh.

Kabardino-Balkarian State University

A cascade theory of multi-photon nature of radiation of electrons with above 100 GeV energies moving in strong fields of oriented crystals has been developed. An analysis of experimental data in CERN for silicon single crystal has been made. The ranges of applicability of constant field approximation have been analyzed.

Keywords: strong fields, oriented crystals, cascade equations, multi-photon processes.

Введение. При попадании быстрой заряженной частицы в кристалл, ориентированный главными кристаллографическими осями или плоскостями вдоль направления её движения, возникает эффект, называемый каналированием, который заключается в том, что частица при своём движении в кристалле не чувствует отдельных атомов мишени, а чувствует поле непрерывно заряженных атомных цепочек или плоскостей [1]. Движение частицы в таком ориентированном кристалле (ОК) можно описать непрерывным потенциалом, который получается путём «размазывания» потенциалов отдельных атомов вдоль соответствующей атомной цепочки или плоскости. Такой аксиально-симметричный потенциал атомной цепочки на расстоянии ρ от неё равен [1]:

$$U(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} V\left(r = \sqrt{\rho^2 + z^2}\right) \frac{dz}{d},$$
(1)

где V(r) – потенциал отдельного атома, d – расстояние между соседними атомами в атомной цепочке для заданного кристаллографического направления. Потенциал (1) называют непрерывным потенциалом Линдхарда. Электроны с энергиями E свыше сотни ГэВ чувствуют непрерывный потенциал атомных цепочек вплоть до углов относительно этих цепочек $\theta_{in} < 10^2 \theta_L$, где $\theta_L = (4Ze^2/dE)^{1/2}$ – критический угол Линдхарда [1], Z – атомный номер мишени, $E = \gamma mc^2$, $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ – Лоренц-фактор электрона со скоростью V.

Поперечная относительно атомной цепочки энергия частицы, движущейся в непрерывном потенциале, является интегралом движения, т.е. $E_{\perp} = const$. Изменяться поперечная энергия может только в силу вторичных факторов, прежде всего таких, как многократное рассеяние электрона на тепловых колебаниях ядер кристалла или уменьшение поперечной энергии вследствие излучения фотона. Такие эффекты можно рассматривать как небольшое возмущение, накладываемое на движение в непрерывном потенциале. Для отрицательно заряженных электронов потенциал $U(\rho)$ отрицателен, что соответствует силе притяжения между электроном и атомной цепочкой, а поперечная энергия для связанных поперечных состояний отрицательна: $E_{\perp} < 0$. Такие электроны имеют финитные поперечные траектории и называются «каналированными электронами», тогда как электроны с инфинитными поперечными траекториями будем называть «квазиканалированными электронами».

Сила, действующая на электрон $F = |\nabla U(r)|$, имеет порядок $F \sim Ze \ daF \sim 102 - 103 \ \text{эB/Å}$ и приводит к интенсивному излучению электроном фотонов. Здесь a_F – параметр экранирования Томаса – Ферми. Для электронов с энергиями, превышающими 100 ГэВ, величина инвариантного параметра Швингера $\chi = \hbar F \gamma / (m^2 c^3)$ становится $\chi > 1$. Такие поля называют сильными. Таким образом, ориентированные кристаллы представляют собой естественный инструмент для изучения электромагнитных процессов в сильных внешних полях. Отдельный электрон, движущийся в таких сильных полях, может излучить множество жёстких фотонов за время своего взаимодействия с кристаллической решёткой. Поскольку все излучённые фотоны приходят в детектор почти одновременно, то экспериментально различить отдельные фотоны на данном этапе развития экспериментальных технологий практически невозможно. То есть информация о сечении излучения отдельного электрона не является непосредственно измеряемой величиной. Нами будет показано, что, несмотря на это обстоятельство, представляется возможным вычисление измеряемых вероятностных величин и функций распределения, характеризующих процесс излучения.

В настоящее время электромагнитные эффекты сильного поля в принципе могут наблюдаться в лабораторных условиях и при движении ультрарелятивистских электронов в поле тера- и петаваттных лазеров [3–7]. В настоящей работе мы ограничимся случаем ОК.

Сечение излучения. Для электронов с энергиями, превышающими 50–100 ГэВ, движущимися в поле непрерывного потенциала атомной цепочки (1), можно приближённо считать, что действующее на электрон поле мало меняется на длине формирования излучения [8], т.е. спектр излучения можно рассчитывать по формулам, справедливым для постоянно внешнего поля. Приближение постоянного поля (ППП) сводится в нашем случае к известным формулам для синхротронного излучения с учётом эффекта квантовой отдачи фотона при излучении и влияния спина [9, 11].

Дифференциальная вероятность излучения фотона с энергией ω электроном с энергией E за единицу времени в ППП описывается квантово-механической формулой [9, 11]:

$$v_{\omega}(E) = \frac{\alpha}{\pi\sqrt{3}\hbar\gamma^2} \left[2K_{2/3}(\xi) - \int_{\xi}^{\infty} K_{1/3}(y)dy + \frac{u^2}{1-u}K_{2/3}(\xi) \right]$$
(2)

$$= \frac{\alpha}{\pi \hbar \gamma^2} \int_0^\infty \left[\frac{9 + 36x^2 + 16x^4}{9 + 12x^2} + \frac{u^2}{1 - u} \left(1 + \frac{2x^2}{3} \right) \right] e^{R(x)} \frac{dx}{Y(x)},$$
(3)

где аргумент экспоненциальной функции есть

$$R(x) = -\xi \left(1 + 4x^2 / 3 \right) Y(x),$$

где $\alpha = 1/137$, $u = \omega/E$,

$$\xi = \frac{2u}{3\chi(1-u)},$$

$$Y(x) = \left(1 + x^2/3\right)^{1/2}.$$

Формулы (2)–(3) переходят в известные классические формулы для синхротронного излучения при малых значениях параметра поля χ . Именно квантовыми эффектами в излучении нельзя пренебречь уже при $\chi > 0.1$. Наше представление (3) [11] гораздо удобнее для практических расчетов, чем стандартное выражение (2), поскольку оно не содержит специальных функций и представлено в виде быстро сходящегося интеграла.

Многофотонный процесс. Каскадный процесс последовательного излучения большого числа фотонов (в данном случае жёстких гамма-квантов) полностью определяется заданием дифференциальной вероятности излучения фотона с энергией, лежащей в интервале ($\omega, \omega + d\omega$), электроном с энергией E за бесконечно малый промежуток времени $v_{\omega}(E)d\omega dt$. Величина $v_{\omega}(E)$ есть дифференциальная вероятность излучения за единицу времени. Функцию распределения электронов по потерям энергии в момент времени t будем характеризовать величиной $W_{\omega}(E_0,t)d\omega$, которая даёт вероятность того, что потери энергии электрона с начальной энергией E_0 к моменту времени t лежат в интервале $\omega, \omega + d\omega$.

Пройденный при этом электроном путь равен z = Vt (в нашем случае можно считать, что скорость электрона совпадает со скоростью света, $V \approx C$).

Функция распределения $W_{\omega}(E_0,t)d\omega$ нормирована:

$$\int_{0}^{E_0} W_{\omega}(E_0, t) d\omega = 1 \tag{4}$$

и удовлетворяет начальному условию $W_{\omega}(E_0, t = 0) = \delta(\omega)$. Непосредственно измеряемой в экспериментах величиной является спектральная интенсивность излучения (см., например, [12, 13]):

$$I_{\omega}(E_0, t) = \omega W_{\omega}(E_0, t) .$$
⁽⁵⁾

Средние полные потери энергии на излучение есть

$$\Delta E(t) = \int_0^{E_0} I_{\omega}(E_0, t) d\omega \,. \tag{6}$$

Временная эволюция функции распределения $W_{\omega}(E_0,t)d\omega$ описывается кинетическим уравнением каскадного типа:

$$\frac{\partial W_{\omega}(E_0,t)}{\partial t} = \int_0^{\omega} W_{\omega-\mu}(E_0,t) v_{\mu}(E_0-\omega+\mu,t) d\mu$$

$$- \int_0^{\omega} W_{\omega}(E_0,t) v_{\mu}(E_0-\omega,t) d\mu,$$
(7)

где в дальнейшем мы будем рассматривать случай, когда сечение излучения за единицу времени $v_{\omega}(E)$ не зависит от t.

Решение уравнения (7) может быть представлено как сумма парциальных вкладов членов, соответствующих излучению ровно *k* фотонов:

$$W_{\omega}(E_0,t) = \sum_{k=0}^{\infty} W_{\omega}^{(k)}(E_0,t), \qquad (8)$$

где $W^{(0)}_{\omega}(E_0,t)$ есть вероятность того, что за временной интервал (0,t) не произойдёт ни одного акта излучения.

Полное сечение излучения за единицу времени есть

$$\nu(E) = \int_0^E \nu_{\omega}(E) d\omega \,. \tag{9}$$

Мы будем предполагать, что полное сечение излучения не зависит от энергии электрона, т.е. $v \equiv v_0 = v(E_0)$. Такое приближение справедливо при энергиях, больших 100 ГэВ.

Пусть $g_{\omega}^{(1)}(E)$ есть дифференциальная плотность вероятности того, что энергия излучённого фотона есть ω :

$$g_{\omega}^{(1)}(E) = v_{\omega}(E) / v_0.$$
 (10)

Введём вероятности $g_{\omega}^{(k)}(E)d\omega$ того, что полная энергия k излучённых фотонов электроном с начальной энергией E_0 лежит в интервале ω и $\omega + d\omega$. Эти вероятности нормированы на единицу:

$$\int_0^E g_\omega^{(k)}(E) d\omega = 1 \tag{11}$$

и удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$g_{\omega}^{(k)}(E_0) = \int_0^{\omega} g_{\omega-\mu}^{(k-m)}(E_0 - \mu) g_{\mu}^{(m)}(E_0) d\mu, \qquad (12)$$

где m < k.

Вероятность $P_k(t)$ того, что в течение времени [0,t] излучится ровно k фотонов, определяется распределением Пуассона:

$$P_k(\xi_0) = \frac{\xi_0^k}{k!} e^{-\xi_0}, \qquad (13)$$

с $\xi_0 = v_0 t$. Функции $W^{(k)}_{\omega}(E_0, t)$, определяемые выражением (8), могут быть представлены в виде произведения $P_k(t)g^{(k)}_{\omega}(E_0)$. Для функции распределения по потерям энергии получаем:

$$W_{\omega}(E_0,t) = \sum_{k=0}^{\infty} P_k(t) g_{\omega}^{(k)}(E_0).$$
(14)

Это выражение представляет собой решение уравнения (7) с не зависящим от времени дифференциальным сечением излучения и с не зависящим от времени и энергии полным сечением излучения.

Численные расчёты. Применим полученные выше результаты к проблеме излучения электронов с энергиями, превышающими 100 ГэВ при их движении под малыми углами $\theta \sim \theta L$ к атомным цепочкам кристалла. В наших расчётах пренебрегается многократным рассеянием электронов на ядрах мишени и конкурирующим процессом радиационного уменьшения поперечной энергии. Движение электрона в аксиально симметричном потенциале $U(\rho)$ характеризуется двумя интегралами поперечного движе-

ния: поперечной энергией E_{\perp} и угловым моментом электрона относительно атомной цепочки μ .

Выражения (9)–(14) требуют определения начальной функции $g_{\omega}^{(1)}$ для однофотонной вероятности. В ППП эта величина зависит только от мгновенного расстояния до атомной цепочки ρ . Тогда выражение (10) с сечением излучения в виде (2), (3) следует усреднить по функции распределения электронов по поперечным координатам при фиксированных значениях E_{\perp} и μ . Для каналированных электронов с $E_{\perp} < 0$ это распределение имеет вид:

$$dw(E_{\perp}, \mu, \rho) = \frac{d\rho}{T(E_{\perp}, \mu)} \left[\frac{2m\gamma}{E_{\perp} - U(\rho) - \mu^2 / (2m\gamma\rho^2)} \right]^{1/2},$$
(15)

где $T(E_{\perp}, \mu)$ есть период поперечных радиальных колебаний, причём $\rho_{\min} < \rho < \rho_{\max}$, где значения ρ_{\min} и ρ_{\max} определяются равенством нулю знаменателя в подкоренном выражении (15).

В наших расчетах непрерывного потенциала $U(\rho)$ использовался потенциал отдельного атома в форме Дойля – Тёрнера [14] с усреднением по тепловым колебаниям атомов мишени.

Рис.1–2 показывают результаты расчётов спектров интенсивности излучения (5) для 150 ГэВ-ных электронов, проходящих через кристалл кремния с толщиной 500 мкм, ориентированный вдоль направления <110> по отношению к электронному пучку. Критический угол каналирования в данном случае θ_L =36.6 микрорадиан (здесь Z=14, d=4 Å). На рисунке представлены экспериментальные результаты [15]. Спектры излучения показаны в единицах интенсивности излучения в аморфной мишени: Ez/L_{rad} , где Z – толщина кристалла и L_{rad} – радиационная длина для аморфной среды ($L_{rad} \approx 9.5$ см для кремния). Таким образом, по оси ординат на рис. 1 и 2 показано превышение интенсивности излучения в ОК соответствующей величины для аморфной мишени с той же толщиной.



Рис. 1. Спектр интенсивности излучения электронов с энергией 150 ГэВ в кристалле кремния <110>. Углы влёта электронов в кристалл лежат в интервале [0–9] мкрад. Сплошная кривая – теоретический расчёт, символы соответствуют экспериментальным результатам [15]

Из рис. 1 следует, что при малых углах влёта электронов в кристалл $\theta_{in} < \theta_L$ каскадная теория с ППП хорошо согласуется с экспериментом. ППП, однако, даёт в 3–4 раза завышенный результат для больших углов влёта $\theta_{in} >> \theta_L$ (рис. 2). Кривые на рис. 2 соответствуют углам влёта равномерно распределённым от нуля до $\theta_{in} \sim 550 \ \theta_L$. Таким образом, можно заключить, что ППП (2)–(3) обеспечивает хорошую точность вычислений, когда электроны движутся почти параллельно атомной цепочке, т.е. $\theta_{in} \sim \theta_L$. Для больших углов влёта, когда возрастает поперечная скорость электронов, действующее на электрон поле атомной цепочки нельзя уже считать постоянным (рис. 2).



Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для угловой расходимости электронов 2 млрад

Выводы. Эффекты излучения электронов с энергиями, превышающими 100 ГэВ в сильных полях ОК, могут адекватно описываться в рамках каскадной теории. Приближение постоянного поля даёт хорошие количественные результаты для малых углов влёта относительно основных кристаллографических направлений $\theta_{in} < \theta_L$. При больших углах влёта следует пользоваться более точными выражениями для сечений излучения, учитывающими эффекты неоднородности действующего на электроны внешнего поля [16].

Работа поддержана в рамках базовой части госзадания Минобрнауки России КБГУ на 2014–2016 годы № 2262.

Библиография

1. Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1965. V. 34. No.14. P. 1–64.

2. Uggerhoj U. The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields // Reviews of Modern Physics. 2005. V.77. P. 1131–1171.

3. Bula C., McDonald K.T., Prebys E.J., et al. Observation of nonlinear effects in compton scattering // Phys. Rev. Lett. 1996. V.76. P. 3116–3119.

4. Di Piazza A., Hatsagortsyan K.Z. and Keitel C.H. Quantum radiation reaction effects in multiphoton compton scattering // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 105. No. 22. P. 220403–220404.

5. Khokonov M.Kh., Bekulova I.Z., Keshev R.M. Radiation spectrum of relativistic electrons in the high intensity limit of the external laser field // Physics of Extreme States of Matter-2009. Ed. by Fortov V.E. Chernogolovka: IPCP RAS, 2009, P. 25–28.

6. Khokonov M.Kh., Bekulova I.Z. Non-linear effects in the field of intense lasers and radiation of relativistic electrons // Physics of Extreme States of Matter-2011 Ed. by Fortov V.E. Chernogolovka: IPCP RAS, 2011. P. 14–17.

7. Хоконов А.Х., Хоконов М.Х., Киздермишов А.А. Перспективы получения фотонов высоких энергий ультрарелятивистскими электронами в поле тераваттных лазеров и в кристаллах // ЖТФ. 2002. Т. 72. В. 11. С. 69–75.

8. Хоконов М.Х., Бекулова И.З. Длина формирования процессов в постоянном внешнем поле при высоких энергиях // ЖТФ. 2010. Т. 80. В. 5. С. 136–139.

9. Клепиков Н.П. Изучение фотонов и электрон-дырочных пар в магнитном поле // ЖЭТФ. 1954. Т. 26. С. 19–34.

10. Байер В.Н., Катков В.М., Страховенко В.М. Взаимодействие электронов и фотонов высоких энергий с кристаллами // УФН. 1989. Т. 159. С. 455–491.

11. Хоконов М.Х. Каскадные процессы потерь энергии на излучение жёстких фотонов // ЖЭТФ. 2004. Т. 126, № 4. С. 799–818.

12. Medenwaldt R.R., Moller S.P., Tang-Peterson S., et al. Investigations of the coherent hard photon yields from (50-300) GeV/c electrons / positrons in the strong crystalline fields of diamond, silicon and germanium crystals // Phys. Lett. B. 1990. V. 242. P. 517–523.

13. Kirsebom K., Medenwaldt R., Mikkelsen U., et al. Experimental investigation of photon multiplicity and radiation cooling for 150 GeV electrons/positrons traversing diamond and Si crystals // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 119. P. 79–95.

14. Doyle R.A., Turner R.S. Relativistic Hartry-Fock X-ray and electron scattering factors // Acta Crystallogr. A. 1968. V. 24. P. 390–397.

15. Medenwaldt R., Moller S.P., Sorensen A.H., et. al. Hard-photon emission from 150-GeV electrons incident on Si and Ge single crystals near axial directions // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 2827–2829.

16. Khokonov M.Kh., Nitta H. A standard radiation spectrum of relativistic electrons: beyond synchrotron approximation // Phys. Rev. Lett. 2002. No.9. V.89. P. 094801–094804.

ДВУХКАСКАДНЫЙ ВЗРЫВОМАГНИТНЫЙ ГЕНЕРАТОР С ОТКЛЮЧЕНИЕМ ТОКА ПЕРВИЧНОГО КОНТУРА

*Шурупов А.В.¹, Дудин С.В.², Козлов А.В.¹, Минцев В.Б.², Фортов В.Е.¹, Завалова В.Е.¹, Леонтьев А.А., Шурупова Н.П.¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН ²Институт проблем химической физики РАН

*shurupov@fites.ru

Для получения в индуктивной нагрузке ~ 1 мкГн электрического импульса с крутым передним фронтом (фронт импульса тока не более 10 мкс), энергией на выходе ~ 100 кДж наиболее часто используется схема с использованием размыкающего ключа и переключением тока в нагрузку. Альтернативным решением может быть использование двухкаскадного взрывомагнитного генератора с перехватом магнитного потока (ВМГ ПП) с отключением тока первичного контура.

Представлены результаты экспериментальных исследований ВМГ ПП с отключением и без отключения тока первичного контура. Генераторы испытывались при работе на модельную нагрузку индуктивностью 1,16 мкГн. Экспериментальные исследования показали более высокую эффективность ВМГ ПП с отключением тока первичного контура по сравнению с ВМГ ПП без отключения тока первичного контура.

Ключевые слова: взрывомагнитный генератор, перехват магнитного потока.

TWO-STAGE EXPLOSIVE MAGNETIC GENERATOR WITH DISCONNECTING OF THE PRIMARY CIRCUIT CURRENT

Shurupov A.V.¹, Dudin S.V.², Kozlov A.V.¹, Mintsev V.B.,² Fortov V.E.¹, Zavalova V.E.,¹Leontyev A.A.¹, Shurupova N.P.¹

¹Joint Institute for High Temperatures RAS ²Institute of Problem of Chemical Physics RAS

The design with open switch and switch the load current is used most often to get in the inductive load of about 1 μ H the electric pulse with a steep leading front (front of the pulse voltage is not more than 3 μ s, the output energy of about 100 kJ). One of the alternatives is to use a two-stage explosive magnetic generator with magnetic flux trapping (EMG MFT) and a break of the primary circuit.

Results of experimental studies of EMG MFT with a break and without breaking the primary circuit are presented in the report. Generators tested at work on a model load inductance of 1.16 μ H. Experimental studies have shown that EMG MFT with a break of the primary circuit has a higher efficiency in comparison with the EMG MFT without breaking of the primary circuit.

Keywords: explosive magnetic generator, magnetic flux trapping.

1. Постановка задачи

Принцип работы взрывомагнитных генераторов с перехватом магнитного потока (ВМГ ПП) описан в работе [1]. Особенностью такого генератора является большой резерв энергии, заключенной в первичном контуре. После окончания работы обычного ВМГ генератора большая часть образованной энергии безвозвратно теряется. Однако ВМГ ПП дает возможность не только передать, но и усилить запасенную энергию, тем самым увеличить мощность генератора. Эти генераторы нашли широкое применение в области генерации быстро нарастающих импульсов тока, а также в качестве источника энергии для высокоимпедансных нагрузок. Их все чаще применяют в разработках источников сильноточных электронных пучков, рельсотронов, источников генерации импульсов высокого напряжения в системах для испытания энергетических объектов и т.п. [2–4]. Теоретическое исследование такого типа взрывомагнитных генераторов затруднено, так как не хватает знания целого ряда параметрических зависимостей. В связи со сказанным была поставлена задача экспериментального исследования работы генераторов с перехватом магнитного потока в двух перспективных электрических схемах – с отключением тока первичного контура и без отключения при близких исходных параметрах и параметрах нагрузки.

2. Принцип работы и цель исследований

Для выполнения поставленной задачи были разработаны и изготовлены двухкаскадные взрывомагнитные генераторы. В соответствии с принципом работы предусилительный каскад генератора увеличивал начальную энергию генератора. Обострительный каскад генерировал электрический импульс в нагрузке. Фотография генератора представлена на рис. 1, а его электрическая схема включения изображена на рис. 2. Для реализации разрыва первичного контура был применен *BP* – прерыватель тока.



Рис. 1. Общий вид ВМГ ПП: 1 – клемма присоединения источника начальной энергии, 2 – предусилительный каскад, 3 – дополнительный виток-замыкатель,

4 – импульсный динамический трансформатор обострительного каскада, 5 – нагрузка

На электрической схеме двухкаскадного генератора показано осуществление связи между предусилительным и обострительным каскадом методом перехвата магнитного потока. Начальный магнитный поток предусилителя (бустера) Φ_{10} создается при запитке соленоида L_B от конденсаторной батареи C_0 . В процессе работы предусилительного каскада магнитный поток $\Phi_1(t)=I_1(t)[L_1(t)+L_B]$ вытесняется в индуктивность первичного контура обострительного каскада $L_1(t)$. Таким образом, в момент полного вывода индуктивности первичный контур с током I_{10} имеет магнитный поток Φ_{10} , равный $\Phi_{10}=I_{10}\cdot L_{10}$. Замыкание ключей K_1 , K_2 и K_3 осуществляется лайнером. Первый виток спирали вторичного контура выделен отдельно и представлялет собой одновитковый виток-замыкатель L_{EC} , как показано на рис. 2. Такая конструкция позволила решить основную проблему в реализации схемы – исключение пробоя между лайнером и вторичным контуром при высоких напряжениях. После последовательного замыкания ключей K_2 и K_3 поток Φ_{10} перехватывается вторичным контуром L_2 . Перехваченный магнитный поток $\Phi_{20}=M_0\cdot I_{20}$, где $M_0=k_{CB0}\sqrt{L_{10}L_{20}}$. Затем перехваченный магнитный поток вытесняется в на-

грузку L_{load} . Размыкатель *BP* на схеме дает возможность отключить ток первичного контура L_1 в течение 3 мкс после замыкания ключа L_{EC} .



Рис. 2. Принципиальная электрическая схема взрывомагнитного генератора с перехватом магнитного потока: C_0 – емкостной источник начальной энергии, L_B – индуктивность предусилительного каскада, D – фронт движения лайнера, L_{EC} – дополнительный виток-замыкатель, BP – прерыватель тока первичного контура, L_I , L_2 – импульсный динамический трансформатор с индуктивностями первичного и вторичного контура соответственно, L_{load} , R_{load} – параметры нагрузки

Особые требования предъявлялись к электрической прочности обострительного каскада ВМГ ПП. Она достигалась благодаря применению предусилительного каскада со специальным законом вывода индуктивности, позволяющим ограничить производную тока dI₁/dt. Он обеспечивал ограничение напряжения в первичном контуре и, как следствие, – ограничение напряжения на вторичном контуре. Кроме того, использовался одновитковый замыкатель в начале вторичной спирали. Замыкатель был изготовлен из провода с повышенным рабочим напряжением 38 кВ. В данной схеме нагрузка соединялась к выходному концу вторичной спирали и к входному концу витка-замыкателя. Эффективная индуктивность секций генератора определялась по диаметру укладки проводов с учетом их диаметра, шага намотки при скорости скольжения лайнера по спирали D = 5,8 мм/мкс, скорости расширения лайнера $U_{PЛ} = 1,25$ мм/мкс и начальном диаметре лайнера $d_{Л} = 54$ мм.

Для отключения тока первичного контура был разработан и установлен быстродействующий цилиндрический взрывной размыкатель *BP*, обеспечивающий отключение тока ~ 3 MA за время ~ 3 мкс. Размыкатель размещался на выходе генератора и приводился в действие от основного заряда КВВ. При такой конструкции гарантированно обеспечивалась заданная синхронизация работы генератора, ключей K_2 и K_3 и взрывного размыкателя *BP*. Электрическая прочность размыкателя после отключения – не менее 100кВ.

Целью измерений было сравнение выходных параметров ВМГ ПП для двух схем включения и определение, какая из них дает большее усиление магнитной энергии и большую энергетическую эффективность.

3. Результаты экспериментальных исследований

Основные результаты были получены из измерений поясами Роговского, которые выдавали значения производных токов в месте подключения. Распределения токов пересчитывались путем интегрирования осциллограмм производных токов. В опытах исследовалась работа ВМГ ПП с отключением тока первичного контура и без.

На рис. 3 показаны типичные временные зависимости производной тока и самого тока в нагрузке, которые получались в результатах экспериментов для ВМГ ПП с отключением (1, 3) и без отключения (2, 4) тока первичного контура. Экспериментально показано, что при практически равной магнитной энергии в первичном контуре $E_{10E} = 45,4$ кДж и $E_{10C} = 45,8$ кДж, конечное значение амплитуды тока в нагрузке I_{loadC} (~390кА) и коэффициента усиления энергии ψ_{loadC} (~1.93) для ВМГ ПП с отключением первичного контура значительно выше, чем I_{loadE} (~250кА) и ψ_{loadE} (~0.73) для ВМГ ПП без отключения. Далее – нижний индекс «*C*» соответствует обострительному каскаду с отключением тока первичного контура, индекс «*Б*» – без отключения.



Рис. 3. Экспериментально полученные зависимости производной тока (dI_2/dt) и тока I_2 в нагрузке от времени (мкс) для ВМГ ПП с отключением тока первичного контура – (1, 3), и без отключения – (2, 4) тока первичного контура

Видно, что для ВМГ ПП без отключения тока первичного контура характерен пологий фронт производной тока и импульса тока в нагрузке. Для ВМГ ПП с отключением виден характерный излом в момент полного отключения тока в первичном контуре. В этот момент производная тока в нагрузке более чем в четыре раза превышает соответствующее значение производной для тока ВМГ ПП без отключения тока первичного контура. Объяснение этому можно получить, рассмотрев значение производной тока (1) во вторичной обмотке в момент перехвата магнитного потока. Отметим, что в начале $I_2(0) = 0$ и $R_2(0) = 0$. Для обоих случаев все члены (1), кроме значения производной $L_1M(dI_1/dt)$, одинаковы по величине, что приводит к существенно большему значению производной dI_2/dt для ВМГ ПП с отключением по сравнению с аналогичной производной для ВМГ ПП без отключения тока первичного контура.

$$\frac{dI_2}{dt} = \frac{\left(MI_1\frac{dL_1}{dt} - L_1M\frac{dI_1}{dt} - L_1I_1\frac{dM}{dt}\right)}{(L_2 + L_{load})L_1 - M^2}.$$

Кроме того, следует отметить, что эффективное время нарастания тока для ВМГ ПП с отключением меньше значения τ_P для ВМГ ПП без отключения тока первичного контура.

Результаты проведенных серий экспериментов систематизированы в табл. Начальные условия для проведения экспериментов типов «С» и «Б» были подобраны практически одинаковыми. Индуктивность нагрузки для обоих случаев составляла $L_{load} = 1,16 \ \mu$ Г; индуктивность предусилительного каскада была около $L_b \sim 9,9 \ \mu$ Г, индуктивность первичной спирали обострительного каскада $L_{10} \sim 0,07 \ \mu$ Г, индуктивность вторичной спирали обострительного каскада $L_{20} \sim 10,07 \ \mu$ Г. Коэффициент связи катушек k ~ 0,85.

Экспериментально показано, что при практически равных перехваченных потоках значение F_C значительно выше, чем F_E . Следует отметить, что при работе ВМГ ПП с отключением тока первичного контура в период $0 < t_l < \tau_P$ коэффициент совершенства F_{load1C} выше, чем F_{load1E} при работе без отключения. После завершения процесса отключения тока первичного каскада при $\tau_P < t_2 < \tau_f$ (τ_f – время работы обострительного каскада) коэффициенты совершенства F_{load2C} и F_{load2E} имеют практически равные значения.

Аналогичные результаты были получены при проведении специальной серии опытов с цилиндрическим обострительным каскадом ВМГ ПП с размыкателем при пониженных параметрах импульса тока. Генераторы испытывались на относительно высокоимпедансную нагрузку. Для ВМГ ПП с разрывом первичного контура при уменьшенном значении магнитной энергии $E_{10} = 3,5$ кДж в нагрузке индуктивностью 5,22 мкГн был зарегистрирован электрический импульс с параметрами: энергия $E_{loadC} = 8,2$ кДж, магнитный поток $\Phi_{loadC} = 0,29$ Вб, коэффициент совершенства $F_{loadC} = 0,79$, коэффициент усиления энергии $\psi_{loadC} = 2,34$, что свидетельствует также об эффективности таких генераторов.

Таблица

Случаи	Начальная энергия	Амплитуда тока при перехвате магнитного потока	Начальный магнитный поток	Перехва- ченный магнит- ный поток	Амплитуда тока в на- грузке	Энергия в нагруз- ке	Коэф. усиления энергии	Коэф. совер- шенства
	Е ₁₀ , қДж	I ₁₀ , MA	Ф ₁₀ , Вб	Ф ₂₀ , Вб	I _{load} , MA	E _{load} , кДж	Ψ	F _{load}
Без отклю- чения тока первично- го контура	45,4	1,23	0,074	0,8	0,23	33,3	0,73	0,54
С отключе- нием тока первично- го контура	45,8	1,07	0,086	0,7	0,39	88,2	1,93	0,74

Результаты экспериментов

4. Обсуждение результатов и выводы

Проведена серия экспериментов с ВМГ ПП с отключением тока первичного контура и без отключения тока первичного контура. Для близких начальных значений магнитной энергии запитки для двух случаев проведены сравнения выходных энергетических параметров (табл. 1). А именно, для ВМГ ПП с отключением тока первичного контура при $E_{10C} = 45,8$ кДж в нагрузке индуктивностью 1,16 мкГн был зарегистрирован электрический импульс с параметрами: энергия $E_{loadC} = 88,2$ кДж, магнитный поток $\Phi_{loadC} = 0,45$ Вб, коэффициент совершенства $F_{loadC} = 0,74$, коэффициент усиления энергии $\psi_{loadC} = 1,93$. Для ВМГ ПП без отключения тока первичного контура при практически равной магнитной энергии $E_{10E} = 45,4$ кДж в нагрузке индуктивностью 1,16 мкГн зарегистрирован электрический импульс с более низкими параметрами: энергия $E_{loadb} = 33,3$ кДж, магнитный поток $\Phi_{loadb} = 0,29$ Вб, коэффициент совершенства $F_{loadb} = 0,73$. Достигнутые параметры электрического импульса в индуктивной нагрузке продемонстрировали более высокую эффективность работы взрыво-

магнитного генератора с перехватом магнитного потока и с отключением тока первичного контура, чем взрывомагнитные генераторы с перехватом магнитного потока, но без отключения тока первичного контура.

Исследования и дальнейшее развитие таких генераторов являются актуальными и перспективными для разработки источников электропитания плазменных ускорителей. В работе [5] на основании проведенных сравнительных исследований было отмечено, что данные генераторы более, по сравнению с традиционно применяемыми источниками, основанными на конденсаторных батареях. А именно – при малых габаритах ВМГ и малой его конечной индуктивности генератор выдает на электродах ускорителя напряжение в два раза большее при одинаковом разрядном токе. Это позволяет в 2 раза повысить энергию, вкладываемую в плазменный разряд.

Кроме того, схемы с перехватом магнитного потока позволяют дальнейшее совершенствование в направлении сжатия импульса тока при применении отключения тока первичного контура.

Библиография

1. Взрывные генераторы мощных импульсов электрического тока / под ред. В.Е. Фортова. М.: Наука, 2002. 399 с.

2. Минцев В.Б., Ушнурцев А.Е., Фортов В.Е. Модели работы взрывомагнитных генераторов с перехватом магнитного потока // ТВТ. 1993. Т. 31, № 3. С. 469–473.

3. Leontyev A.A., Mintsev V.B., Ushnurtsev A.E., Fortov V.E., Shurupov A.V., Optimization of shotpulsed magnetic flux compressors // Seventh International Conference on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics, Sarov (Arzamas-16), 1996. ВНИИЭФ. С. 334–339.

4. Baselyan E.M., Borisov R.K., Mintsev V.B, Shurupov A.V. at al. Mobile Simulator of the lightning current on the basis of explosive magneto-cumulative generator for testing electro-energetic objects // XI International Conference on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics, Imperial College, London, 2006. P. 377–381.

5. Шурупов А.В., Козлов А.В., Леонтьев А.А. и др. Взрывомагнитный генератор как источник электропитания импульсного плазменного ускорителя // ТВТ. 2010. Т. 48, № 1. С. 3–8.

ДИНАМИЧЕСКОЕ УДЕРЖАНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ В ЛИНЕЙНЫХ ЛОВУШКАХ ПАУЛЯ

Лапицкий Д.С.

Объединенный институт высоких температур РАН

В современных энергетических системах для захвата частиц из газового потока применяются электростатические поля. В данной работе рассматривается случай применения для этой цели электродинамических ловушек. Поведение пылевых частиц в электродинамических полях моделировалось методом броуновской динамики. Движение частиц описывалось системой уравнений Ланжевена. Определены параметры ловушек и найдены параметры пылевых частиц, необходимые для их удержания.

Ключевые слова: пылевые частицы, пылевая плазма, броуновская динамика, электродинамические ловушки.

DYNAMIC DUST PARTICLE CONFINEMENT IN LINEAR PAUL TRAPS

Lapitsky D.S.

Joint Institute for High Temperatures RAS

In modern energy systems to capture particles from the gas flow electrostatic fields are applied. In this paper we consider electrodynamic traps for this purpose. The dust particle motion in electrodynamic fields has been simulated by Brownian dynamics method. The motion of particles is described by system of Langevin equations. Parameters of electrodynamic traps and dust particles needed for it confinement were found.

Keywords: dust particles, dusty plasma, brownian dynamics, electrodynamic.

Введение

Особым разделом физики плазмы является пылевая плазма. Она представляет собой ионизированный газ, содержащий заряженные частицы конденсированного вещества. Размер частиц пылевой плазмы варьируется в пределах 1–100 *мкм*. Её история насчитывает чуть меньше 100 лет, и впервые она была получена в эксперименте Ленгмюра в 1924 году.

Пылевая плазма широко распространена в космосе: в планетарных кольцах, хвостах комет, межзвездных облаках [1–6], где ее влияние проявляется в резонансных возмущениях орбиты, переносе углового момента в планетарных кольцах. Столь широкое распространение пылевой плазмы делает ее интересным объектом исследований. Имея относительно большой размер по сравнению с остальными частицами плазмы, пылевые частицы могут приобретать большой заряд, зависящий от параметров плазмы. Вследствие такого большого заряда межчастичное взаимодействие, а кроме того потенциальная энергия между частицами велика по сравнению с электрон-ионной системой, и может намного превосходить их среднюю тепловую энергию, что означает возникновение сильнонеидеальной плазмы [7]. Подобные эффекты влекут собой возможность появление ближнего порядка взаимодействия между пылевыми частицами вплоть до кристаллизации.

Сами же пылевые частицы в наиболее частом случае непосредственно вводятся в исследуемую область. Но помимо внешней инжекции частиц, возможно и их самопроизвольное возникновение в среде. Один из источников – конденсация, приводящая к появлению твердых частиц или капель. Процесс образования пылевых частиц в плазме в таком случае характерен для расширяющейся плазмы: адиабатически в вакуум или в канале МГД генератора [8, 9] в результате химических реакций [10] или в качестве частичек электродов в результате их эрозии, а также эрозии стенок газоразрядных камер. При этом наблюдается рост самих частичек, например, за счет рекомбинации на частичках ионов, приводящей к постоянному осаждению на поверхность частиц материала.

В технологических установках, использующих плазменные процессы, присутствие пылевых частиц часто играет негативную роль. Стоит задача в очистке рабочей среды от продуктов ядерного распада. Поэтому в настоящее время ведутся интенсивные поиски путей, устраняющих вредное воздействие пылевых частиц, в частности, в установках термоядерного синтеза. Одним из направлений является изучение организованных структур, образуемых в среде из микроскопических частиц плазмы, а также их удержание в объеме в определенной области для очищения среды от осколков ядерных реакций. Экспериментальные работы аргон-ксеноновой газовой среды [11, 12] показали возможность пылевым структурам организовывать пылевые кристаллы из пылевых частиц микронных размеров.

Чем больше частиц удерживается вместе, тем больше будет кулоновское межчастичное взаимодействие влиять на частицы, а пространственный заряд – на потенциал ловушки. Динамика сильно связанной ионной плазмы в ловушке нелинейна, следовательно, необходимо проводить либо длительные испытания, либо компьютерное моделирование броуновской динамики, которые бы дали количественные и качественные результаты. Целью данной работы стало изучение возможности удержания пылевых структур и определение условий их удержания в плазме с внешним источником ионизации при нормальных условиях среды как при отсутствии, так и при наличии газового потока.

Модель расчета поведения пылевых частиц

Для моделирования поведения пылевых структур необходимо задать силы, действующие на пылевые частицы. В настоящее время в литературе обсуждается несколько физических возможностей. В данной работе рассмотрен случай потенциальных сил, действующих на пылевые частицы, причем давление газовой среды учитывалось величиной вязкости.

Для описания временного поведения пылевых частиц использовался метод броуновской динамики, учитывающий стохастические силы, действующие на пылевые частицы благодаря столкновениям с нейтральными и плазменными частицами. Учитывались также регулярные силы взаимодействия пылинок с электродами ловушки, силы взаимодействия пылинок между собой и сила гравитации. Тогда эволюция подсистемы пылевых частиц описывается системой динамических уравнений:

$$m_{p} \frac{d^{2} r_{i}}{dt^{2}} = F_{tr}(r_{i}) + F_{int}(r_{i}) - 6\pi\eta r_{p} \frac{dr_{i}}{dt} + F_{i}^{Br} + F_{mg}, \qquad (1)$$

где $i = 1,...,N_p$, N_p – число пылевых частиц, r_p – радиус пылевой частицы, $\eta \approx 17,2 \ mk\Pi a \cdot c$ – динамическая вязкость, $F_{tr}(t,r_i)$ – сила, обусловленная внешними электрическими полями, которые компенсируют силу тяжести (в результате чего пылинки левитируют), $F^{Br} = \sqrt{12\pi\eta r_p k_B T} R(t)$ – стохастические дельта-коррелированные силы, описывающие столкновения пылевых и плазменных частиц ($< R(t) >= 0, < R(t)R(t') >= \delta(t-t')$), F_{mg} – вес пылинки, $F_{int}(r_i)$ – сила, действующая на пылинку со стороны других пылевых частиц. Схема численного расчета (1) представлена в работе [13].

Моделирование линейной ловушки Пауля

Схема классической линейной ловушки Пауля изображена на рис. 1 слева. Линейная ловушка состоит из 4 цилиндрических электродов и двух замыкающих электродов на торцах. Длина электродов линейной ловушки $L_b = 20 \, cm$, расстояние между осями электродов $L_m = 1 \, cm$. Длина каждого замыкающего электрода составляла 5 *см*. Диаметр всех электродов $d = 3 \, mm$. Для расчетов электрических полей в модели сделано допущение, что электроды ловушки установлены в центре большого, бесконечно длинного, заземленного цилиндра с внутренним радиусом $R = 25 \, cm$, что значительно больше радиусов электродов и межэлектродного расстояния. Для изучения возможности удержания пылевых частиц в газовом потоке предложена модернизированная линейная ловушка, которая состоит из 4 линейных ловушек, установленных на расстоянии L_m друг от друга.



Рис. 1. На левом рисунке изображена схема линейной ловушки Пауля. На правом рисунке представлена схема модернизированной ловушки

На электроды ловушки подается переменное напряжение: на одну диагональ $U_{\omega}sin(\omega t)$, на другую диагональ $U_{\omega}cos(\omega t)$, где U_{ω} – амплитуда переменного напряжения. Подаваемое таким образом напряжение создает внутри исследуемой области переменное электрическое поле, представленное на рис. 2. На этом рисунке продемонстрирована эволюция поля для трех моментов времени – $\pi/4$, $3 \cdot \pi/4$, $5 \cdot \pi/4$.



Рис. 2. Эволюция поля в центральной части линейной ловушки Пауля. Вид с торца. Представлены 3 момента периода колебания поля. Светлая область соответствует потенциальной яме, темная область соответствует потенциальному барьеру

Помимо этого, подобный тип ловушки позволяет использовать дополнительное постоянное тормозящее электрическое поле. Для его создания на каждый слой из 4 электродов, перпендикулярный газовому потоку, прикладывается постоянное напряжение ΔU .

Для демонстрации эффективности модернизированной ловушки на рис. 3 представлен трек 1 частицы в стандартной линейной ловушке и в модернизированной ловушке. Параметры моделирования: заряд частиц $Q_p = 400 \ e$, радиус частиц $r_p = 0.1 \ mkm$, плотность частиц $\rho_p = 15 \ e/cm^3$. Параметры газовой среды: $T = 300 \ K$, динамическая вязкость $\eta = 17 \ mkm \ a_*c$. Параметры электродинамических ловушек: $U_{\omega} = 10 \ \kappa B$, постоянный скачек напряжения $\Delta U = 1.8 \ \kappa B$, частота переменного напряжения $f = 400 \ \Gamma \mu$. Направление потока на картинках справа налево, скорость потока $v_{flow} = 0.1 \ m/c$. Как видно из левой части рис. 3, одиночная линейная ловушка не справляется с удержанием частицы, в то время как правая ловушка удерживает ее.



Рис. 3. Трек частицы в классической линейной ловушке Пауля (рисунок слева) и в модернизированной ловушке (рисунок справа). Большими точками отмечены электроды ловушек, маленькими точками – треки частиц

Динамика удержания и захвата частицы в модернизированной ловушке представлена на рис. 4. На рисунке показаны треки 2 частиц, которые движутся в потоке справа налево. Расстояния между точками треков частиц соответствуют интервалу времени в 1 сек. Электроды представлены большими точками (правый рисунок) или 2 большими вертикальными линиями (левый рисунок). Частицы вначале останавливаются в поле ловушки в одной из ячеек, образованных 4 электродами, после чего, осциллируя под действием переменного поля, падают вниз под действием силы тяжести.



Рис. 4. Треки 2 частиц в модернизированной ловушке Пауля

Взяв за исходные параметры плотность ρ_p , скорость потока v_{flow} , характерные размеры ловушки, частоту подаваемого на электроды напряжения, определены области захвата частиц для различного подаваемого напряжения U_{ω} и ΔU и заряда частиц Q_p . На рис. 5 области, которые находятся выше кривых, соответствуют захвату частиц.

Лучшие условия захвата реализуются при высоких зарядах частиц зарядом $Q_p = 100-1000 e$.



Рис. 5. Области захвата пылевых частиц находятся над кривыми

Заключение

В работе предложена модель расчета динамики пылевых частиц в электродинамических полях и проведено моделирование линейной ловушки Пауля для нормальных условий среды. Предложен метод удержания пылевых частиц из газового потока, для чего предложена модернизированная линейная ловушка Пауля. Продемонстрирована возможность захвата пылевых частиц с помощью модернизированной ловушки Пауля. Найдена область захвата в модернизированной ловушке в газовом потоке.

Библиография

1. Goertz C.K. Dusty plasmas in the solar system // Rev. Geophys. 1989. V. 27, N. 2. P. 271–292.

2. Northrop T.G. Dusty Plasmas // Phys. Scripta. 1992. V. 45. P. 475-490.

3. Цытович В.Н. Плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака // УФН. 1997. Т. 167. С. 57-59.

4. Bliokh P, Sinitsin V, Yaroshenko V. Dusty and Self-Gravitational Plasma in Space // Dordrecht: Kluwer Academic, 1995. P. 250–251.

5. Whipple E.C. Potential of Surface in Space // Rep. Prog. Phys. 1981. V. 44. P. 1197-1250.

6. Robinson P.A., Coakley P. Spacecraft charging-progress in the study of dielectrics and plasmas // IEEE Transactions Electr. Insulation. 1992. V. 27. P. 944–960.

7. Morfill G.E., Thomas H., Demmel V. Plasma Crystal: Coulomb Crystallyzation in a Dusty Plasma // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 73. P. 652–655.

8. Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Ионизированное равновесие в плазме с конденсированной дисперсной фазой // Химия плазмы, Атомиздат. 1984. В. 11. С. 130-170.

9. Yakubov I.T., Khrapak A.G. Thermophysical and Electrophysical Properties of Low-Temperature Plasma with Condensed Disperse Phase // Sov. Tech. Rev. B: Therm. Phys. 1989. V. 2. P. 269–337.

10. Perrin J., Hollenstein C. // Dusty Plasmas: Physics, Chemistry and Technological Impacts in Plasma Processing. 1999. P.77–180.

11. Rykov V.A., Khudyakov A.V., Filinov V.S., Vladimirov V.I., Deputatova L.V., Krutov D.V., Nefedov A.P., Fortov V.E. Dust grain charges in a nuclear-track plasma and the formation of dynamic vortex dust structures // Plasma Physics Reports, June 2002, V. 28, Is. 6, P. 524–533.

12. Filinov V.S., Naumkin V.N., Vladimirov V.I., Meshakin V.I., Rykov V.A. Influence of Potential and Non Potential Forces of Interparticle Interaction on Stability of Nuclear Excited Dusty Plasma Contrib // Plasma. Phys. 2009. V. 49, No. 7–8, P. 446–450.

13. Skeel R.D., Izaguirre J.A. An impulse integrator for Langevin dynamics // Molecular Physics. 2002. V. 100, No. 24, P. 3885–3891.

ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ В ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Кяров А.Х., *Савинцев А.П.

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова

*pnr@kbsu.ru

В рамках теории неоднородного электронного газа рассмотрена модель для расчета статической квадрупольной и октупольной поляризуемости атомов инертных газов. Проведенный анализ доказывает высокую точность новой модели. Подчеркнуто как одно из ее основных достоинств - простота и физическая прозрачность, а также отсутствие вычислительных проблем.

Ключевые слова: теория функционала плотности, квадрупольная и октупольная поляризуемость, вариационный параметр, атом, инертный газ.

POLARIZABILITY IN DENSITY FUNCTION THEORY

Kyarov A.Kh., Savintsev A.P.

Kabardino-Balkarian State University

Within the theory of inhomogeneous electron gas model is considered for the calculation of static quadrupole and octupole polarizabilities of rare gas atoms. The analysis confirms the high accuracy of the new model. Highlighted as one of its main advantages – simplicity and physical transparency, and lack of computational problems.

Keywords: density functional theory, quadrupole and octupole polarizability, variational parameter, atom, rare gas.

Точное решение уравнения Шредингера может быть найдено лишь для сравнительно небольшого числа простейших случаев [1]. Часто, однако, в условиях задачи фигурируют величины разного порядка; среди них могут оказаться малые величины, после пренебрежения которыми задача упрощается настолько, что делает возможным ее точное решение. В таком случае первый шаг в решении поставленной задачи состоит в точном решении упрощенной задачи, а второй – в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. Общий метод для вычисления этих поправок – метод теории возмущений – будет использован в нашем случае для определения функции отклика во внешнем слабом электрическом поле.

Наиболее известные приближения, связывающие электронную плотность и потенциал взаимодействия, основаны на модели Томаса – Ферми. С учетом обменного взаимодействия и поправок на корреляцию, а так же градиентных поправок на неоднородность электронного газа можно создать достаточно большое количество моделей для расчета поляризуемости конденсированных сред. Функциональная связь плотности основного состояния связанной системы взаимодействующих электронов и потенциала $\varphi(\vec{r})$ неизвестна. Данная проблема подробно обсуждалась В. Коном в работе [2]. Проблема формулируется так: может ли любая положительная функция $\rho(\vec{r})$ с регулярным поведением, интеграл от которой равен целому положительному числу *N*, представляет собой плотность основного состояния, соответствующую какому-нибудь потенциалу $\varphi(\vec{r})$?

Изучение взаимодействующих электронных систем в основном состоянии было поставлено на твердую теоретическую основу работой Хохенберга и Кона, опубликованной в 1964 году [3]. Авторы показали, что все свойства электронной структуры системы в невырожденном основном состоянии полностью определяется ее электронной плотностью. Они также получили формальное стационарное выражение для энергии *E* такой системы в виде функционала от плотности $\rho(\vec{r})$. В функционал входит слагаемое, которое представляет собой кинетическую энергию и энергию взаимодействия. Точный вид его неизвестен, так как невозможно найти точное решение многоэлектронной задачи. Тем не менее, были предложены и применялись различные полезные аппроксимации, простейшая из которых возвращает нас к уравнениям Томаса – Ферми и его уточненным вариантам.

Ван – дер – Ваальсово взаимодействие в конденсированных средах сводится к появлению на достаточно больших расстояниях пространственной корреляций между плотностями флуктуирующих зарядов и токов. Возникновение этих корреляций связано с наличием индуцированных плотностей заряда и тока (или поляризации и намагниченности) в одном теле вследствие спонтанных флуктуаций этих величин в другом теле. В более общем случае сказанное относится не к двум разным телам, а к двум областям в неоднородной конденсированной среде. Другой причиной возникновения корреляций является вакуумное квантовое электромагнитное поле, индуцирующее в конденсированной среде дополнительные флуктуационные плотности электрического заряда и тока. Пространственно-временные корреляции значений вакуумного электромагнитного поля могут проявляться на достаточно больших расстояниях и приводят к аналогичным корреляциям между значениями индуцированных плотностей зарядов и токов.

Точность теории функционала плотности в локальном приближении обычно не лучше 1% и предложенные к настоящему времени уточнения не могут радикально изменить ситуацию. Если требуется более точный расчет, приходится вычислять непосредственно многоэлектронную волновую функцию с помощью вариационного принципа Рэлея – Ритца или по какой-либо другой схеме. Однако подобные расчеты, вообще говоря, возможны лишь для систем, содержащих всего несколько электронов, в то время как теорию функционала плотности можно применять без особых трудностей и к системам, содержащим большое число электронов.

Для основного состояния системы при T = 0 для сферически симметричных систем

$$\alpha_{ik}(\omega) = \alpha(\omega)\delta_{ik}.$$
 (1)

Наиболее последовательным способом определения поляризуемости в рамках статистической модели представляется учет внешнего поля в самих исходных уравнениях модели. Впервые такой подход был применен еще в работе Гомбаша [4], но при этом для возмущенной электронной плотности заряда применялась пробная функция, выражающаяся через невозмущенную плотность и один вариационный параметр.

Так как в дальнейшем потребуется выражение для $\varphi_0(r)$, выпишем его явно. Для этого используем электронные плотности атомов в основном состоянии из работы [5]:

$$D(r) = 4\pi r^2 \rho(r) = Nr \left[\sum_{i=1}^2 \gamma_i^{a\,a} \lambda_i^2 \exp\left(-^a \lambda_i r\right) + \sum_{j=1}^3 {}^b \gamma_j^{\ b} \lambda_j \left({}^b \lambda_j r - 2\right) \exp\left(-^b \lambda_j r\right) \right].$$
(2)

Из уравнения Пуассона, учитывая сферическую симметрию электронного распределения

$$\Delta \varphi_0 = 4\pi e \rho(r), \qquad (3)$$

получим

$$\varphi_0 = N \left\{ \frac{1}{r} \sum_i {}^a \gamma_i \exp(-{}^a \lambda_i r) + \sum_j {}^b \gamma_j \exp(-{}^b \lambda_j r) \right\}.$$
(4)

В приближении Томаса – Ферми электронная плотность и потенциал взаимодействия связаны соотношением:

$$\rho_0(r) = \gamma \varphi_0^{\frac{3}{2}}.$$
(5)

В данной работе, которая является продолжением [6], ограничимся приближением модели Томаса – Ферми. Кратко воспроизведем основные положения предлагаемой модели. Методика расчетов стандартная, в рамках вариационного подхода. Вариационный параметр определяется из условия минимальности энергии.

В дипольном приближении возмущающий потенциал имеет вид:

$$\delta \varphi_1 = -\left| \vec{E} \right| r \cos \theta \tag{6}$$

Данная схема расчета поляризуемости атома во всех приближениях (модель ТФ, ТФД, ТФД с корреляционной поправкой) была рассчитана ранее целом рядом авторов. Были сделаны следующие выводы:

1). Модели дают завышенные значения дипольной поляризуемости, а в случае мультипольных поляризуемостей интегралы вообще расходятся для электронных плотностей типа Хартри – Фоковских.

2). Выявлена необходимость уточнения выражения для возмущенной электронной плотности.

В нашем случае особого рассмотрения заслуживает случай, когда в качестве возмущения может рассматриваться полная потенциальная энергия системы во внешнем поле [1]. Невозмущенное уравнение Шредингера есть тогда уравнение свободного движения частицы

$$\Delta \psi^{(0)} + k^2 \psi^{(0)} = 0, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$$
(7)

и имеет решениями плоские волны. Энергетический спектр свободного движения непрерывен, так что мы имеем дело со своеобразным случаем теории возмущений в непрерывном спектре. Решение задачи удобнее получить, не прибегая к общим формулам теории возмущений.

Уравнение для поправки $\psi^{(1)}$ первого приближения к волновой функции:

$$\Delta \psi^{(1)} + k^2 \psi^{(1)} = \frac{2mU}{\hbar^2} \psi^{(0)}, \qquad (8)$$

где *U* – потенциальная энергия. Решение этого уравнения может быть написано в виде «запаздывающих потенциалов»:

$$\psi^{(1)}(x,y,z) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \psi^{(0)} U(x',y',z') e^{ikr} \frac{dV'}{r}.$$
(9)

Выясним, каким условиям должно удовлетворять поле U для того, чтобы его можно было рассматривать как возмущение. Условие применимости теории возмущений заключается в требовании $\psi^{(1)}\langle\langle\psi^{(0)}\rangle$. Пусть a есть порядок величины размеров области пространства, в котором поле значительно отличается от нуля. Предположим сначала, что энергия частицы настолько мала, что ak меньше или порядка единицы. Тогда множитель e^{ikr} в подынтегральном выражении (9) несущественен при оценке порядка величины, и весь интеграл будет порядка $\psi^{(0)}|U|a^2$, так что

$$\psi^{(1)} \approx (ma^2 |U| / \hbar^2) \psi^{(0)}$$
 (10)

И в результате получаем условие:

$$|U|\langle\langle\frac{\hbar^2}{ma^2} \pmod{ka \le 1}.$$
(11)

Очевидно, что выражение $\frac{\hbar^2}{ma^2}$ имеет простой физический смысл – это есть порядок величины

кинетической энергии, которой обладала бы частица, заключенная в объеме с линейными размерами а.

Итак, учитывая что внешнее слабое электрическое поле снимает сферическую симметрию и делает задачу о нахождении функции отклика двумерной, решаем модельную: определить уровень энергии в двумерной потенциальной яме U(r) (r – полярная координата в плоскости) малой глубины, предполагая что условие (11) выполнено.

Для уравнения Шредингера в области ямы пренебрегаем Е и получаем уравнение

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}U.$$
(12)

Интегрируя его по dr от нуля до r_1 (где $a \ll r_1 \ll 1/\chi$), имеем

$$\frac{d\psi}{dr}\Big|_{r=r_1} = \frac{2m}{\hbar^2 r_1} \int_0^\infty r U(r) dr \,. \tag{13}$$

Вдали от ямы уравнение двумерного свободного движения:

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0, \qquad (14)$$

$$\psi = \psi_0 S \,. \tag{15}$$

Общее решение поставленной задачи зависит от конкретного вида потенциальной энергии, но в нашем случае в нахождении точного решения нет необходимости. Полагая, что в области ямы функцию *S* можно считать почти постоянной имеем:

$$S \propto A \exp\left[-\frac{\hbar^2}{m} (\int_0^r Ur' dr')^{-1}\right].$$
 (16)

Уравнение (15) позволяет определить возмущенную электронную плотность атома в виде:

$$\rho(r) = \rho_0(r) S_0(r), \qquad (17)$$

$$S_0(r) = A \exp\left(-\frac{C_0 \tau^2}{r^\beta \varphi(r)}\right),\tag{18}$$

где A, C_0, β – некоторые действительные числа. Учитывая закон сохранения заряда, необходимо выполнения условия:

$$\int_{0}^{\infty} D(r)S_{0}(r)dr = N.$$
(19)

В данной работе для простоты выбираем $A = 1, C_0 = 6, \beta = 0$. При этом

$$\varphi^{1/2} = \varphi_0^{1/2} \exp\left(-\frac{2\tau^2}{\varphi_0(r)}\right).$$
(20)

Формула для дипольной поляризуемости после интегрирования исходного выражения по углам приобретает достаточно простой вид:

 3π

$$\alpha_{1} = \frac{\eta_{01}^{2}}{\xi_{1}\eta_{01} + 2\int_{0}^{\infty} r \varphi^{1/2} \eta_{1}(r) dr},$$
(21)

где

$$\zeta_1 = \frac{1}{4\sqrt{2}} ,$$

$$\eta_{01} = \eta_1(\infty) = \int_0^\infty \varphi^{1/2}(r) r^4 dr .$$
(22)

Результаты расчетов поляризуемость атомов гелия, неона, аргона и криптона, атомов щелочных металлов: лития, натрия и калия; атомов галогенов: фтора, хлора и брома в данной модели представлены в [6].

Очевидным преимуществом новой модели является ее простота в смысле трудоемкости расчетов. Простейшая реализация модели предполагает (как максимально сложную процедуру) рассчитать двукратный интеграл от достаточно гладкой функции.

Точная реализация предложенной в данной работе модели лишь немного усложняет процесс расчета. Конечно же мы говорим здесь о реализации модели на функционале Томаса – Ферми. Уточнение функционала энергии приведет задачу в конечном итоге к уравнениям Кона – Шэма, поэтому исследование связи между точностью функционала энергии и рассчитываемой поляризуемостью представляет собой отдельную нетривиальную задачу, которая пока далека от решения.

Физически содержательную часть можно понять, анализируя поведение функции S(r). При $r \to 0$ $S(r) \to 0$, что исключает особенности, возникающие в моделях, базирующихся на использовании квазиклассического приближения (статистических моделях), вблизи ядра. Далее функция достаточно быстро возрастает, образуя в дальнейшем широкую область слабой зависимости от r. Затем (при $\varphi(r) \leq \tau^2$) функция S(r) резко стремится к нулю. Этим исключается сколь-либо значительное влияние электронных «хвостов» на изменение энергии атома во внешнем поле.

Подобная зависимость функции S(r) приводит к следующим последствиям. Во-первых, и это абсолютно важно, результаты расчетов в данной модели дают хорошее согласие с экспериментом для значений статической дипольной поляризуемости атомов с замкнутыми электронными оболочками. Во-вторых, появление данной функции физически вполне обоснованно, и как уже говорилось выше, связано с тем, что основной вклад в изменение энергии атома во внешнем статическом электрическом поле связано с переходами в непрерывном спектре (по разным оценкам для атомов инертных газов – от 60 % до 90 %).

Возможно, использование квантово-механического подхода и выводит модель за рамки теории функционала плотности, но на это можно заметить следующее: на сегодняшний день теория неоднородного электронного газа недостаточно хорошо описывает переходы в непрерывном спектре, да и вообще спектр возбужденных состояний.

Полученные в работе формулы для расчета поляризуемости не содержат, вообще говоря, каких либо атомных характеристик. Поэтому они вполне пригодны для определения поляризуемости любых

конденсированных сред, в том числе и наночастиц, электронное распределение (или потенциалы) которых известны.

Далее обратимся к квадрупольной поляризуемости атомов инертных газов.

В рассматриваемой работе в рамках теории неоднородного электронного газа создана модель, позволяющая определять линейную функцию отклика системы, а именно – статическую квадрупольную поляризуемость атомов инертных газов.

Квадрупольная поляризуемость характеризует первую производную поля вблизи атома. В статистических моделях она выражается через электронную плотность атома. Подобное построение даже с учетом обменной и квантовой поправок приводит к завышению квадрупольных поляризуемостей. Это связано с тем обстоятельством, что основной вклад дает область больших расстояний, где стандартные статистические модели дают неверные результаты.

В квадрупольном приближении возмущающий потенциал имеет вид:

$$\delta\varphi_2 = -\left|\frac{\partial E_z}{\partial z}\right| \frac{r^2}{2} \left(3\cos^2\theta - 1\right). \tag{23}$$

Формула для квадрупольной поляризуемости после интегрирования исходного выражения по углам приобретает достаточно простой вид:

$$\alpha_{2} = \frac{\eta_{02}^{2}}{\xi_{2}\eta_{02} + 2\int_{0}^{\infty} r\varphi^{1/2}\eta_{2}(r)dr},$$
(24)

где

$$\xi_2 = \frac{5\pi}{4\sqrt{2}} ,$$

$$\eta_{02} = \eta_2(\infty) = \int_0^\infty \varphi^{1/2}(r) r^6 dr .$$
(25)

Результаты расчетов в данной модели представлены в табл. 1. Очевидно, что точность предложенной модели чуть хуже по сравнению с расчетами в квантово-механическом подходе, по теории возмущений и Хартри – Фоковской с релятивистскими поправками. Однако здесь более уместно было бы сравнение с экспериментальными данными, так как очевидно, что для Ne и Ar результаты данной работы лежат между квантово-механическими данными, результатами расчетов по теории возмущений и расчетами по модели Хартри – Фока с релятивистскими поправками. Кажется достаточно странным, что для неона (достаточно легкого атома, а значит, несложного для квантовых расчетов) результаты различаются так сильно.

Таблица 1

Квадрупольная поляризуемость α_2 $\begin{bmatrix} a_0^5 \end{bmatrix}$ атомов инертных газов

Модель / атом	He	Ne	Ar	Kr
Квантово-механический	-	9.8	67.40	122.13
Теория возмущений	-	6.46	49.62	101.46
Хартри – Фока с релятивистскими поправками	-	6.42	50.12	94.25
Настоящая работа	2.7463	6.9876	64.8859	143.46

Наконец, рассмотрим октупольную поляризуемость α_3 атомов инертных газов.

Определим статическую октупольную поляризуемость наших объектов.

В квадрупольном приближении возмущающий потенциал имеет вид:

$$\delta\varphi_3 = -\left|\frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2}\right| \frac{r^3}{2} \left(5\cos^3\theta - 3\cos\theta\right). \tag{26}$$

Формула для октупольной поляризуемости после интегрирования исходного выражения по углам приобретает достаточно простой вид:

$$\alpha_{3} = \frac{\eta_{03}^{2}}{\xi_{3}\eta_{03} + 2\int_{0}^{\infty} r \varphi^{1/2} \eta_{3}(r) dr},$$
(27)

Таблица 2

где

$$\xi_3 = \frac{7\pi}{4\sqrt{2}} ,$$

$$\eta_{03} = \eta_3(\infty) = \int_0^\infty \varphi^{1/2}(r) r^8 dr .$$
(28)

Результаты расчетов в данной модели представлены в табл. 2.

Октупольная поляризуемость $\alpha_3 \left[a_0^7\right]$ атомов инертных газов

Ne Ar Kr
28.6057 532.2844 1513.434
28.6057 532.284

Отсутствие прямых экспериментальных данных не позволяет судить о точности предложенной в работе модели. Однако даже если бы результаты данной работы по расчету октупольной поляризуемости отличались от эксперимента в два раза, модель все равно была бы актуальна и интересна, имея ввиду, что она реализована для простейшей Томаса – Фермиевской модели.

Выводы.

Итак, нами отмечены основные недостатки рассмотренных моделей и показаны пути их преодоления и улучшения с точки зрения физической правдоподобности и численной точности получаемых результатов.

Проведенный анализ доказывает высокую точность новой модели. Подчеркнуто как одно из ее основных достоинств – простота и физическая прозрачность, а также отсутствие вычислительных проблем.

Работа поддержана в рамках базовой части госзадания Минобрнауки России КБГУ на 2014–2016 годы (проект 2014/54-2228).

Библиография

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Т. 3. М.: Наука, 1989. 768 с.

2. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности / Нобелевская лекция по физике // УФН. 2002. Т. 172. Вып. 3. С. 336–348.

3. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Physical Review. 1964. V. 136. No 3B P. B. 864–871.

4. Гомбаш П. Статистическая теория атома. М.: Иностранная литература, 1951. 326 с.

5. Strand T.G., Bonham R.A. Analytical expressions for the hartree-fock potential of neutral atoms and for the corresponding scattering factors for x rays and electrons // J. Chem. Phys. 1964. V. 40. No 6. P. 1686–1691.

6. Кяров А.Х., Савинцев А.П. Статическая поляризуемость атомов // Известия КБГУ. 2011. Т. 1, № 3. С. 54–59.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПОРИСТЫХ СМЕСЕЙ КОНДЕНСИРОВАННЫХ КОМПОНЕНТОВ С КОЭФФИЦИЕНТОМ ГРЮНАЙЗЕНА, ЗАВИСЯЩИМ ОТ ОБЪЕМА, И УДЕЛЬНОЙ ТЕПЛОЕМКОСТЬЮ, ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Бельхеева Р.К.

Новосибирский государственный университет

rumia@post.nsu.ru

В работе представлено дальнейшее развитие предложенного ранее автором метода построения уравнения состояния термодинамически равновесной пористой смеси нескольких конденсированных компонентов, основанного на гипотезе аддитивности объемов ее составляющих. Выполнены численные расчеты ударно-волнового нагружения и изоэнтропической разгрузки сплошных и пористых смесей, содержащих два и три конденсированных компонента. Осуществлены расчеты повторного сжатия в веществе, претерпевающем фазовые переходы. Проведено сравнение расчетных и экспериментальных ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки. Показано, что полученное уравнение смеси, параметры которого выражаются через соответствующие параметры и массовые концентрации составляющих, достаточно точно описывает поведение многокомпонентных сред при распространении в них ударных волн, волн разгрузки и волн повторного сжатия, в которых происходят фазовые превращения.

Ключевые слова: уравнение состояния, пористая смесь, ударная адиабата, изоэнтропическая разгрузка, повторное сжатие, коэффициент Грюнайзена.

EQUATION OF STATE OF A POROUS MIXTURE OF CONDENSED COMPONENTS WITH GRÜNEISEN COEFFICIENT DEPENDENT ON THE VOLUME AND SPECIFIC HEAT OF SUBSTANCE DEPENDENT ON THE TEMPERATURE

Belkheeva R.K.

Novosibirsk State University

It is the further development of the recently suggested method of construction the equation of state of porous mixture. The method is based on the hypothesis of additivity of the species volumes. The thermodynamically equilibrium of mixture is supposed. The numerical calculations of shock adiabats for porous substances and porous mixtures of the condensed species are performed with use of various models of the equation of a state of a mixture taking. The thus-derived equation of state of a thermodynamically equilibrium mixture offers a fairly accurate description of the behavior of a porous medium, which is confermed by comparisons with experimental data.

Keywords: equation of state, porous mixture, shock adiabat, expantion isentrope, double compression, Grüneisen coefficient.

Целью работы является исследование применимости уравнения состояния смеси с зависящим от объема коэффициентом Грюнайзена и зависящей от температуры удельной теплоемкостью для описания повторного ударного сжатия и фазовых переходов при таком сжатии.

Для описания поведения различных смесей используется модель взаимодействующих и взаимопроникающих континуумов, методы построения которой изложены в монографии [1]. Используя гипотезу термодинамического равновесия смеси, ее движение можно описать как движение одного континуума с особым уравнением состояния, учитывающим свойства компонентов смеси и их концентрации, что приводит к значительному сокращению числа уравнений. Под термодинамическим равновесием понимается выполнение для системы условий: $P_i = P$, $T_i = T$, $u_i = u$, где P_i , T_i , u_i – давление, температура и массовая скорость компонента *i* соответственно; P, T, u – давление, температура и массовая скорость смеси соответственно. В рамках такого способа описания смеси, рассмотренного в работах [1–7] и др., принято, что уравнения состояния компонентов в среде такие же, как в свободном состоянии. В [1] приведено уравнение состояния равновесной смеси калорически совершенного газа и несжимаемого твердого вещества. В [2] подобное уравнение получено для трехкомпонентной смеси с баротропным уравнением состояния для компонентов. В [3] найдена зависимость среднего давления твердой фазы как функция пористости и внутрипорового давления при статическом нагружении твердой пористой смеси. В [4] получено уравнение состояния пористой смеси конденсированных компонентов в форме Ми – Грюнайзена, связывающее соответствующие параметры смеси и компонентов. Эти параметры вычисляются по различным формулам в разных диапазонах давления. В [5] учтена зависимость удельных теплоемкостей составляющих от температуры. В [6] параметры уравнения состояния смеси вычисляются через соответствующие параметры компонентов и массовые концентрации компонентов с помощью одних и тех же формул независимо от величины давления. В настоящей работе проводится дальнейшее развитие модели, предложенной в [4–6].

При динамических нагрузках до значений давления порядка 10 – 100 ГПа часто используются уравнения состояния конденсированного вещества в форме уравнения Ми – Грюнайзена:

$$P = P_X + P_T, \tag{1}$$

где $P_X = A \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right]$ – это упругая часть давления, а $P_T = \gamma \rho E_T$ – тепловая. Здесь ρ – плотность,

 ρ_0 – начальная плотность, A, n – константы, характеризующие вещество, γ – коэффициент Грюнайзена, E_T – тепловая энергия. Соответственно внутренняя энергия также представляется в виде суммы двух составляющих

$$E = E_X + E_T, (2)$$

где E_X – упругая энергия сжатия, которая описывается формулой $E_X = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P}{\rho^2} d\rho$, $E_T = c_v (T - T_0)$ –

тепловая составляющая внутренней энергии, c_v – удельная теплоемкость, T – температура, T_0 – начальная температура. В работе [7] показано, что поведение воздуха при распространении в нем ударных волн исследуемой интенсивности адекватно описывается уравнением состояния в форме Ми-Грюнайзена.

Коэффициент Грюнайзена $\gamma(
ho)$ в исследуемом диапазоне давлений приближенно интерполирует-

ся степенной функцией $\gamma \approx \gamma_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^l$, где показатель для металлов приближенно равен единице, γ_0 –

коэффициент Грюнайзена при нормальных условиях [8].

В данном случае уравнение состояния (1) принимает вид:

$$P = A\left[\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^n - 1\right] + \gamma_0 \rho_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{1-l} c_v (T - T_0).$$
(3)

Уравнение состояния (3) нормировано таким образом, чтобы при начальных условиях $\rho = \rho_0$, $T = T_0$ давление и энергия были равны нулю. Такое приближение возможно, поскольку давление в ударной волне значительно больше атмосферного.

Примем, что $A_1 < ... < A < ... < A_N$. Плотность многокомпонентной смеси вычисляется по формуле

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\rho_{ii}},$$
(4)

где ρ_{ii} – истинные плотности, x_i – массовые концентрации компонентов. После проведения тождественных преобразоваий из уравнения (3) плотность вещества выражается соотношением

$$\rho = \left(\frac{P + kA_N}{A}\right)^{\frac{1}{n}} \left[1 - \frac{kA_N - A + \gamma_0 \rho_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{1-l} c_v (T - T_0)}{P + kA_N}\right]^{n/n},$$
(5)

где k – некоторое положительное число. Функцию $\left[1 - (kA_N - A + \gamma_0 \rho_0 (\rho / \rho_0)^{1-l} c_v (T - T_0))/(P + kA_N)\right]^{l/n}$ можно разложить в ряд Тейлора по малому параметру, если $\left|(kA_N - A + \gamma_0 \rho_0 (\rho / \rho_0)^{1-l} c_v (T - T_0))/(P + kA_N)\right| < 1$. Это неравенство выполняется при $k > A / A_N$. Так как для пористых веществ при больших давлениях $A \sim A_N$, то значение k > 2 гарантирует выполнение условия сходимости. Подставляя в (4) выражения (5) для плотностей и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях $(P + kA_N)^{-1}$, получаем соотношения для определения параметров смеси A, ρ_0, n :

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{A}{P + kA_N} \right)^{1/n} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{ii0}} \left(\frac{A_i}{P + kA_N} \right)^{1/n_i},$$

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{A}{P + kA_N} \right)^{1/n} \frac{kA_N - A}{n} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{ii0}} \left(\frac{A_i}{P + kA_N} \right)^{1/n_i} \frac{kA_N - A_i}{n_i},$$

$$\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{A}{P + kA_N} \right)^{1/n} \left(n + 1 \right) \left(\frac{kA_N - A}{n} \right)^2 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{ii0}} \left(\frac{A_i}{P + kA_N} \right)^{1/n_i} \left(n_i + 1 \right) \left(\frac{kA_N - A_i}{n_i} \right)^2$$

Приравнивая коэффициенты при $(T - T_0)(P + kA_N)^{-1}$ и проведя преобразования получим выражение для вычисления параметров γ_0 и *l* смеси

$$\left(\frac{A}{P+kA_N}\right)^{l/n} \frac{\gamma_0 c_v}{n} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{A_i}{P+kA_N}\right)^{l_i/n_i} \frac{x_i \gamma_{i0} c_{vi}}{n_i},$$

$$\frac{1-l}{n} \left(\frac{A}{P+kA_N}\right)^{l/n} \frac{\gamma_0 c_v}{n} (kA_N - A) = \sum_{i=1}^N \frac{1-l_i}{n_i} \left(\frac{A_i}{P+kA_N}\right)^{l_i/n_i} \frac{x_i \gamma_{i0} c_{vi}}{n_i} (kA_N - A_i).$$

Введем обозначения

$$F_{1} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_{i}}{\rho_{ii0}} \left(\frac{A_{i}}{P + kA_{N}}\right)^{1/n_{i}}, \quad F_{2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_{i}}{\rho_{ii0}} \left(\frac{A_{i}}{P + kA_{N}}\right)^{1/n_{i}} \frac{kA_{N} - A_{i}}{n_{i}},$$

$$F_{3} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_{i}}{\rho_{ii0}} \left(\frac{A_{i}}{P + kA_{N}}\right)^{1/n_{i}} \left(n_{i} + 1\right) \left(\frac{kA_{N} - A_{i}}{n_{i}}\right)^{2}, \quad F_{4} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{A_{i}}{P + kA_{N}}\right)^{1/n_{i}} \frac{x_{i}\gamma_{i0}c_{vi}}{n_{i}},$$

$$F_{5} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1 - l_{i}}{n_{i}} \left(\frac{A_{i}}{P + kA_{N}}\right)^{l_{i}/n_{i}} \frac{x_{i}\gamma_{i0}c_{vi}}{n_{i}} \left(kA_{N} - A_{i}\right)$$

тогда искомые параметры выражаются из соотношений:

$$n = \frac{F_1 F_3}{F_2^2} - 1, \quad A = kA_N - \frac{nF_2}{F_1}, \quad \rho_0 = \frac{1}{F_1} \left(\frac{A}{P + kA_N}\right)^{1/n},$$

$$l = 1 - F_1 F_5 / (F_2 F_4), \quad \gamma_0 \rho_0 c_v = F_4 n / F_1.$$
 (6)

Ударные волны инициируют в веществе полиморфные превращения. Для того чтобы произошел фазовый переход, необходимо, чтобы давление и температура в веществе превысили некоторые пороговые значения. Поэтому для более точного описания фазовых переходов следует учитывать температурные зависимости характеристик фаз.

Зависимости удельных теплоемкостей с_р от температуры и температуры плавления при нормальном давлении приведены для графита и алмаза в [9] в виде

$$c_p(T) = a + bT + cT^{-2} + dT^2 + eT^3$$
, при 300 K < T < 2500 K
и $c_p(T)=25$ Дж/К·моль, при T>2500 K для алмаза,
и $c_p(T)=27$ Дж/К·моль, при T>4130 K для графита;
для вольфрама в [10] в виде
 $c_p(T) = a + bT + cT^{-2} + dT^2 + eT^3 + fT^4$, при 300 K < T < 3695 K
и $c_p(T)=45$ Дж/К·моль, при T>3695 K;

для меди в [11] в виде

 $c_p(T) = 5.41 + 1.5 \cdot 10^{-3}T$, при 300 K < T < 1357 K

и c_n(T)=7,5 кал/К·моль, при T>1357 К.

Будем считать, что при давлениях ударного нагружения для удельных теплоемкостей выполняются те же зависимости. В механике гетерогенных сред принято удельную теплоемкость с, смеси задавать

соотношением $c_v = \sum_{i=1}^{N} x_i c_{vi}$, где c_{vi} – удельные теплоемкости компонентов. В [12] приведено соотноше-

ние Нернста-Линдемана, связывающее удельные теплоемкости при постоянном давлении с_р и постоянном объеме с_V для металлов: $c_p - c_V = 0,0214c_p \frac{T}{T_m}$, где T_m- температура плавления. Примем, что для

алмаза и графита тоже выполняется это соотношение. Тем самым зададим зависимость удельной теплоемкости су от температуры.

Используем полученное уравнение состояния с коэффициентом Грюнайзена, зависящим от объема, и удельной теплоемкостью, зависящей от температуры, при расчете ударных адиабат смеси. Уравнения Гюгонио для равновесной смеси имеют вид:

$$\rho_{00}(D-u_0) = \rho(D-u), \quad P-P_0 = \rho_{00}(D-u_0)(u-u_0), \quad E-E_0 = \frac{P+P_0}{2} \left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho}\right), \tag{7}$$

где *u*, *P*, *E* – массовая скорость, давление и энергия среды за фронтом ударной волны, u_0 , P_0 , E_0 – массовая скорость, давление и энергия среды перед фронтом ударной волны, D – скорость фронта ударной волны, ρ_{00} начальная плотность смеси. Добавление к системе уравнений (7) уравнений состояния среды (2) и (3) с параметрами, определяемыми соотношениями (6), приводит к системе четырех уравнений для пяти неизвестных и, D, P, E, p. Задавая значение скорости среды за фронтом ударной волны, из системы уравнений (7), (2), (3) можно определить значения всех остальных ее параметров.

Для получения уравнений состояния сплошных и пористых смесей, представленных в настоящей работе, использованы значения параметров индивидуальных веществ, приведенные в табл. 1.

Таблица 1

Вещество	$ ho_{_{ii0}},$ кг/м $^{ m 3}$	$A_{\!_i},$ Па	n _i	<i>С_{vi}</i> , кДж/(кг∙К)	γ_i	l_i
Воздух	1,3	0,695.10-3	2,2	0,718	0,16	0
Медь	$8,93 \cdot 10^{3}$	$347,5.10^{8}$	4,0	0,382	2,00	0,80
Вольфрам	$19,235 \cdot 10^3$	$774,8.10^{8}$	4,0	0,152	2,00	1,06
Никель	$8,875 \cdot 10^3$	453,0·10 ⁸	4,2	0,460	1,91	1,04
Графит	$2,265 \cdot 10^3$	120,0·10 ⁸	4,0	0, 680	2,00	0,8
Алмаз	$3,515 \cdot 10^3$	1400,0·10 ⁸	3,0	0,510	2,00	1,2

Параметры уравнений состояния индивидуальных веществ

На рис. 1 приведены расчетные (1, 2, 3) и экспериментальные ударные адиабаты и изэнтропы разгрузки (1', 2', 3') сплошной и пористой меди. Под пористостью т понимается отношение плотности монолита к плотности пористого вещества. На рис. 2 приведены ударные адиабаты сплошного (1) и пористого (2, m=1.801) вольфрама. Кривые 1' и 2' иллюстрируют зависимость скорости звука в нагруженном веществе от массовой скорости за фронтом ударной волны для сплошного и пористого вещества соответственно.



На рис. 3, 4 приведены ударные адиабаты пористой меди (m=10,034) в координатах массовая скорость – давление и плотность – давление соответственно.



разгрузки пористой меди: m=10,034; + -[19]

Рис. 4. У дарная адиаоата и изэнтропы разгрузки и нагружения пористой меди: m=10,034; + -[19]

Результаты сравнения расчетных и экспериментальных данных позволяют сделать вывод о применимости предлагаемого уравнения состояния смеси для описания поведения пористых веществ как для малых, так и для больших пористостей.

На рис. 5 приведены ударные адиабаты для пористых систем вольфрам – медь с различной массовой долей компонентов и различной пористостью. Для наглядности на графиках ударные адиабаты смещены вдоль оси *D* на указанные рядом с кривыми величины. На рис. 6 приведены ударные адиабаты для систем вольфрам – никель – медь (ρ_{T0} – начальная плотность монолита). При расчете ударных адиабат, приведенных на рис. 6 использовались уравнения состояния чистых веществ, приведенные в [22]. В [22] используется модель расчета адиабат, предложенная в [23], но расчеты проведены с коэффициентом Грюнай-


зена, зависящим от температуры. Сравнение показывает, что результаты расчета ударных адиабат смесей обоими способами хорошо согласуются между собой и экспериментальными данными.

Р, ГПа



4

Результаты сравнения расчетных и экспериментальных ударных адиабат пористых смесей нескольких конденсированных компонентов подтверждают правомерность использования предлагаемого уравнения состояния смеси.

В [24] были проведены две серии расчетов ударных адиабат образцов графита различной пористости, в которых кинетика фазового перехода графит – алмаз задавалась различными соотношениями. По результатам сравнения расчетных и экспериментальных ударных адиабат была выбрана следующая модель кинетики:

$$x_{d} = \begin{cases} 0, & ecnu \quad P < P_{s} \\ x_{g} \left(1 - \frac{P_{s}}{P} \right), & ecnu \quad P > P_{s}. \end{cases}$$
(8)

Здесь x_g и x_d массовые концентрации графита и алмаза соответственно, P_s – давление начала фазового превращения графит – алмаз. Критические параметры, характеризующие начало превращения $P_s, T_s, \rho_{gs},$ определялись пересечением P-T-диаграммы нагружения с линией, разделяющей области стабильного и метастабильного состояний алмаза [25, 26] (линия А на рис. 7). В расчетах считалось, что как только давление в ударной волне превысит пороговое давление P_s , соответствующая доля графита мгновенно перейдет в алмаз.

На рис. 7–9 приведены ударные адиабаты пористого графита (т=1.211), претерпевающего фазовый переход. Сплошной линией проведены адиабаты, рассчитанные с помощью уравнения состояния смеси с постоянным коэффициентом Грюнайзена и постоянной удельной теплоемкостью; штриховыми – с коэффициентом Грюнайзена, зависящим от объема, и удельной теплоемкостью, зависящей от температуры. На рис. 7, 8 буквами В и С обозначены точки, в которых начинается фазовое превращение. Выше этих точек в смеси присутствуют одновременно графит и алмаз. На рис. 8 приведены расчетные и экспериментальные ударные адиабаты при однократном ударном сжатии. Сравнение положений точек излома, в которых начинается фазовое превращение, на расчетных адиабатах и экспериментальных данных позволяет сделать заключение о характере изменения удельных теплоемкостей с изменением температуры и давления.

На рис. 9 и 10 приведены расчетные и экспериментальные ударные адиабаты при повторном ударном сжатии. Здесь u_1 – массовая скорость за фронтом первой ударной волны при выходе на границу раздела с более жесткой преградой.

Результаты сравнения приведенных расчетных кривых с экспериментальными данными по повторному сжатию также позволяют сделать вывод о применимости предложенного уравнения состояния для описания поведения пористых смесей.



Рис. 7. Ударная адиабата пористого графита (m=1,211) и кривая равновесия высокого давления







Выводы. Как показали результаты сравнения расчетных и экспериментальных ударных адиабат, предложенное уравнения состояния пористой смеси нескольких конденсированных компонентов с коэффициентом Грюнайзена, зависящим от объема, и удельной теплоемкостью, зависящей от температуры, достаточно точно описывает поведение пористых веществ, сплошных и пористых смесей в широком диапазоне значений давления.

Библиография

1. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 336 с.

2. Ляхов Г.М. Основы динамики взрывных волн в грунтах и горных породах. М.: Недра, 1974. 192 с.

3. Дунин С.3., Сурков В.В. Структура фронта ударной волны в твердой пористой среде // ПМТФ. 1979. № 5. С. 106–114.

4. Бельхеева Р.К. Уравнение состояния пористой смеси конденсированных компонентов при динамических нагрузках // Вестник НГУ. Сер. Математика, механика, информатика. 2009. Т. 9. Вып. 3. С. 23–32.

5. Бельхеева Р.К. Уравнение состояния пористой смеси конденсированных компонентов с переменной теплоемкостью // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2010. Т. 5. Вып. 1. С. 82–88.

6. Бельхеева Р.К. Построение уравнения состояния пористой смеси конденсированных компонентов // ПМТФ. 2012. Т. 53, № 4. С. 3–15.

7. Бельхеева Р.К. Термодинамическое уравнение состояния для описания поведения пористой смеси при больших давлениях и температурах // ПМТФ. 2007. Т. 48, № 5. С. 53–60.

8. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматгиз, 1963. 632 с.

9. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. II, книга первая / отв. ред. В.П. Глушко. М.: Наука, 1979. 341 с.

10. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. IV, книга первая / отв. ред. В.П. Глуш-ко. М.: Наука, 1982. 622 с.

11. Уикс К.Е., Блок Ф.Е. Термодинамические свойства 65 элементов, их оксидов, галогенов, карбидов и нитридов. М.: Металлургия, 1965. 240 с.

12. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах: справочник. М.: Металлургия, 1989. 382 с.

13. McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W. The equation of state of solids from shock wave studies // High Velosity Impact Phenomena / Ed. by R. Kinslow. N.Y.: Academic Press, 1970. P. 293–417: App. P. 515–568.

14. Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Сутулов Ю.Н. Адиабаты пористых образцов и изэнтропы расширения сплошной меди // ПМТФ. 1984. № 1. С. 119–123.

15. Альтшулер Л.В., Бушман А.В., Жерноклетов М.В. и др. И зэнтропы разгрузки и уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии // ЖЭТФ. 1980. Т. 78, № 2. С. 741–760.

16. Баканова А.А., Дудоладов И.П., Сутулов Ю.Н. Ударная сжимаемость пористых вольфрама, молибдена, меди и алюминия в области низких давлений // ПМТФ. 1974. № 2. С. 117–122.

17. Крупников К.К., Бражник М.И., Крупникова В.П. Ударное сжатие пористого вольфрама // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. Вып. 3. С. 675–685.

18. McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W. Equation of state fjr Nineteen metallic elements from shockwave Measurements to two megabars // J. Appl. Phys. 1960. V. 31. N 7. P. 1253–1297.

19. Грязнов В.К., Фортов В.Е., Жерноклетов М.В., и др. Ударно-волновое сжатие сильнонеидеальной плазмы металлов и ее термодинамика // ЖЭТФ. 1998. Т. 114, № 4. С. 1242–1265.

20. Isbel W. H., Shipman F. H., Jones A.H. Hugoniot equation of state measurements for eleven materials to five megabars: Report / General Motors Corp.; Mat. Sci. Lab. N MSL-68-13. N.Y., 1968.

21. Compendium of shock wave data: Report / Lawrence Livermore Lab. N UCRL-50108. Livermore, 1977. P. 678–679.

22. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Расчет ударной адиабаты порошковых смесей с учетом зависимости коэффициента Грюнайзена от температуры // Вестник НГУ. Сер. Физика. 2009. Т. 4, № 4. С. 71–78.

23. Кинеловский С. А., Маевский К. К. Простая модель расчета ударных адиабат порошковых смесей // ФГВ. 2011. Т. 47, № 6. С. 101–109.

24. Бельхеева Р.К. Моделирование прямых и обратных фазовых переходов при ударно-волновом нагружении графитосодержащего образца // Сиб. журнал индустриальной математики. 2007. Т. Х, № 1(29). С. 25-32.

25. Bundy F.D. Direct Conversion of Graphite to Diamond in Static Pressure Apparatus // J. Chem. Phys. 1963. V. 38, N 3. P. 631–643.

26. Дерибас А.А., Ставер А.М. Синтез алмазов при ударном нагружении смесей графит-металл // ФГВ. 1977. № 3. С. 477–481.

27. Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В. // Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / под ред. Р.Ф. Трунина. Саров, РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001. 446 с.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ В КОРОННОМ РАЗРЯДЕ

*Печеркин В.Я., Василяк Л.М., Владимиров В.И., Депутатова Л.В., Наумкин В.Н.

Объединенный институт высоких температур РАН

*vpecherkin@yandex.ru

Экспериментально показано, что отрыв заряженных металлических частиц с плоского электрода в электрическом поле в исследуемых замкнутых и открытых объемах наблюдается только при возникновении коронного разряда. Исследована динамика движения пылевых частиц в коронном разряде. По оценкам заряд металлических частиц с диаметром 100 мкм, движущихся в электрическом поле плоского конденсатора, может достигать значений $10^5 - 10^6$ элементарных зарядов.

Ключевые слова: макрочастица, коронный разряд, заряд частицы.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF DUST PARTICLES DYNAMICS IN CORONA DISCHARGE

Pecherkin V.Ya., Vasilyak L.M., Vladimirov V.I., Deputatova L.V., Naumkin V.N.

Joint Institute for High Temperatures RAS

We are showed an ejection of metal particles from plane electrode in electric field of closed and open volumes is observed in case of corona discharge origination. Investigations of dust particle dynamic movement in corona discharge were carried. Calculated charge of moving metal particles with diameter of 100 μ m in electric field of plane capacitor can achieve the value of 10^5-10^6 elementary charges.

Keywords: particulate, corona discharge, charge of particle.

Введение. Макрочастицы с очень большим значением заряда $q \sim 10^6 - 10^7$ элементарных зарядов (е) можно получить с помощью электронного пучка, либо в вакууме, либо в газе низкого давления [1]. При атмосферном давлении такой способ зарядки затруднен из-за сильной ионизации газа. В газовом разряде заряд пылевых частиц на 2–3 порядка меньше, поскольку энергия электронов в ВЧ или тлеющем разряде низкого давления много ниже энергии электронного пучка и составляет несколько электронвольт. Другим путем является зарядка макрочастицы до высокого потенциала при контакте с металлическим электродом, подключенным к источнику высокого напряжения. Если затем частицы перенести в объем, то можно сохранить заряд. Возникает естественный вопрос: «Может ли этот механизм быть реализован в газовом электрическом разряде или на электроде с нулевым потенциалом?» В работе [2] показана возможность получения металлических частиц с такими зарядами при атмосферном давлении в воздухе в сильных электрических полях Е~10 кВ/см. Столь высокие значения напряженности электрического поля могут быть получены в коронном разряде при атмосферном давлении.

Цель данной работы – исследование динамики движения пылевых частиц в коронном разряде в замкнутых и открытых объемах.

Экспериментальная установка. В качестве замкнутого объема использовалась разрядная ячейка с кварцевыми трубками различного внутреннего диаметра (12; 16; 29 мм) (рис. 1). Источник высокого напряжения позволял плавно регулировать выходное напряжение постоянного тока в пределах от 0 до 40 кВ. Величина напряжения регистрировалась высоковольтным статическим вольтметром. Величина тока регистрировалась микроамперметром постоянного тока. Нижний электрод был выполнен в виде цилиндра из латуни, верхний электрод из молибденовой проволоки диметром 0,8 мм с радиусом закругленного острия 50 мкм. Расстояние между электродами составляло 28 мм. Конструкция разрядной ячей-ки позволяла проводить исследования динамики пылевых частиц в коронном разряде в различных газах.



- Рис. 1. Схема экспериментальной установки по исследованию плазменно-пылевых структур при атмосферном давлении. 1. Кварцевая разрядная трубка. 2. Верхний электрод.
 - 3. Нижний плоский электрод. 4. Лазер. 5. Регистрирующая видеокамера. 6. Компьютер.
 - 7. Балластный резистор. 8. Токовый шунт. 9. Высоковольтный вольтметр.
 - 10. ВВИ высоковольтный источник напряжения.
 - 11. in вход для подачи инертных газов. 12. out выход инертных газов

Разрядная ячейка с открытым объемом типа плоский конденсатор состояла из двух параллельных медных пластин, каждая из которых имела диаметр 150 мм. Зазор между пластинами составлял 28 мм (рис. 2а).



а) плоский конденсатор

б) острие-плоскость

Рис. 2. Схемы разрядных ячеек для исследования пылевых частиц в свободно горящем коронном разряде. 1. Изоляторы. 2. Верхний электрод. 3. Нижний плоский электрод. 4. Лазер. 5. Регистрирующая видеокамера

Разрядная ячейка с открытым объемом типа острие-плоскость состояла из верхнего острийного электрода, выполненного из молибденовой проволоки диметром 0,8 мм с радиусом закругленного острия 50 мкм, и нижнего плоского из медной пластины диаметром 150 мм. Зазор между острием и пластиной составлял 28 мм (рис. 26).

Динамика частиц регистрировалась высокоскоростной видеокамерой HiSpec (4) с максимальным разрешением 1280х1024 пикселей. Для устойчивой регистрации частиц с размерами 10–150 мкм использовался полупроводниковый лазер с длиной волны 650 нм с регулируемой мощностью от 10 до 100 мВт (5). Подсветка пылевых частиц осуществлялась как цилиндрическим лазерным лучом, так и лазерным ножом с толщиной луча 150 мкм.

Для исследования использовались латунные частицы с размерами 50-150 мкм (рис. 3).



Рис. 3. Фото исследуемых латунных частиц. Цена большого деления 100 мкм

Частицы помещались в разрядные ячейки таким образом, чтобы они покрывали тонким слоем поверхность плоского нижнего электрода. К электродам прикладывали высокое напряжение постоянного тока вплоть до появления искрового разряда. Результаты исследований приведены ниже.

Замкнутый разрядный объем. Применялась разрядная ячейка с кварцевой трубкой с внутренним диаметром 16 мм (рис. 1). Перед началом эксперимента латунные частицы насыпались равномерным слоем на нижний электрод. Толщина слоя составляла около 2 мм. Эксперименты проводились в воздухе, неоне и аргоне при атмосферном давлении. На острие подавалось напряжение положительной полярности. В воздухе при увеличении напряжения наблюдался отрыв частиц от нижнего электрода в момент появления тока коронного разряда. Движение частиц наблюдалось вплоть до появления искрового пробоя. В неоне и аргоне никакого движения частиц не наблюдалось даже при поднятии напряжения до возникновения искрового разряда. В воздухе при появлении тока короны частицы начинали отрываться от плоского электрода вблизи стенок разрядной трубки и подниматься вверх вдоль стенок (рис. 4). Вблизи острия частицы начинали двигаться по направлению к нему и, не касаясь острия, изменяли направление движения и начинали двигаться вниз и оседали на плоский электрод. При токе короны 0,6 мкА такое круговое движение частиц наблюдалось длительное время.



Рис. 4. Фото движущихся латунных частиц в коронном разряде, ограниченном кварцевой трубкой диаметром 16 мм

Открытый разрядный объем. Применялась разрядная ячейка острие плоскость (рис. 2б). Диаметр нижнего плоского электрода составлял 150 мм. Перед началом эксперимента частицы насыпались на нижний электрод горкой. Максимальная высота достигала 10 мм, диаметр основания составлял 30 мм (рис. 5). Рабочий газ – воздух. При увеличении напряжения вплоть до искрового пробоя отрыва частиц от нижнего электрода не наблюдалось.



Рис. 5. Фото латунных частиц на нижнем электроде. Движения частиц не наблюдалось при изменении напряжения в диапазоне (0–25) кВ

Если на нижний электрод положить диэлектрическую пластину из кварцевого стекла толщиной 4 мм и диаметром 25 мм и насыпать на стекло латунные частицы (рис. 6), то в этом случае наблюдается отрыв частиц от поверхности стекла в момент появления коронного разряда на острие, а также при дальнейшем увеличении напряжения. Отрыв частиц наблюдается как при отрицательной полярности напряжения на острие (рис. 6а), так и при положительной (рис. 6б). Однако, траектории начального движения частиц при отрицательной полярности направлены ближе к нормали, а при положительной ближе к плоскости электрода. В обоих случаях частицы выносились из области коронного разряда и оседали либо на кварцевой пластине, либо на нижнем плоском электроде.



02.08.2011 17:19:03 1361 6587,9[ms] 640×346, 200 Hz, 4994 μs, *1, HiSpec #00181, V1.11.4

Рис. 6а. Фото движущихся латунных частиц, помещенных на диэлектрическую прокладку при отрицательном потенциале на острие. Ток 0.4 мкА. Напряжение на острие – 12 кВ



2.08.2011 16:53:23 1395 9959,4[ms] 640×346, 200 Hz, 4994 μs, *1, HiSpec #00181, V1.11.4

Рис. 6б. Фото движущихся латунных частиц, помещенных на диэлектрическую прокладку при положительном потенциале на острие. Ток 0.4 мкА. Напряжение на острие – 12 кВ

В плоском конденсаторе (рис. 2a) при подаче напряжение на обкладки конденсатора мы также наблюдали движение частиц после возникновения коронного разряда в воздухе (рис. 7). Движение наблюдалось как при положительной полярности напряжения на верхнем электроде, так и при отрицательной полярности. При этом частицы многократно ударялись об электроды. По мере движения частицы выносились из зоны разряда в область слабого поля за границей электродов и падали на нижнюю поверхность.



Рис. 7. Фото движущихся латунных частиц в плоском конденсаторе. Ток 0.1 мкА. Напряжение 16 кВ

В поле плоского конденсатора была выполнена оценка заряда, приобретенного латунными частицами, в предположении, что средний размер частиц сферической формы составлял 100 мкм. Для определения скорости движения пылевых частиц применялась высокоскоростная видеосъемка образов пылевых частиц, освещаемых лазерным ножом, что позволило проводить видеозапись со скоростью 4000 кадров в секунду. Размер области наблюдения составлял 16,46 х 24,82 мм². Скорость определялась по смещению образа пылевой частицы за несколько кадров. Обработка производилась вручную. Выбиралась отчетливо видимая частица, пролетающая в лазерном ноже более половины видимого пространства по прямолинейной траектории с постоянной скоростью. Для определения скоростей и ускорений проводилась покадровая обработка видеоизображений пролета пылевых частиц. На каждом кадре определялось положение исследуемой частички. Положение определялось по переднему краю трека, где яркость пикселей составляла более 170 (максимальная яркость составляла 255). Далее из положения частицы на новом кадре вычиталось ее положение на предыдущем кадре. В результате получалось значение, характеризующее путь, пройденный данной частицей между двумя кадрами. Зная частоту видеосъемки и масштаб видеоизображения можно вычислить среднюю скорость частицы в данный момент времени. Ускорение определялось как изменение вычисленной средней скорости на каждом кадре. В результате средняя скорость наблюдаемых частиц составила 1 м/с, ускорение 1.2x10² м/с². Величина заряда для частиц с диаметром 100 мкм составила $10^5 - 10^6$ e.

Модель зарядки и отрыва частиц от поверхности. Рассмотрим механизм отрыва металлических макрочастиц с катода в плоском конденсаторе при напряжениях меньше пробойных, когда ионизация газа мала ($n_e \sim 10^5$ см⁻³). В воздухе атмосферного давления в промежутках с межэлектродным расстоянием большем 3 см Таундсеновский механизм пробоя сменяется на стримерный, если в лавине рождается критическое число электронов >10⁸. Неоднородность на катоде в виде макрочастицы усиливает электрическое поле за счет своей поляризации и способствует развитию с ее поверхности анодонаправленного стримера, в следе которого образуется локальный пространственный заряд положительных ионов. Облако ионов медленно дрейфует к катоду и может увеличиваться еще и за счет положительных катодонаправленных стримеров, прорастающих с анода. Локальное поле положительного пространственного заряда дополнительно усиливает поле вблизи частицы и способствует ее отрыву от поверхности катода. На заряженную частицу на поверхности горизонтально расположенного катода действует электрическая сила F = qE, где E – напряженность полного электрического поля в промежутке, направленная по нормали к катоду, которая пытается оторвать ее от поверхности и преодолеть силу тяжести mg. Здесь $m=4\pi\rho r^{3}/3$ – масса частицы, ρ – дельная плотность вещества, r – радиус. Электрод притягивает частицу с силой равной силе «изображения». Рассматривая частицу как точечный заряд эту силу можно записать в виде $q^2/4x^2$, где x – расстояние до поверхности катода. Кроме того, металлическая частица поляризуется в электрическом поле E, приобретая дипольный момент, $d=r^3E$. Наличие дипольного момента приводит к дополнительной силе, связанной с притяжением диполя к своему изображению. Эта сила равна $3d^2/4x^4$. Учитывая принцип суперпозиции полей, суммарная сила равна –

$$F=qE-q^2/4x^2-(3/4)d^2/x^4-mg.$$

Если частица контактирует с катодом, то можно принять x = r, а заряд частицы $q = 4\sigma \pi r^2$, где σ – средняя поверхностная плотность заряда. Из-за поляризации частицы поверхностная плотность заряда σ распределена по ее поверхности неравномерно. Воспользуемся простейшим приближением и будем считать, что поверхностная плотность заряда σ равна средней поверхностной плотности заряда на плоском электроде: $\sigma = E/2\pi$. В этом случае

$$F=E^2r^2/4-mg.$$

Отрыв частицы возможен, если F \ge 0, а поле в промежутке $E \ge E_0=2 (mg)^{0.5}/r$. В этом случае заряд на частице будет $q=q_o=2r^2E_o=4r (mg)^{0.5}$. Условие $F\ge 0$ можно переписать в виде

$$(E^2/8\pi)$$
 $2\pi r^2 \ge mg$.

Это неравенство имеет простой физический смысл: отрыв частиц происходит, если пондеромоторная сила электростатического давления, равная произведению плотности энергии поля $E^2/8\pi$ на площадь поверхности частицы $2\pi r^2$, обращенной к этому полю, превосходит силу тяжести. Из полученных соотношений следует, что заряд пропорционален электрическому полю E_0 и увеличивается с увеличением массы частицы $q \sim m^{5/6}$, а электрическое поле, необходимое для отрыва частицы $E_0 \sim m^{1/6}$, слабо зависит от массы.

Поляризация металлических частиц в однородном поле приводит к усилению напряженности электрического поля на поверхности частицы в три раза, по сравнению с полем E_0 . Примерно такое же усиление поля вблизи частицы возможно за счет поля избыточного пространственного заряда ионов,

образующихся в следе стримеров. Столь существенное локальное искажение поля способствует возникновению новых стримеров и дальнейшему усилению поля. Отрыв частицы с катода в этом случае происходит в полях $E < E_0$, при заряде на частице $q < q_0$. По такому механизму возможна зарядка металлических и диэлектрических частиц размером порядка 10^{-2} см в стримерном разряде в воздухе до значений 10^6 е.

Выводы:

Движение металлических пылевых частиц, находящихся на плоском потенциальном нижнем электроде, в исследуемых замкнутых и открытых объемах происходит только при возникновении коронного разряда на острие. Ограничение объема коронного разряда с острия диэлектрическими стенками (разрядной трубкой) улучшает условия подъема и левитации частиц и предотвращает уход частиц из зоны разряда.

В плоской геометрии также можно создать благоприятные условия для подъема и движения частиц. Наблюдается плотное облако левитирующих движущихся частиц.

Библиография

1. Филиппов А.В., Васильев М.Н., Гавриков А.В. и др. Сверхвысокая зарядка пылевых частиц в неравновесной плазме // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86, Вып. 1. С. 16–21.

2. Molotkov V.I., Pecherkin V.Ya., Vasilyak L.M., Vetchinin S.P. Polarization mechanism of particulate charging in strong electric field at atmospheric pressure // VII International Conference on Plasma Physics and Plasma Technology (PPPT-7). Minsk. 2012. P. 33–36.

Требования к оформлению научной статьи, представляемой в журнал «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета»

Для публикации в журнале «Известия Кабардино-Балкарского государственного университета» принимаются статьи на русском или английском языках, содержащие результаты актуальных фундаментальных и прикладных исследований, передовых наукоемких технологий, научных и научно-методических работ.

1. Основные документы, необходимые для публикации

1.1. Один экземпляр статьи в бумажном виде и на электронном носителе отдельным файлом (на диске); на наклейке диска (дискеты) (обязательно!) указываются фамилия автора (авторов) и название статьи.

1.2. Полные сведения об авторе (авторах) на русском и английском языках в бумажном виде и в электронном варианте, оформленном отдельным от статьи файлом, который включает в себя следующие данные:

• фамилия, имя, отчество (полностью) каждого автора;

• место работы (наименование организации), ученая степень, ученое звание, должность каждого автора;

• контактные телефоны, почтовый индекс и адрес, адрес электронной почты (e-mail) каждого автора.

1.3. Сопроводительное письмо на бланке учреждения, где выполнена работа.

1.4. Внешняя рецензия доктора наук (по желанию).

1.5. Акт экспертизы о возможности опубликования в открытой печати – для физико-математических, химических, биологических, технических, экономических наук и науки о земле.

1.6. Справка об учебе в аспирантуре или докторантуре для аспирантов и докторантов.

1.7. «Лицензионный договор» (один на авторский коллектив) в 2-х экз. Без Договора статья не будет опубликована. Текст Договора размещен на сайте журнала «Известия КБГУ».

2. Правила оформления статьи

2.1. Объем статьи – в пределах 15 страниц формата А4, интервал – 1,5, размер шрифта Times New Roman Cyr 14 пт; поля страницы: слева – 3 см, справа – 1 см, сверху – 2,0 см, снизу – 2,5 см.

Краткие сообщения – в пределах 4 машинописных страниц, включающих не более 2 рисунков и 2 таблиц. 2.2. Статья должна включать:

• индекс УДК (универсальная десятичная классификация) в верхнем левом углу;

• название статьи (на русском и английском языках);

• фамилия, имя, отчество автора (авторов) (на русском и английском языках);

• реферат статьи (до 500 знаков) (на русском и английском языках);

• ключевые слова (5–7 слов на русском и английском языках);

• текст статьи, отражающий цель исследования, методы работы, собственно исследования, конкретные выводы;

• библиография (в библиографическом списке нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте; номер источника в тексте указывается в квадратных скобках – автоматическая нумерация ссылок не допускается);

• подпись автора (авторов).

2.3. Иллюстрации к статье (рисунки, фотографии) должны быть черно-белыми, четкими (разрешение не менее 300 dpi, расширение *jpg) и вставлены в текст. Обычный размер иллюстраций – не более половины листа A4. Формулы и символы помещаются в текст с использованием редактора формул Microsoft Education. Таблицы вставляются в текст; ссылки на рисунки и таблицы обязательны; названия таблиц и подрисуночных подписей обязательны.

2.4. Нумерация страниц обязательна.

2.5. Тип файла в электронном виде - RTF.

Образцы оформления библиографии:

книга

Самарский А.А., Гулин А.В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. 210 с.

Интегральные схемы: Принципы конструирования и производства / под ред. А.А. Колосова. М.: Сов. радио, 1989. 280 с.

статья из книги, сборника, журнала

Петренко В.И., Доготь А.Я. Пневмогидравлический кавитационный процесс // Геодинамические основы прогнозирования нефтегазоносности недр: тезисы докладов 1-й Всесоюзной конференции. М., 1988. Ч. 3. С. 616–617.

Хлынов В.А. Общегосударственное планирование рыночной экономики: Опыт Японии // Экономист. 1994. № 4. С. 89–94.

Базаров А.Ж. О некоторых нелокальных краевых задачах для модельных уравнений второго порядка // Известия вузов. Математика. 1990. Т. 2, № 3. С. 11–15.

диссертации и авторефераты диссертаций

Ерков С.А. Формирование художественного восприятия произведений изобразительного искусства на уроках изобразительного искусства в 5, 6 классах средней общеобразовательной школы: дис... канд. пед. наук. М., 2006. 184 с.

Вахромов Е.Е. Психологические особенности самоактуализации подростков с отклоняющимся поведением: автореф. дис... канд. психол. наук. М., 2003. 30 с.

При несоблюдении указанных правил редакция оставляет за собой право не публиковать статью.

3. Порядок рецензирования

3.1. Рукопись направляется на рецензирование ведущим специалистам в данной области (внешнее и внутреннее рецензирование).

3.2. Результаты рецензирования редакция сообщает автору по электронной почте.

3.2. По результатам рецензирования редколлегия принимает решение о целесообразности опубликования материала, о чем дополнительно сообщается автору.

Статьи представляются в редакционно-издательский отдел ИПЦ КБГУ.

Адрес ИПЦ КБГУ: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Контактный телефон: (8662) 72-23-13.

E-mail: <u>rio@kbsu.ru</u>, <u>izvestia_kbsu@mail.ru</u>. E-mail-адрес защищен от спам-ботов, для его просмотра у вас должен быть включен Javascript.

Ответственный секретарь редакции – Шогенова Марина Чашифовна.

После положительного решения редколлегии о публикации статьи в журнале «Известия КБГУ» автор (или авторы) статьи перечисляет на р. сч. КБГУ плату из расчета 500 руб. (в т.ч. НДС) за страницу рукописи.

Назначение платежа: редакционно-издательские услуги («Известия КБГУ»), код дохода 07430201010010000130, разрешение № 0732069510 от 30.03.05 г. пункт 1. В стоимость входят расходы по доставке журнала по территории России. Автор (или авторы) статьи получает 2 экземпляра журнала бесплатно.

Для выкупа дополнительных номеров журнала необходимо передать в редакцию (ИПЦ КБГУ) письмо-заявку с указанием номера и количества экземпляров журнала и перечислить на р. сч. КБГУ плату из расчета 250 руб. (в т.ч. НДС) за один экземпляр журнала с назначением платежа: редакционно-издательские услуги (за журнал «Известия КБГУ»), код дохода 07430201010010000130, разрешение № 0732069510 от 30.03.05 г. пункт 1.

Реквизиты КБГУ для платежей:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова» (КБГУ)

Почтовый и юридический адрес: 360004, Кабардино-Балкарская Республика, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173 Телефон: 42-25-60, Voice/fax: +7(495) 3379955 Телетайп: 257245 «Альфа» E-mail: bsk@kbsu.ru ОКПО 02069510 **OKOHX 92110** ОГРН 1020700739234 от 22.07.11г. ОКОГУ 13240 OKATO 8340100000 ОКЭВД 80.30.1 ОКОПФ 72 ОКФС 12 Банковские реквизиты: Получатель: ИНН 0711037537/ КПП 072501001 Отдел № 1 УФК по Кабардино-Балкарской Республике (0401 КБГУ л/с 20046Х17540) Банк получателя: ГРКЦ НБ Кабардино-Балкарск. Респ. Банка России г. Нальчика БИК 048327001 P/c 40501810100272000002 КБК 000000000000000130

Копия платежного документа передается или высылается в редакцию журнала по электронной почте.

ИЗВЕСТИЯ КАБАРДИНО-БАЛКАРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

PROCEEDING OF THE KABARDINO-BALKARIAN STATE UNIVERSITY

TOM IV, № 1, 2014

Редактор *Л.3. Кулова* Компьютерная верстка *Е.Л. Шериевой* Корректор *Е.А. Балова*

В печать 25.02.2014. Формат 60х84 ¹/₈. Печать трафаретная. Бумага офсетная. 13.02 усл.п.л. 13.0 уч.-изд.л. Тираж 1000 экз. Заказ № 7099. Кабардино-Балкарский государственный университет. 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Полиграфическое подразделение КБГУ. 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.