

**ТРУДЫ
РФЯЦ-ВНИИЭФ**

26

Часть I

2021

Ф Г У П
«РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР -
ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ»

ТРУДЫ
РФЯЦ-ВНИИЭФ

Научно-исследовательское издание

ВЫПУСК 26

В двух частях

Саров

2021

УДК 539.1(06)
ББК 22.38
Т78

DOI 10.53403/978-5-9515-0516-3

Т78 **Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ.** Научно-исследовательское издание. Вып. 26:
в 2 ч. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2021.
ISBN 978-5-9515-0502-6
Часть 1. – 360 с.
ISBN 978-5-9515-0516-3

В сборнике «Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ» опубликованы результаты научных исследований, а также методических и проектно-конструкторских разработок в области прикладных задач теоретической физики, математического моделирования физических процессов, ядерной физики, физики ядерных реакторов, исследований по термоядерному синтезу, электрофизики, физики ускорителей, приборов и техники эксперимента, физики лазеров, гидродинамики, реологии, материаловедения, средств защиты от несанкционированных действий, электроники, радиотехники, оптоэлектроники.

Главный редактор: академик РАН Р. И. Ильяев

Редационный совет выпуска: академик В. П. Незнамов, академик Ю. А. Трутнев, Е. В. Куличкова, д-р техн. наук Н. А. Билык, канд. физ.-мат. наук С. В. Воронцов, д-р физ.-мат. наук А. Е. Дубинов, д-р техн. наук А. И. Коршунов, канд. физ.-мат. наук С. В. Маврин, д-р техн. наук В. Н. Морозов, д-р техн. наук С. В. Колесников, д-р физ.-мат. наук Б. А. Надыкто, д-р физ.-мат. наук В. А. Раевский, д-р физ.-мат. наук В. Г. Рогачев, канд. физ.-мат. наук В. Г. Куделькин, д-р техн. наук Ю. И. Файков, канд. физ.-мат. наук В. В. Хижняков, д-р техн. наук П. Ф. Шульженко, Ю. М. Якимов

ISBN 978-5-9515-0502-6
ISBN 978-5-9515-0516-3 (ч. 1)

© ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2021

ТРУДЫ РФЯЦ-ВНИИЭФ

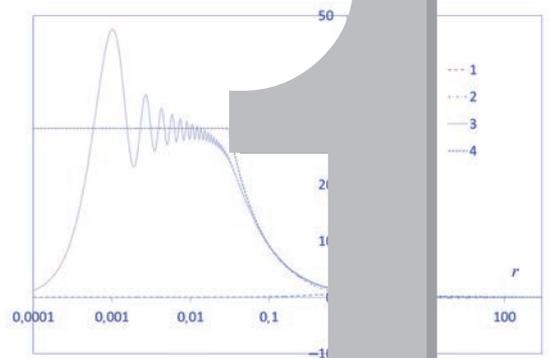
ВЫПУСК 26

Часть 1

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 1

| | |
|--|----|
| <i>Горбатенко М. В.</i> Получение уравнений самосогласованного движения заряженных частиц методом Эйнштейна–Инфельда–Гоффмана | 6 |
| <i>Пятаков Н. П., Солдатов А. В.</i> Аналитические решения некоторых задач дифракции сверхширокополосного электромагнитного излучения в высокочастотном приближении для уравнений Максвелла | 40 |
| <i>Лин Э. Э.</i> Кластерная модель образования наночастиц и мезообъектов в ударных волнах в тяжелых металлах и при выбросах с их поверхности | 58 |
| <i>Гаранин С. Ф., Кравец Е. М.</i> Электронный вакуумный заряд для сверхкритического ядра | 64 |

РАЗДЕЛ



ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

УДК 514.83; 530.12:531.51

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_6

Получение уравнений самосогласованного движения заряженных частиц методом Эйнштейна – Инфельда – Гоффмана

М. В. Горбатенко

Классическая версия метода Эйнштейна – Инфельда – Гоффмана (ЭИГ) 1949 г. разработана для общей теории относительности (ОТО) с нулевым тензором энергии-импульса. В данной работе усовершенствованный вариант этого метода применяется для получения уравнения движения двух электрически заряженных частиц, т. е. к случаю, когда тензор энергии-импульса не равен нулю. Воспроизводятся известные из электродинамики уравнения, которые следуют из лагранжиана Дарвина. Обсуждается ряд вопросов концептуального характера, возникающих при попытках воспользоваться уравнениями ОТО с ненулевым тензором энергии-импульса с целью получения уравнений движения частиц (наличие двух и более параметров малости, наличие точного решения для одной частицы в тех координатах, которые используются в аппроксимационных разложениях метода ЭИГ, автоматическое исчезновение расходящихся интегралов при получении уравнения движения частиц и др.).

Введение

Уравнения самосогласованного движения заряженных частиц в $(v/c)^2$ -приближении давно известны. Они получаются чисто электродинамическими методами из установленного Дарвином (С. G. Darwin) лагранжиана [1, 2]. В последнее время предложены и иные электродинамические способы к получению этих уравнений [3].

В данной работе уравнения самосогласованного движения заряженных частиц получаются совершенно иным способом – путем применения метода ЭИГ к уравнениям ОТО с максвелловским тензором энергии-импульса $T_{\alpha\beta}$. Возникают естественные вопросы:

1. Правомерно ли применять метод ЭИГ, разработанный в работах [4, 5] применительно к уравнениям ОТО с нулевым тензором энергии-импульса, к случаю, когда этот тензор не равен нулю?

2. С какой стати привлекается гравитационное взаимодействие к электродинамической задаче? Известно, что кулоновские и ньютоновские силы взаимодействия могут различаться на 40 порядков.

3. Какой смысл получать давно установленные уравнения еще одним способом?

В работе показано, что ответ на первый вопрос положительный, но при выполнении определенных условий. Одним из них является наличие точного решения уравнений ОТО для одночастичной задачи, по которому могут быть прокалиброваны аппроксимационные разложения, возникающие в процедуре ЭИГ. В нашем случае таким решением является известное решение Райсснера–Нордстрёма. Другим условием является использование в аппроксимационных разложениях тех же самых координатных условий, которые используются при записи точного решения. В нашем случае это гармонические координаты. Третье условие состоит в использовании таких параметров малости, при которых гравитационное взаимодействие не «вмешивается» в силы электродинамической природы. В нашем случае такой параметр малости, как оказывается, может быть введен; он определяется целым положительным числом $N \geq 2$. То есть разница в 40 порядков не является препятствием для использования уравнений ОТО. Это ответ на второй вопрос. Что касается ответа на третий, то, конечно, получение известных уравнений еще одним способом вряд ли имело бы большой смысл, если бы не одно обстоятельство. Дело в том, что роль ОТО в современной физике трудно переоценить. Не существует каких бы то ни было ограничений, запрещающих применять уравнения ОТО к любому процессу, происходящему в пространстве-времени. В работе [6] вообще было предложено унифицировать рассмотрение физических взаимодействий всех типов на основе метода ЭИГ. На пути реализации предложения [6] возникает ряд проблем, одна из которых сводится к необходимости такой модификации метода ЭИГ, которая позволяла бы применять этот метод в случае ненулевых тензоров энергии-импульса. С этой точки зрения задача о самосогласованном движении заряженных частиц представляет собой отличную тестовую задачу. В случае если метод ЭИГ проходит этот тест, можно рассчитывать и на другие более нетривиальные области применения метода ЭИГ. Например, в случае поля вектора Вейля, поля Янга–Миллса, биспинорных, скалярных и других полей.

Несколько слов о методе ЭИГ и его применениях.

В первоначальной формулировке в работах [4, 5] метод ЭИГ был, как уже отмечено, развит применительно к уравнениям ОТО с нулевым тензором энергии-импульса $T_{\alpha\beta}$. Параметрами, характеризующими внутреннюю структуру точечных частиц-сингулярностей¹, были только массы. В последующем метод ЭИГ был применен к частицам с ненулевыми собственными угловыми моментами. Предсказываемые ОТО результаты, касающиеся геодезической и спин-спиновой прецессии, подтверждены в опыте GP-B [7]. Предпринимались попытки применить метод ЭИГ и к ситуациям с ненулевым тензором энергии-импульса $T_{\alpha\beta} \neq 0$. Расширение области применения метода ЭИГ потребовало его дальнейшего развития. Так, в работе [8] для использования метода потребовалось обобщить его на ситуацию с двумя параметрами малости. В работе [9] было обра-

¹ Под частицами (точечными телами, частицами-сингулярностями) будем понимать компактные материальные объекты, при рассмотрении взаимодействий между которыми внутренняя структура описывается конечным набором наблюдаемых и измеримых параметров (масса, угловой момент, электрический заряд и т. д.) и размерами которых можно пренебречь. В современной физике использование понятия частицы-сингулярности с определенными квантовыми числами является стандартным приемом.

щено внимание на то, что для гарантии самосогласованности выполняемых по методу ЭИГ процедур необходимо при вычислении поверхностных интегралов находить не только конечные части интегралов, но и расходящиеся выражения, и убедиться в исчезновении последних (автоматическое исчезновение не гарантируется!). В работе [9] показана также необходимость использования одних и тех же координатных условий при нормировке получаемых методом ЭИГ выражений по разложениям точных решений уравнений ОТО. Были получены и другие результаты, так или иначе связанные с усовершенствованием метода ЭИГ.

Метод ЭИГ потенциально обладает уникальными возможностями. Если доказана его применимость, то с его помощью можно, решая уравнения ОТО, получать информацию относительно движения частиц, силы взаимодействия между которыми имеют негравитационную природу и могут намного превосходить силу гравитационного притяжения. Метод ЭИГ позволяет получать информацию и в тех случаях, когда не существует никакой надежды на получение точного решения уравнений ОТО.

Уникальные возможности метода ЭИГ связаны с тем, что метод ЭИГ – это не просто один из методов теории возмущений. Из-за специфической структуры линейных членов со вторыми производными в левой (гравитационной) части уравнений ОТО и тождеств Бианки метод ЭИГ позволяет последовательно во все более высоких порядках малости находить явный вид искомых функций и одновременно устанавливать ограничения, обусловленные нелинейностью системы уравнений ОТО и возникающие отсюда условия согласования. Указанные ограничения имеют смысл уравнений движения частиц, а условия согласования – перенормировочных поправок к физическим параметрам, характеризующим частицы, и динамических уравнений для этих физических параметров. По существу, метод ЭИГ позволяет исследовать новый, еще не в полной мере исследованный механизм влияния гравитации на частицы, не сводящийся к простому силовому воздействию и носящий, скорее, кинематический характер. При этом совершенно несущественным оказывается тип полей (гравитационные, электромагнитные, поле вектора Вейля, поля Янга–Миллса, биспинорные, скалярные и т. д.), из которых сконструирован тензор энергии-импульса $T_{\alpha\beta}$. Существенно лишь то, чтобы рассматриваемые частицы были точечными сингулярностями полей и чтобы были малы используемые в методе параметры малости (в частности, чтобы выполнялось неравенство $(v/c) \ll 1$).

Метод ЭИГ позволяет получать сравнительно просто результаты в низших порядках малости. Однако, в более высоких порядках малости не только возрастает объем работы², но и приходится сталкиваться с необходимостью решения принципиальных вопросов методического характера. К числу последних относятся:

1. Обязательно ли знать точное решение уравнений ОТО для задачи с одной частицей? Если обязательно, то что это дает – только нормировку членов разложения в низших порядках малости или что-то большее? Если обязательно, то нужно ли при такой нормировке согласовывать координатные условия в обоих типах разложений? Нужно ли записывать точное решение в гармонических координатах или можно в любых других?

2. Нужно ли при получении уравнений движения обращать внимание на появляющиеся расходящиеся члены или априори не обращать на них внимание (например, использовать дельта-функции типа введенных в работе [10], не «замечающие» таких членов)?

3. Насколько универсальны уравнения движения, получаемые по методу ЭИГ при конкретной расстановке порядков малости при наличии более двух параметров малости?

² По этой причине метод ЭИГ даже назван в работе [11] непрактичным в отличие от метода Фока.

Перечисленные вопросы носят общий характер, однако во многих работах они либо не рассматриваются либо решаются некорректно. Одна из целей данной работы – демонстрация в действии приемов и способов решения принципиальных вопросов методического характера, возникающих при использовании метода ЭИГ для решения нестандартных задач, т. е. задач с ненулевым тензором энергии-импульса в уравнениях ОТО. В литературе, по нашему мнению, отсутствует приемлемое изложение решения нестандартной задачи средствами метода ЭИГ. Имеется в виду такое изложение, в котором были бы правильно решены все возникающие вопросы методического характера. Поэтому результаты представляют и самостоятельную ценность.

1. Гармонические координаты

Для исследования свойств риманова пространства, используемого в ОТО в качестве базового понятия, должна быть выбрана некоторая мировая система координат (СК). Выбор – процедура неоднозначная. Если выбрана какая-то СК $\{y^\alpha\}$, $\alpha = 0, 1, 2, 3$, то может быть выбрана и другая СК $\{x^\mu(y^\alpha)\}$, при этом геометрические объекты (векторы, тензоры, скалярные плотности и т. д.) должны преобразовываться по правилам, приводимым в учебниках по римановым пространствам. Независимость вида физически значимых соотношений от выбора СК – это и есть то, что понимается под ковариантностью, выполнение которой считается обязательным условием теории.

Предположим, мы имеем некоторое риманово пространство с метрическим тензором $g_{\alpha\beta}(y)$, заданным в некоторой СК $\{y^\alpha\}$. Перейдем в другую СК $\{x^\mu(y^\alpha)\}$, выбрав в качестве функций $\{x^\mu(y^\alpha)\}$ четыре линейно независимых решения дифференциального уравнения второго порядка

$$\frac{\partial}{\partial y^\mu} \left(\sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y) \frac{\partial x^\lambda}{\partial y^\nu} \right) = 0. \quad (1)$$

Новая СК $\{x^\mu(y^\alpha)\}$ называется гармонической. Мы не будем обсуждать иногда встречающиеся в литературе соображения полумистического характера, связанные с гармоническими координатами. Будем рассматривать гармоническую СК как одну из многих в принципе возможных. Вместе с тем, отметим одно уникальное и существенное для последующего свойство гармонической СК. Это свойство состоит в том, что, не решая дифференциальное уравнение (1), мы можем с помощью метрического тензора выяснить, являются ли используемые координаты гармоническими. Для этого достаточно вычислить четыре частных производные $\left(\sqrt{-g} g^{\lambda\sigma} \right)_{,\sigma}$. Если они равны нулю

$$\left(\sqrt{-g} g^{\lambda\sigma} \right)_{,\sigma} = 0, \quad (2)$$

то используемая СК является гармонической. После несложных преобразований с использованием соотношений $g_{\alpha\beta;\sigma} = 0$ условия (2) могут быть записаны в другом эквивалентном виде, а именно

$$g^{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \lambda \\ \alpha\beta \end{pmatrix} = 0, \quad (3)$$

где

$$\begin{pmatrix} \lambda \\ \alpha\beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} g^{\lambda\sigma} (g_{\sigma\beta,\alpha} + g_{\alpha\sigma,\beta} - g_{\alpha\beta,\sigma}) - \quad (4)$$

символы Кристоффеля. Условия (2), (3) называются условиями де Дондера.

Таким образом, перейти в гармоническую СК можно либо решив дифференциальное уравнение (1), либо обеспечив каким-то образом выполнение условия (3) (или (4)).

Если доказательство эквивалентности условий (2) и (3) достаточно просто, то доказательство эквивалентности условий (1) и (2) не очевидно. Поскольку эквивалентность условий (1) и (2) существенна для последующего, приведем ее доказательство.

Докажем, что если осуществляется переход от произвольной СК $\{y^\alpha\}$ к СК $\{x^\mu(y^\alpha)\}$, получаемых как решения дифференциального уравнения (1), то в новых координатах метрический тензор удовлетворяет условиям де Дондера.

Условие гармоничности, которому удовлетворяют новые координаты, записываем в виде

$$\frac{\partial x^\lambda}{\partial y^\nu} \frac{\partial (\sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y))}{\partial y^\mu} + (\sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y)) \frac{\partial^2 x^\lambda}{\partial y^\mu \partial y^\nu} = 0. \quad (5)$$

Умножаем (5) на $\frac{\partial y^\omega}{\partial x^\lambda}$ и используем тот факт, что

$$\frac{\partial y^\omega}{\partial x^\lambda} \frac{\partial x^\lambda}{\partial y^\sigma} = \delta_{\sigma}^{\omega}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\sqrt{-g(y)} g^{\lambda\sigma}(y))}{\partial y^\sigma} + (\sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y)) \frac{\partial^2 x^\sigma}{\partial y^\mu \partial y^\nu} \frac{\partial y^\lambda}{\partial x^\sigma} = 0. \quad (7)$$

Согласно правилам римановой геометрии, ковариантная производная как от метрики, так и от детерминанта метрики равна нулю. В частности, имеет место следующее тождество:

$$\frac{\partial (\sqrt{-g(y)} g^{\lambda\sigma}(y))}{\partial y^\sigma} + \sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y) \Gamma_{\mu}^{\lambda}{}_{\nu}(y) = 0. \quad (8)$$

С учетом (8) соотношение (7) можно записать как

$$-\sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y) \Gamma_{\mu}^{\lambda}{}_{\nu}(y) + (\sqrt{-g(y)} g^{\mu\nu}(y)) \frac{\partial^2 x^\sigma}{\partial y^\mu \partial y^\nu} \frac{\partial y^\lambda}{\partial x^\sigma} = 0 \quad (9)$$

или как

$$g^{\mu\nu}(y) \Gamma_{\mu}^{\lambda}{}_{\nu}(y) = g^{\mu\nu}(y) \frac{\partial^2 x^\sigma}{\partial y^\mu \partial y^\nu} \frac{\partial y^\lambda}{\partial x^\sigma}. \quad (10)$$

В римановом пространстве при координатном преобразовании Кристоффели и метрика преобразуются следующим образом:

$$\Gamma_{\alpha}^{\lambda}{}_{\beta}(y) = \Gamma_{\mu}^{\sigma}{}_{\nu}(x) \frac{\partial y^{\lambda}}{\partial x^{\sigma}} \frac{\partial x^{\mu}}{\partial y^{\alpha}} \frac{\partial x^{\nu}}{\partial y^{\beta}} + \frac{\partial^2 x^{\sigma}}{\partial y^{\alpha} \partial y^{\beta}} \frac{\partial y^{\lambda}}{\partial x^{\sigma}}, \quad (11)$$

$$g^{\alpha\beta}(y) = \frac{\partial y^{\alpha}}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial y^{\beta}}{\partial x^{\nu}} g^{\mu\nu}(x). \quad (12)$$

Из (11), (12) следует:

$$g^{\alpha\beta}(y) \Gamma_{\alpha}^{\lambda}{}_{\beta}(y) = \Gamma_{\mu}^{\sigma}{}_{\nu}(x) \frac{\partial y^{\lambda}}{\partial x^{\sigma}} g^{\mu\nu}(x) + g^{\alpha\beta}(y) \frac{\partial^2 x^{\sigma}}{\partial y^{\alpha} \partial y^{\beta}} \frac{\partial y^{\lambda}}{\partial x^{\sigma}}. \quad (13)$$

Сравнивая (10) с (13), приходим к выводу, что в координатах $\{x^{\alpha}\}$ выполняется соотношение

$$\Gamma_{\mu}^{\sigma}{}_{\nu}(x) \frac{\partial y^{\lambda}}{\partial x^{\sigma}} g^{\mu\nu}(x) = 0. \quad (14)$$

Но поскольку в координатах $\{x^{\alpha}\}$, как и в координатах $\{y^{\alpha}\}$, выполняется тождество

$$\frac{\partial(\sqrt{-g(x)} g^{\lambda\sigma}(x))}{\partial x^{\sigma}} + \sqrt{-g(x)} g^{\mu\nu}(x) \Gamma_{\mu}^{\lambda}{}_{\nu}(x) = 0, \quad (15)$$

то равенство (14) означает, что в координатах $\{x^{\alpha}\}$ выполняется соотношение (2). Таким образом, утверждение доказано.

Доказательство обратного утверждения проводится с использованием приведенного выше доказательства прямого утверждения, но в обратном порядке.

2. Решение Райсснера–Нордстрёма в гармонических координатах

Классическая форма записи решения уравнений ОТО в случае точечного тела с ненулевыми массой \tilde{M} и электрическим зарядом \tilde{Q} (решения Райсснера–Нордстрёма) имеет вид

$$ds^2 = - \left[1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2} \right] dt^2 + \frac{dr^2}{\left[1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2} \right]} + r^2 \left[d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2 \right], \quad (16)$$

где (t, r, θ, φ) – сферические координаты; M, Q – геометрические характеристики гравитационного поля, имеющие размерность длины и связанные с физическими характеристиками соотношениями:

$$M = \frac{G\tilde{M}}{c^2}, \quad Q = \frac{\sqrt{G}\tilde{Q}}{c^2}. \quad (17)$$

Подставив выражения для компонент метрического тензора решения (16) в левую часть уравнений ОТО

$$R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}g_{\alpha\beta}R = \frac{8\pi G}{c^4}\tilde{T}_{\alpha\beta}, \quad (18)$$

где

$$\tilde{T}_{\alpha\beta} = \frac{1}{4\pi} \left(\tilde{F}_{\alpha\sigma}\tilde{F}_{\beta}^{\sigma} - \frac{1}{4}g_{\alpha\beta}(\tilde{F}_{\mu\nu}\tilde{F}^{\mu\nu}) \right), \quad (19)$$

получим

$$G_{\alpha}^{\beta} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline -Q^2/R^4 & & & \\ \hline & -Q^2/R^4 & & \\ \hline & & Q^2/R^4 & \\ \hline & & & Q^2/R^4 \\ \hline \end{array}. \quad (20)$$

Любопытно заметить, что структура тензора энергии-импульса, соответствующая тензору Эйнштейна (20), означает, что материальная среда (в данном случае электромагнитное поле) находится в анизотропном напряженном состоянии: в радиальном направлении она сжата, а по угловым направлениям – растянута.

Легко проверить, что сферические координаты (t, r, θ, φ) , которые обозначим как $(y^{\alpha}) = (y^0, y^1, y^2, y^3) = (t, r, \theta, \varphi)$, не являются гармоническими. Мы найдем гармонические координаты $\{x^{\mu}(y^{\alpha})\}$, если найдем четыре линейно независимых решения дифференциального уравнения (1), которое в данном случае записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial t} \left\{ r^2 \sin \theta \frac{1}{\left[1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2} \right]} \frac{\partial x^{\lambda}}{\partial t} \right\} + \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \sin \theta \left[1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2} \right] \frac{\partial x^{\lambda}}{\partial r} \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ r^2 \sin \theta \frac{1}{r^2} \frac{\partial x^{\lambda}}{\partial \theta} \right\} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left\{ r^2 \sin \theta \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial x^{\lambda}}{\partial \varphi} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Опуская процедуру поиска решений, приведем решения

$$\left. \begin{aligned} x^0 &= t, \\ x^1 &= (r - M) \sin \theta \cos \varphi, \\ x^2 &= (r - M) \sin \theta \sin \varphi, \\ x^3 &= (r - M) \cos \theta. \end{aligned} \right\}. \quad (22)$$

Зная выражение для метрики (16) в исходных сферических координатах (t, r, θ, φ) и выражение (22) для новых (гармонических) координат (x^0, x^1, x^2, x^3) , можем стандартным образом, т. е. по формуле

$$g'_{\alpha\beta}(x) = \frac{\partial y^\mu}{\partial x^\alpha} \frac{\partial y^\nu}{\partial x^\beta} g_{\mu\nu}(y), \quad (23)$$

найти компоненты метрического тензора в гармонических координатах. Обозначим этот тензор как $g_{\alpha\beta}(x)$. Имеем

$$g_{\alpha\beta}(x) = \begin{array}{|c|c|} \hline \frac{-(R^2 - M^2 + Q^2)}{(R + M)^2} & 0 \\ \hline 0 & \frac{(R + M)^2}{R^2} \delta_{mn} + \frac{(R + M)^2 (M^2 - Q^2)}{R^4 (R^2 - M^2 + Q^2)} x_m x_n \\ \hline \end{array}. \quad (24)$$

Это и есть метрика Райсснера–Нордстрёма в гармонических координатах. Под величиной R в (24) понимается

$$R = \sqrt{(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2}. \quad (25)$$

При обращении заряда в нуль решение (24) переходит в решение Шварцшильда в гармонических координатах.

3. Разложение решения Райсснера–Нордстрёма в гармонических координатах

На достаточно больших расстояниях от начала координат метрический тензор (24) асимптотически приближается к метрическому тензору плоского пространства Минковского

$$\eta_{\alpha\beta} = \text{diag}[-1, 1, 1, 1]. \quad (26)$$

Метрика (24) отличается от метрики плоского пространства на величину $h_{\alpha\beta}(x)$, где

$$h_{\alpha\beta}(x) = g_{\alpha\beta}(x) - \eta_{\alpha\beta}. \quad (27)$$

Используя (24), получаем

$$h_{\alpha\beta}(x) = \begin{array}{|c|c|} \hline \frac{(2M^2 + 2MR - Q^2)}{(R + M)^2} & 0 \\ \hline 0 & \frac{(2MR + M)}{R^2} \delta_{mn} + \frac{(R + M)^2 (M^2 - Q^2)}{R^4 (R^2 - M^2 + Q^2)} x_m x_n \\ \hline \end{array}. \quad (28)$$

Приведем еще выражение для величины $\gamma_{\alpha\beta}(x)$, определяемой как

$$\gamma_{\alpha\beta}(x) = h_{\alpha\beta}(x) - \frac{1}{2} \eta_{\alpha\beta} \left(\eta^{\mu\nu} h_{\mu\nu}(x) \right). \quad (29)$$

Величина $\gamma_{\alpha\beta}(x)$ будет использоваться далее в методе ЭИГ. Прямое вычисление приводит к следующей структуре этой величины:

$$\gamma_{\alpha\beta}(x) = \begin{array}{|c|c|} \hline \gamma_{00} & 0 \\ \hline 0 & \gamma_{mn} \\ \hline \end{array}, \quad (30)$$

где

$$\gamma_{00} = \frac{(M^2 + 2MR)}{2(R+M)^2} + \frac{3(M^2 + 2MR)}{2R^2} + \frac{(M^2 - Q^2)}{2(R+M)^2} + \frac{(R+M)^2(M^2 - Q^2)}{2R^2(R^2 - M^2 + Q^2)}, \quad (31)$$

$$\gamma_{mn}(x) = \left\{ -\frac{(M^2 + 2MR)^2}{2R^2(R+M)^2} + \frac{(M^2 - Q^2)}{2(R+M)^2} - \frac{(R+M)^2(M^2 - Q^2)}{2R^2(R^2 - M^2 + Q^2)} \right\} \delta_{mn} + \frac{(R+M)^2(M^2 - Q^2)}{R^4(R^2 - M^2 + Q^2)} x_m x_n. \quad (32)$$

Выражения (28), (30)–(32) являются точными, никаких предположений о малости каких бы то ни было параметров при их получении не делалось. Теперь предположим, что мы работаем в такой области значений R , в которой безразмерные параметры (M/R) , (Q/R) много меньше единицы:

$$\frac{M}{R} \ll 1, \quad \frac{Q}{R} \ll 1. \quad (33)$$

Тогда с точностью до квадратичных членов включительно имеем

$$\gamma_{00} \approx 4 \left(\frac{M}{R} \right) + \left(\frac{M}{R} \right)^2 - \left(\frac{Q}{R} \right)^2 + \dots, \quad (34)$$

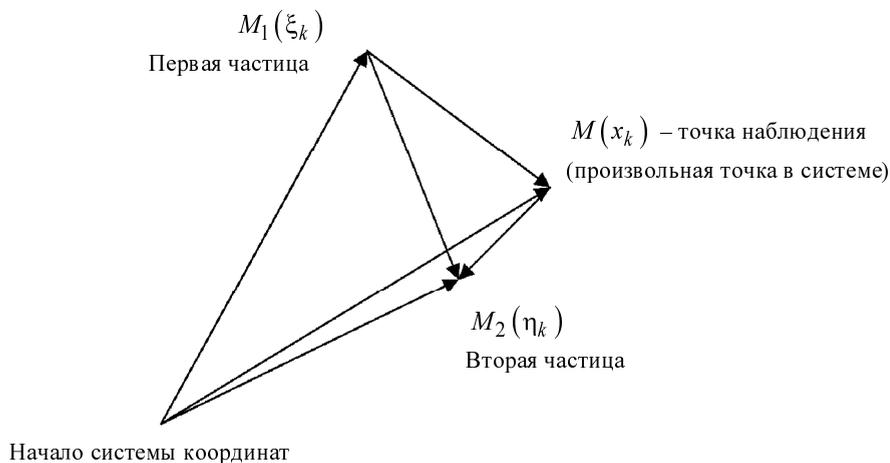
$$\gamma_{0k} = 0, \quad (35)$$

$$\gamma_{mn} \approx -2 \left(\frac{M}{R} \right)^2 \delta_{mn} + \left[\left(\frac{M}{R} \right)^2 - \left(\frac{Q}{R} \right)^2 \right] \frac{x_m x_n}{R R} + \dots \quad (36)$$

4. Уравнение движения заряженных частиц, получаемое из лагранжиана Дарвина

В работе [1] приведено выражение для функции Лагранжа системы зарядов с точностью до членов второго порядка по v/c (формула (65.7)). Будем называть это выражение лагранжианом Дарвина. Оно получается чисто электродинамическим способом без всякого использования ОТО.

Рассмотрим простейший случай – систему из двух частиц. На рисунке приведена геометрия системы; там же, а также в табл. 1 даны пояснения к обозначениям.



Геометрия рассматриваемой задачи

Таблица 1

Обозначения

| Символ | Смысл |
|---|---|
| ξ_k, η_k | Координаты первой и второй частиц соответственно |
| $R_k \equiv \eta_k - \xi_k$ | Координаты радиуса-вектора, проведенного от первой частицы ко второй |
| x_k | Координаты точки наблюдения |
| $X_k \equiv x_k - \xi_k$ | Координаты радиуса-вектора, проведенного от первой частицы к точке наблюдения |
| $r_1 = \sqrt{X_k X_k}$ | Расстояние от первой частицы до точки наблюдения |
| $r_2 = \sqrt{(x_k - \eta_k)(x_k - \eta_k)}$ | Расстояние от второй частицы до точки наблюдения |
| \tilde{M}, \tilde{m} | Массы первой и второй частиц соответственно. Размерность (г) |
| M, m | Половины радиусов Шварцшильда частиц. Размерность (см) $M = (G\tilde{M}/c^2); m = (G\tilde{m}/c^2)$ |
| $G; c$ | Гравитационная постоянная и скорость света: $G = 6,67 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{г} \cdot \text{с}^2$; $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ см/с}$ |
| \tilde{Q}, \tilde{q} | Электрические заряды частиц. Размерность $(\text{г}^{1/2} \cdot \text{см}^{3/2}/\text{с})$ |
| Q, q | $Q = (\sqrt{G} \tilde{Q})/c^2, q = (\sqrt{G} \tilde{q})/c^2$. Размерность (см) |

Лагранжиан Дарвина L , связанный с приведенным в работе [1] лагранжианом \tilde{L} соотношением $L \equiv \frac{G}{c^4} \tilde{L}$ и адаптированный к нашему случаю, записывается в следующем виде:

$$L = \frac{1}{2}M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) + \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) + \frac{1}{8}M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)^2 + \frac{1}{8}m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)^2 - \frac{qQ}{R} + \frac{qQ}{2R} \left[(\dot{\xi}_l \dot{\eta}_l) + \frac{(R_l \dot{\xi}_l)(R_l \dot{\eta}_l)}{R^2} \right]. \quad (37)$$

Точка обозначает дифференцирование по координатному времени. Для первой частицы запишем в явной форме уравнение Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}_k} - \frac{\partial L}{\partial \xi_k} = 0. \quad (38)$$

Получаем

$$M\ddot{\xi}_k = -\frac{qQ}{R^3}R_k + qQ \left\{ \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\eta}_l)}{R^3}R_k - \frac{(R_l \dot{\xi}_l)}{R^3}\dot{\eta}_k + \frac{(R_l \dot{\xi}_l)}{R^3}\dot{\xi}_k + \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{2R^3}R_k - \frac{\ddot{\eta}_k}{2R} - \frac{(R_l \ddot{\eta}_l)}{2R^3}R_k + \frac{3}{2} \frac{(R_l \dot{\eta}_l)^2}{R^5}R_k - \frac{(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{2R^3}R_k \right\}. \quad (39)$$

Для получения уравнения движения второй частицы необходимо в уравнении (39) произвести следующие замены:

$$\begin{aligned} M &\rightarrow m, & m &\rightarrow M, \\ Q &\rightarrow q, & q &\rightarrow Q, \\ \xi_k &\rightarrow \eta_k, & \eta_k &\rightarrow \xi_k, \\ \dot{\xi}_k &\rightarrow \dot{\eta}_k, & \dot{\eta}_k &\rightarrow \dot{\xi}_k, \\ R_k &\rightarrow -R_k. \end{aligned} \quad (40)$$

5. Расстановка порядков малости в аппроксимационных выражениях метода Эйнштейна–Инфельда–Гоффмана

5.1. Два параметра малости

Разложение решения Райсснера–Нордстрёма (34)–(36) указывает на три обстоятельства. Во-первых, на достаточно больших расстояниях главным членом разложения всегда будет γ_{00} , в котором имеется линейный член $\sim(M/R)$, связанный с массой. Все другие члены зависят либо от $\sim 1/R^2$, либо от более высоких степеней радиуса, поэтому на больших расстояниях доминировать будет именно член $\sim(M/R)$. Во-вторых, при выполнении неравенства

$$M \ll Q \quad (41)$$

следующим членом разложения в γ_{00} будет квадратичный член, связанный с $\sim(Q^2/R^2)$. В-третьих, порядок малости компонент γ_{mn} выше порядка малости компоненты γ_{00} , поскольку в γ_{mn} главный член разложения пропорционален $\sim(Q^2/R^2)$.

В случае системы из двух частиц одним из естественных параметров малости должен быть параметр

$$\lambda = v/c. \quad (42)$$

Этот параметр традиционно использовался в работах [1, 5], а также при выводе лагранжиана Дарвина (см. работу [1]). В электрически связанной системе параметр (42) определяется из условия

$$\mu \frac{v^2}{2} = \frac{qQ}{R}, \quad (43)$$

где μ – приведенная масса, $\mu = mM/(m + M)$. Другими словами, по порядку величины

$$\lambda \sim \sqrt{\frac{qQ}{\mu R}}. \quad (44)$$

Этот параметр по определению имеет первый порядок малости и характеризует отношение скорости изменения величин со временем к скорости изменения по пространству. Поэтому в случае использования этого параметра малости при дифференцировании величин по времени порядок малости повышается на единицу. Заметим, что при выполнении неравенства (41) параметр (44) становится малым только на достаточно больших расстояниях между частицами.

Второй параметр малости может быть введен с помощью целого положительного числа N , определяемого соотношением

$$\frac{M}{Q} = \lambda^N. \quad (45)$$

Найдем порядок малости величин (M/R) и (Q/R) в предположении, что рассмотрение относится к частицам, у которых совпадают порядки малости у величин (M/R) и (m/R) , а также у величин (Q/R) и (q/R) . Записываем соотношение (44) с использованием (45)

$$\lambda \sim \sqrt{\frac{qQ}{\mu R}} \sim \frac{Q}{M} \sqrt{\frac{M}{R}} \sim \lambda^{-N} \sqrt{\frac{M}{R}}. \quad (46)$$

Для выполнимости соотношения (46) величина (M/R) должна иметь порядок малости

$$\frac{M}{R} = \lambda^{2N+2}. \quad (47)$$

Из (45) и (47) следует:

$$\frac{Q}{R} = \lambda^{N+2}. \quad (48)$$

Численные значения λ и N зависят от конкретной физической ситуации. Мы продолжим наше рассмотрение в предположении о том, что по заданным M, m, Q, q с помощью формул (44), (47), (48) однозначно восстанавливается не только численное значение λ , но и N и область значений радиальной переменной R , в которой справедливо рассмотрение.

5.2. Параметры малости компонент $\gamma_{\alpha\beta}$

От расстановки порядков малости³ M/r , m/r , Q/r q/r необходимо перейти к расстановке порядков малости величин $\gamma_{00}, \gamma_{0k}, \gamma_{mn}$, а также A_0, A_k . Что касается $\gamma_{00}, \gamma_{0k}, \gamma_{mn}$, то порядки их малости следуют из разложений решения Райсснера–Нордстрёма (34)–(36) и приведенных выше соотношений (47), (48):

$$\left. \begin{aligned} \gamma_{00} &= \frac{\gamma_{00}}{2N+2} + \frac{\gamma_{00}}{2N+4} + \frac{\gamma_{00}}{2N+5} + \dots \\ \gamma_{0k} &= \frac{\gamma_{0k}}{2N+3} + \frac{\gamma_{0k}}{2N+5} + \frac{\gamma_{0k}}{2N+6} + \dots \\ \gamma_{mn} &= \frac{\gamma_{mn}}{2N+4} + \frac{\gamma_{mn}}{2N+5} + \frac{\gamma_{mn}}{2N+6} + \dots \end{aligned} \right\}. \quad (49)$$

Расстановка порядков малости величин A_0, A_k следует из (48)

$$\left. \begin{aligned} A_0 &= \frac{A_0}{N+2} + \frac{A_0}{N+4} + \frac{A_0}{N+5} + \dots \\ A_k &= \frac{A_k}{N+3} + \frac{A_k}{N+5} + \frac{A_k}{N+6} + \dots \end{aligned} \right\}. \quad (50)$$

При выполнении (50) разложения компонент тензора Максвелла имеют вид

$$\left. \begin{aligned} F_{0k} &= \frac{F_{0k}}{N+2} + \frac{F_{0k}}{N+4} + \frac{F_{0k}}{N+5} + \dots \\ F_{mn} &= \frac{F_{mn}}{N+3} + \frac{F_{mn}}{N+5} + \dots \end{aligned} \right\}. \quad (51)$$

Заметим, что правильность разложений (49), (50) может быть обоснована апостериори, т. е. путем фактического построения величин $\gamma_{00}, \gamma_{0k}, \gamma_{mn}, A_0, A_k$ в каждом порядке малости. Если процедура построения оказывается возможной, значит в каждом порядке малости корректно ставится задача Коши и все операции являются взаимно согласованными. Излагаемая далее процедура построения величин $\gamma_{00}, \gamma_{0k}, \gamma_{mn}, A_0, A_k$ фактически является доказательством правильности принятых в рассмотрении разложений (49), (50).

6. Динамические уравнения, координатные и калибровочные условия

6.1. Уравнения для компонент $\gamma_{\alpha\beta}$

Уравнения ОТО записываем в виде

$$R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \eta_{\alpha\beta} \left(\eta^{\mu\nu} R_{\mu\nu} \right) = \left(T_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta} T \right) - \frac{1}{2} \eta_{\alpha\beta} \left(\eta^{\mu\nu} \left(T_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} T \right) \right). \quad (52)$$

³ Далее величину R обозначаем малой буквой r .

Если ввести обозначения

$$[LS; \alpha\beta] \equiv R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \eta_{\alpha\beta} \left(\eta^{\mu\nu} R_{\mu\nu} \right), \quad (53)$$

$$[RS; \alpha\beta] \equiv \left(T_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta} T \right) - \frac{1}{2} \eta_{\alpha\beta} \left(\eta^{\mu\nu} \left(T_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} T \right) \right), \quad (54)$$

то уравнения (52) примут вид

$$[LS; \alpha\beta] = [RS; \alpha\beta]. \quad (55)$$

Здесь не будут выводиться выражения для $[LS; \alpha\beta]$ и $[RS; \alpha\beta]$ в виде суммы линейных, квадратичных и кубических членов. Приведем явный вид необходимых для последующего динамических уравнений, используя расстановку порядков малости (49), (50):

$$[00; \lambda^{2N+2}]: -\frac{1}{2} \left(\Delta_{2N+2} \gamma_{00} \right) = 0; \quad (56)$$

$$[00; \lambda^{2N+4}]: -\frac{1}{2} \Delta_{2N+4} \gamma_{00} + \frac{1}{2} \gamma_{2N+4}^{pq,pq} = 2 \frac{1}{2} F_{N+2}{}^{0p} F_{N+2}{}^{0p}; \quad (57)$$

$$[00; \lambda^{2N+5}]: -\frac{1}{2} \Delta_{2N+5} \gamma_{00} + \frac{1}{2} \gamma_{2N+5}^{pq,pq} = 0; \quad (58)$$

$$[0k; \lambda^{2N+3}]: -\frac{1}{2} \left(\Delta_{2N+3} \gamma_{0k} \right) + \frac{1}{2} \left(-\gamma_{2N+2}{}^{00,0}{}_1 + \gamma_{2N+3}{}^{0s,s}{}_k \right) = 0; \quad (59)$$

$$[0k; \lambda^{2N+5}]: \frac{1}{2} \left\{ -\Delta_{2N+5} \gamma_{0k} + \left(-\gamma_{2N+4}{}^{00,0}{}_1 k + \gamma_{2N+5}{}^{0s,sk} \right) + \gamma_{2N+4}{}^{ks,0}{}_1 s \right\} = 2 \left(F_{N+2}{}^{0p} F_{N+3}{}^{kp} \right); \quad (60)$$

$$[0k; \lambda^{2N+6}]: \frac{1}{2} \left\{ -\Delta_{2N+6} \gamma_{0k} + \left(-\gamma_{2N+5}{}^{00,0}{}_1 k + \gamma_{2N+6}{}^{0s,sk} \right) + \gamma_{2N+5}{}^{ks,0}{}_1 s \right\} = 0; \quad (61)$$

$$\begin{aligned} [mn; \lambda^{2N+4}]: & \frac{1}{2} \left\{ \left(-\gamma_{2N+3}{}^{0m,0}{}_1 n + \gamma_{2N+4}{}^{ms,sn} \right) + \left(-\gamma_{2N+3}{}^{0n,0}{}_1 m + \gamma_{2N+4}{}^{ns,sm} \right) - \Delta_{2N+4} \gamma_{mn} - \right. \\ & \left. - \delta_{mn} \left(\gamma_{2N+2}{}^{00,0}{}_{11} - 2 \gamma_{2N+3}{}^{0s,0}{}_1 s + \gamma_{2N+4}{}^{pq,pq} \right) \right\} = \\ & = 2 \left\{ -F_{N+2}{}^{0m} F_{N+2}{}^{0n} + \frac{1}{2} \delta_{mn} \left(F_{N+2}{}^{0p} F_{N+2}{}^{0p} \right) \right\}; \end{aligned} \quad (62)$$

$$[mn; \lambda^{2N+5}]: \frac{1}{2} \left\{ \gamma_{2N+5}{}^{ms,sn} + \gamma_{2N+5}{}^{ns,sm} - \Delta_{2N+5} \gamma_{mn} - \delta_{mn} \gamma_{2N+5}{}^{pq,pq} \right\} = 0; \quad (63)$$

$$\begin{aligned}
 [mn; \lambda^{2N+6}] &: \frac{1}{2} \left\{ \left(-\gamma_{2N+5} \begin{matrix} 0m, 0n \\ 1 \end{matrix} + \gamma_{2N+6} \begin{matrix} ms, sn \\ 1 \end{matrix} \right) + \left(-\gamma_{2N+5} \begin{matrix} 0n, 0m \\ 1 \end{matrix} + \gamma_{2N+6} \begin{matrix} ns, sm \\ 1 \end{matrix} \right) + \gamma_{2N+4} \begin{matrix} mn, 00 \\ 11 \end{matrix} - \Delta_{2N+6} \gamma_{mn} - \right. \\
 &\quad \left. - \delta_{mn} \left(\gamma_{2N+4} \begin{matrix} 00, 00 \\ 11 \end{matrix} - 2 \gamma_{2N+5} \begin{matrix} 0s, 0s \\ 1 \end{matrix} + \gamma_{2N+6} \begin{matrix} pq, pq \\ 1 \end{matrix} \right) \right\} = \\
 &= 2 \left\{ -F_{N+2} \begin{matrix} 0m \\ 0n \end{matrix} F_{N+4} \begin{matrix} 0n \\ 0m \end{matrix} - F_{N+2} \begin{matrix} 0n \\ 0m \end{matrix} F_{N+4} \begin{matrix} 0m \\ 0n \end{matrix} + F_{N+3} \begin{matrix} mp \\ np \end{matrix} F_{N+3} \begin{matrix} np \\ mp \end{matrix} + \delta_{mn} \left[F_{N+2} \begin{matrix} 0p \\ 0p \end{matrix} F_{N+4} \begin{matrix} 0p \\ 0p \end{matrix} - \frac{1}{4} F_{N+3} \begin{matrix} pq \\ pq \end{matrix} F_{N+3} \begin{matrix} pq \\ pq \end{matrix} \right] \right\}. \quad (64)
 \end{aligned}$$

Обратим внимание на два обстоятельства. Во-первых, в выражениях для $[LS; \alpha\beta; \lambda^k]$ не содержатся ни квадратичные, ни кубические члены. Это является результатом принятой расстановки порядков малости (49), (50). Во-вторых, приведенные выражения $[LS; \alpha\beta; \lambda^k]$ не зависят от того, какой вид имеют выражения для $[RS; \alpha\beta; \lambda^k]$, а также от используемых координатных и калибровочных условий.

6.2. Уравнения для A_α

Уравнения Максвелла

$$g^{\mu\nu} F_{\lambda\mu;\nu} = 0 \quad (65)$$

хотя и являются следствием исходных уравнений ОТО, однако они имеют удобный для нахождения вектора A_α вид. Поэтому приведем эти уравнения в явном виде

$$[0; \lambda^{N+2}]: -\Delta_{N+2} A_0 = 0; \quad (66)$$

$$[k; \lambda^{N+3}]: -\Delta_{N+3} A_k + \left(A_{N+3} \begin{matrix} p, pk \\ 0, k0 \end{matrix} - A_{N+2} \begin{matrix} 0, k0 \end{matrix} \right) = 0; \quad (67)$$

$$[0; \lambda^{N+4}]: -\Delta_{N+4} A_0 + A_{N+3} \begin{matrix} p, p0 \end{matrix} = 0; \quad (68)$$

$$[k; \lambda^{N+5}]: -\Delta_{N+5} A_k + \left(A_{N+5} \begin{matrix} p, pk \\ 0, k0 \end{matrix} - A_{N+4} \begin{matrix} 0, k0 \end{matrix} \right) + A_{N+3} \begin{matrix} k, 00 \end{matrix} = 0. \quad (69)$$

6.3. Гармонические координатные условия

При нахождении решений различного порядка используются условия де Дондера (2). Эти условия записываются следующим образом:

$$[C.C.; \lambda^{2N+3}]: \gamma_{2N+3} \begin{matrix} 0l, l \\ 1 \end{matrix} = \gamma_{2N+2} \begin{matrix} 00, 0 \\ 1 \end{matrix}; \quad (70)$$

$$\left[C.C.; \lambda^{2N+4} \right]: \gamma_{2N+4}^{kl,l} = \gamma_{2N+3}^{0k,0}_1; \quad (71)$$

$$\left[C.C.; 0k; \lambda^{2N+5} \right]: \gamma_{2N+5}^{0l,l} = \gamma_{2N+4}^{00,0}_1; \quad (72)$$

$$\left[C.C.; 0k; \lambda^{2N+6} \right]: \gamma_{2N+6}^{0l,l} = \gamma_{2N+5}^{00,0}_1; \quad (73)$$

$$\left[C.C.; mn; \lambda^{2N+6} \right]: \gamma_{2N+6}^{kl,l} = \gamma_{2N+5}^{0k,0}_1; \quad (74)$$

$$\left[C.C.; mn; \lambda^{2N+5} \right]: \gamma_{2N+5}^{kl,l} = 0. \quad (75)$$

Координатные условия (70)–(75) в рассматриваемых порядках не содержат ни квадратичных, ни кубических членов.

6.4. Калибровочные условия

Используется калибровочное условие Лоренца

$$A^{\nu}_{;\nu} = 0. \quad (76)$$

Условие (76) имеет ненулевые члены в порядках малости $N+3$, $N+5$, $N+6$

$$\left[G.C.; \lambda^{N+3} \right]: -A_{N+2}^{0,0} + A_{N+3}^{l,l} = 0; \quad (77)$$

$$\left[G.C.; \lambda^{N+5} \right]: -A_{N+4}^{0,0} + A_{N+5}^{l,l} = 0; \quad (78)$$

$$\left[G.C.; \lambda^{N+6} \right]: -A_{N+5}^{0,0} + A_{N+6}^{l,l} = 0. \quad (79)$$

7. Процедура решения уравнений общей теории относительности

7.1. Нахождение γ_{2N+2}^{00}

Величина γ_{2N+2}^{00} находится из уравнения $\left[00; \lambda^{2N+2} \right]$, которое имеет такой же вид, как и в отсутствие вектора A_α . Поэтому и решение сохраняет свой прежний вид, а именно:

$$\gamma_{2N+2}^{00} = 4 \frac{M}{r_1} + 4 \frac{m}{r_2}. \quad (80)$$

Численный коэффициент положен равным тому значению, которое он имеет в разложении решения Райсснера–Нордстрёма (34).

7.2. Условие разрешимости уравнения $[0k; \lambda^{2N+3}]$

Интегрируем уравнение $[0k; \lambda^{2N+3}]$ по сферам малого радиуса, окружающим частицы-сингулярности. Получаем

$$\dot{M} = 0, \quad \dot{m} = 0. \quad (81)$$

7.3. Нахождение $\gamma_{2N+3} \ 0k$

Величина $\gamma_{2N+3} \ 0k$ находится из уравнения $[0k; \lambda^{2N+3}]$ с учетом координатного условия $[C.C.; \lambda^{2N+3}]$ и условия разрешимости (81)

$$\gamma_{2N+3} \ 0k = -4 \frac{M \dot{\xi}_k}{r_1} - 4 \frac{m \dot{\eta}_k}{r_2}. \quad (82)$$

7.4. Нахождение $A_{N+2} \ 0$

Из уравнения $[0; \lambda^{N+2}]$ следует, что функция $A_{N+2} \ 0$ должна быть гармонической. Для того чтобы тензор энергии-импульса имел вид (20), функция $A_{N+2} \ 0$ может иметь полюсный характер

$$A_{N+2} \ 0 = -\frac{Q}{r_1} - \frac{q}{r_2}. \quad (83)$$

Из (83) следует:

$$F_{N+2} \ 0k = -A_{N+2} \ 0,k = -\frac{QX_k}{r_1^3} - \frac{q(x_k - \eta_k)}{r_2^3}. \quad (84)$$

7.5. Условие разрешимости уравнения $[mn; \lambda^{2N+4}]$

Интегрируем уравнение $[mn; \lambda^{2N+4}]$ по сферам малого радиуса, окружающим частицы-сингулярности. Получаем

$$M \ddot{\xi}_k = -\frac{qQ}{R^3} R_k, \quad m \ddot{\eta}_k = \frac{qQ}{R^3} R_k. \quad (85)$$

Условия интегрируемости оказываются ничем иным, как уравнениями движения заряженных частиц под действием кулоновских сил.

7.6. Нахождение γ_{2N+4}^{mn}

Величина γ_{2N+4}^{mn} находится из уравнения $[mn; \lambda^{2N+4}]$ с учетом координатного условия $[C.C.; \lambda^{2N+4}]$ и условия разрешимости (85). Дополнительную информацию о решении можно получить, если рассмотреть свернутое уравнение $[mn; \lambda^{2N+4}]$, т. е. уравнение $[ll; \lambda^{2N+4}]$. После учета координатных условий оно принимает следующий вид:

$$\Delta_{2N+4} \gamma_{2N+4}^{ll} = -2 \begin{pmatrix} F_{N+2} & 0_p \\ F_{N+2} & 0_p \end{pmatrix}. \quad (86)$$

Уравнение (86) решается точно. Если рассматривать только сингулярную по r_1 часть решения, то точное решение уравнения (86) единственно и имеет следующий вид:

$$\gamma_{2N+4}^{ll} = - \begin{pmatrix} A_{N+2} & 0 \\ A_{N+2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha \\ r_1 \\ \beta \\ r_2 \end{pmatrix}, \quad (87)$$

где α, β – некоторые константы, структура которых симметрична относительно перестановки частиц местами. Решение (87) будет использовано при нахождении решения уравнения $[mn; \lambda^{2N+4}]$.

После учета координатных условий уравнение $[mn; \lambda^{2N+4}]$ принимает следующий вид:

$$\Delta_{2N+4} \gamma_{2N+4}^{mn} = 4 \begin{pmatrix} F_{N+2} & 0_m \\ F_{N+2} & 0_n \end{pmatrix} - 2\delta_{mn} \begin{pmatrix} F_{N+2} & 0_p \\ F_{N+2} & 0_p \end{pmatrix}. \quad (88)$$

Несложную, но громоздкую процедуру нахождения решения уравнения (88) приводить не будем. В результате этой процедуры оказывается, что решение уравнения (88) имеет вид

$$\gamma_{2N+4}^{mn} = \tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn} - \delta_{mn} \begin{pmatrix} A_{N+2} & 0 \\ A_{N+2} & 0 \end{pmatrix} - \frac{Q^2 X_m X_n}{r_1^4} + \frac{Q^2 \delta_{mn}}{r_1^2} + 2 \frac{qQ}{R^3} \frac{X_m R_n + X_n R_m}{r_1}. \quad (89)$$

Входящая в (89) величина $\tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn}$ является пока неопределенной гармонической функцией:

$$\Delta_{2N+4} \tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn} = 0.$$

Подстановка (89) в координатное условие $[C.C.; \lambda^{2N+4}]$ позволяет представить функцию

$\tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn}$ в следующем виде:

$$\tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn} = \tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn} + 4 \frac{M \dot{\xi}_m \dot{\xi}_n}{r_1} + 2 \frac{qQ}{R r_1} \delta_{mn}. \quad (90)$$

Появившаяся здесь функция $\tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn}$ также является некоторой неопределенной гармонической функцией, но она, в отличие от $\tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn}$, имеет нулевую дивергенцию, т. е. $\tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn,n} = 0$.

Таким образом, выражение (89) принимает следующий вид:

$$\gamma_{2N+4}^{mn} = 4M \frac{\dot{\xi}_m \dot{\xi}_n}{r_1} - \frac{Q^2 X_m X_n}{r_1^4} + 2 \frac{qQ}{R^3} \cdot \frac{X_m R_n + X_n R_m - \delta_{mn} (X_l R_l)}{r_1} + \tilde{\gamma}_{2N+4}^{mn}. \quad (91)$$

Сравнение свертки от выражения (91) с выражением (87) позволяет установить явный вид величин α, β и найти окончательное выражение для γ_{2N+4}^{mn}

$$\alpha = 4M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) + 2 \frac{qQ}{R}; \quad \beta = 4m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) + 2 \frac{qQ}{R}.$$

В результате

$$\gamma_{2N+4}^{mn} = 4M \frac{\dot{\xi}_m \dot{\xi}_n}{r_1} - \frac{Q^2 X_m X_n}{r_1^4} + 2 \frac{qQ}{R^3} \frac{X_m R_n + X_n R_m - \delta_{mn} (X_l R_l)}{r_1} + \frac{4}{3} \frac{m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{R} \delta_{mn} + \frac{2}{3} \frac{qQ}{R^2} \delta_{mn}. \quad (92)$$

7.7. Условие разрешимости уравнения $[k; \lambda^{N+3}]$

После исключения из уравнения (77) роторной комбинации и интегрирования этого уравнения по сферам малого радиуса, окружающим частицы-сингулярности, получаем

$$\dot{Q} = 0, \quad \dot{q} = 0. \quad (93)$$

7.8. Нахождение A_{N+3}^k

Уравнение $[k; \lambda^{N+3}]$ после учета калибровочного условия $[G.C.; \lambda^{N+3}]$ сводится к требованию гармоничности функции A_{N+3}^k . Гармоническая функция, удовлетворяющая условию $[G.C.; \lambda^{N+3}]$, имеет вид

$$A_{N+3}^k = \frac{Q \dot{\xi}_k}{r_1} + \frac{q \dot{\eta}_k}{r_2}. \quad (94)$$

Из (94) следует:

$$F_{N+3}^{mn} = - \frac{Q(X_m \dot{\xi}_n - X_n \dot{\xi}_m)}{r_1^3} - \frac{q((x_m - \eta_m) \dot{\eta}_n - (x_n - \eta_n) \dot{\eta}_m)}{r_2^3}. \quad (95)$$

7.9. Нахождение γ_{2N+4}^{00}

Уравнение $[00; \lambda^{2N+4}]$ решается точно:

$$\gamma_{2N+4}^{00} = \left(4 \frac{M'}{r_1} + 4 \frac{m'}{r_2} \right) + 2(Mr_1 + mr_2)_{,00} - \frac{A}{N+2} \frac{A}{N+2} {}_0^0. \quad (96)$$

В выражение для γ_{2N+4}^{00} включен также полюсный член типа того, что содержится в γ_{2N+2}^{00} , для учета изменения массы из-за взаимодействия частиц.

Оставляем только сингулярные члены в выражении (96) и переопределяем величину $\frac{M'}{2N+4}$ (полюсный член, содержащийся в $2(Mr_1 + mr_2)_{,00}$, включаем в $\frac{M}{2N+4}$). В последующем решение будет использоваться в виде

$$\gamma_{2N+4}^{00} = 4 \frac{M}{r_1} - 2 \frac{M(X_l \dot{\xi}_l)^2}{r_1^3} - \frac{Q^2}{r_1^2} - 2 \frac{qQ}{Rr_1}. \quad (97)$$

7.10. Условие разрешимости уравнения $[0k; \lambda^{2N+5}]$

После исключения из уравнения (60) роторной комбинации получаем условие на интегралы по сфере малого радиуса, окружающей первую частицу-сингулярность, от следующих выражений:

$$\oint_{particle1} \left\{ - \gamma_{2N+4}^{00,0k} + \gamma_{2N+4}^{ks,0s} \right\} ds_k = 4 \int_{particle1} \left(F_{N+2}^0{}_p F_{N+3}^k{}_p \right) ds_k. \quad (98)$$

Аналогичное соотношение получается и для интегралов по поверхности, охватывающей вторую частицу.

Вычисление интегралов приводит к следующим соотношениям:

$$\frac{M}{2N+4} = M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) + \frac{qQ}{2R}, \quad \frac{m}{2N+4} = m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) + \frac{qQ}{2R}. \quad (99)$$

7.11. Нахождение γ_{2N+5}^{0k}

После использования координатного условия $[C.C.; \lambda^{2N+5}]$ уравнение $[0k; \lambda^{2N+5}]$ для нахождения γ_{2N+5}^{0k} принимает следующий вид:

$$\Delta \gamma_{2N+5} \gamma_{2N+3}^{0k} = \gamma_{2N+3}^{0k,00} - 4 \left(F_{N+2}^{0p} F_{N+3}^{kp} \right). \quad (100)$$

Если γ_{2N+3}^{0k} представить в виде

$$\gamma_{2N+3}^{0k} = \Delta \left\{ -2M \dot{\xi}_k r_1 - 2m \dot{\eta}_k r_2 \right\},$$

то уравнение (100) примет вид

$$\Delta \gamma_{2N+5}^{0k} = \Delta \left\{ -2M \dot{\xi}_k r_1 - 2m \dot{\eta}_k r_2 \right\}_{,00} - 4 \left(F_{N+2}^{0p} F_{N+3}^{kp} \right). \quad (101)$$

Преобразовываем последний член в правой части этого уравнения

$$\begin{aligned} -4 \left(F_{N+2}^{0p} F_{N+3}^{kp} \right) &= -4 \left(\frac{Q X_p}{r_1^3} + \frac{q(x_p - \eta_p)}{r_2^3} \right) \\ &\left(\frac{Q(X_k \dot{\xi}_p - X_p \dot{\xi}_k)}{r_1^3} + \frac{q((x_k - \eta_k) \dot{\eta}_p - (x_p - \eta_p) \dot{\eta}_k)}{r_2^3} \right). \end{aligned}$$

Оставляем сингулярные члены, начиная с пропорциональных $\sim 1/r_1^2$:

$$\begin{aligned} -4 \left(F_{N+2}^{0p} F_{N+3}^{kp} \right) &= -4 \frac{Q^2 (X_l \dot{\xi}_l) X_k}{r_1^6} + 4 \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^4} + 4 \frac{qQ (X_l \dot{\eta}_l)}{R^3 r_1^3} R_k - \\ &- 4 \frac{qQ (X_l R_l)}{R^3 r_1^3} \dot{\eta}_k + 4 \frac{qQ (R_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1^3} X_k - 4 \frac{qQ (R_l X_l)}{R^3 r_1^3} \dot{\xi}_k. \end{aligned}$$

Записываем полученное выражение в виде лапласиана

$$\begin{aligned} -4 \left(F_{N+2}^{0p} F_{N+3}^{kp} \right) &= \Delta \left(\frac{Q^2 (X_l \dot{\xi}_l) X_k}{r_1^4} - \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} + 2 \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} \right) + \\ &+ \Delta \left(-2 \frac{qQ (X_l \dot{\eta}_l)}{R^3 r_1} R_k + 2 \frac{qQ (X_l R_l)}{R^3 r_1} \dot{\eta}_k - 2 \frac{qQ (R_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1} X_k + 2 \frac{qQ (R_l X_l)}{R^3 r_1} \dot{\xi}_k \right). \end{aligned} \quad (102)$$

С учетом (102) получаем

$$\begin{aligned} \gamma_{2N+5}^{0k} &= \tilde{\gamma}_{2N+5}^{0k} - 2M \left\{ \dot{\xi}_k r_1 \right\}_{,00} + \frac{Q^2 (X_l \dot{\xi}_l) X_k}{r_1^4} - \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} + 2 \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} - \\ &- 2 \frac{qQ (X_l \dot{\eta}_l)}{R^3 r_1} R_k + 2 \frac{qQ (X_l R_l)}{R^3 r_1} \dot{\eta}_k - 2 \frac{qQ (R_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1} X_k + 2 \frac{qQ (R_l X_l)}{R^3 r_1} \dot{\xi}_k. \end{aligned} \quad (103)$$

Гармоническую функцию $\tilde{\gamma}_{2N+5}^{0k}$ находим из координатного условия $[C.C.; \lambda^{2N+5}]$, используя при этом условия разрешимости (99). Получаем

$$\tilde{\gamma}_{2N+5}^{0k} = -2M \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) \dot{\xi}_k}{r_1}. \quad (104)$$

Подстановка (104) в (103) дает окончательное выражение для γ_{2N+5}^{0k}

$$\begin{aligned} \gamma_{2N+5}^{0k} = & -4M \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) \dot{\xi}_k}{r_1} + 2M \frac{(X_l \dot{\xi}_l)^2 \dot{\xi}_k}{r_1^3} + \frac{Q^2 (X_l \dot{\xi}_l) X_k}{r_1^4} + \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} - \\ & - 4 \frac{qQ (X_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1} R_k - 2 \frac{qQ (X_l \dot{\eta}_l)}{R^3 r_1} R_k + 2 \frac{qQ (X_l R_l)}{R^3 r_1} \dot{\eta}_k - 2 \frac{qQ (R_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1} X_k. \end{aligned} \quad (105)$$

7.12. Нахождение A_{N+4}^0

Функция A_{N+4}^0 находится из уравнения $[0; \lambda^{N+4}]$. Если A_{N+3}^k представить в виде лапласиана

$$A_{N+3}^k = \frac{1}{2} \Delta (Q \dot{\xi}_k r_1 + q \dot{\eta}_k r_2),$$

то для A_{N+4}^0 может быть записано точное выражение

$$A_{N+4}^0 = - \left(\frac{Q'}{r_1} + \frac{q'}{r_2} \right) + \frac{1}{2} (Q \dot{\xi}_k r_1 + q \dot{\eta}_k r_2)_{,k0}, \quad (106)$$

где

$$Q' = Q - \frac{1}{2} Q (\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l), \quad q' = q - \frac{1}{2} Q (\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l). \quad (107)$$

7.13. Условие разрешимости уравнения $[k; \lambda^{N+5}]$

После исключения из уравнения (69) роторной комбинации получаем условие на интегралы по сфере малого радиуса, окружающей первую частицу-сингулярность, от следующих выражений:

$$\oint_{particle1} \left\{ -A_{N+4}^{0,k0} + A_{N+3}^{k,00} \right\} ds_k = 0. \quad (108)$$

Аналогичное соотношение получается и для интегралов по поверхности, охватывающей вторую частицу.

Вычисление интегралов приводит к следующим соотношениям:

$$\underline{Q}_{N+4} = \frac{1}{2} Q(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l), \quad \underline{q}_{N+4} = \frac{1}{2} q(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l). \quad (109)$$

7.14. Продолжение нахождения A_{N+4}^0

С учетом (109) получаем

$$\underline{Q}'_{N+4} = 0, \quad \underline{q}'_{N+4} = 0. \quad (110)$$

Из (106) и (110) следует:

$$\begin{aligned} A_{N+4}^0 = \frac{1}{2} (Q \dot{\xi}_k r_1 + q \dot{\eta}_k r_2)_{,k0} = & -\frac{Q(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{2r_1} - \frac{q(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{2r_2} - \frac{Q(X_l \dot{\xi}_l)^2}{2r_1^3} - \frac{qQ^2(X_l R_l)}{2MR^3 r_1} - \\ & - \frac{q[(x_l - \eta_l) \dot{\eta}_l]^2}{2r_2^3} + \frac{q^2 Q[R_l(x_l - \eta_l)]}{2mR^3 r_2}. \end{aligned} \quad (111)$$

Обратим внимание на то, что выражение (111) является точным. С помощью формулы

$$F_{N+4}^0{}_{0k} = -A_{N+4}^0{}_{0,k} \quad (112)$$

находим $F_{N+4}^0{}_{0k}$

$$\begin{aligned} F_{N+4}^0{}_{0k} = & -\frac{Q(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) X_k}{2r_1^3} + \frac{Q(X_l \dot{\xi}_l) \dot{\xi}_k}{r_1^3} - \frac{3}{2} \frac{Q(X_l \dot{\xi}_l)^2 X_k}{r_1^5} - \frac{qQ^2 R_k}{2MR^3 r_1} - \\ & - \frac{qQ^2(X_l R_l) X_k}{2MR^3 r_1^3} - \frac{q(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)(x_k - \eta_k)}{2r_2^3} + \frac{q[(x_l - \eta_l) \dot{\eta}_l] \dot{\eta}_k}{r_1^3} - \\ & - \frac{3}{2} \frac{q[(x_l - \eta_l) \dot{\eta}_l](x_k - \eta_k)}{r_2^5} - \frac{q^2 Q R_k}{2mR^3 r_2} + \frac{q^2 Q[R_l(x_l - \eta_l)](x_k - \eta_k)}{2mR^3 r_2^3}. \end{aligned} \quad (113)$$

Это тоже точное выражение; именно в такой форме оно понадобится при вычислении поверхностных интегралов вокруг частиц.

7.15. Условие разрешимости уравнения $[mn]$ в λ^{2N+6} -приближении

Интегрируем уравнение $[mn]$ в λ^{2N+6} -приближении по сфере малого радиуса, окружающей первую частицу. Отбрасываем роторные комбинации, как это делалось при нахождении условия разрешимости уравнения $[mn]$ в λ^{2N+4} -приближении. Получаем

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \oint_{\text{particle1}} \left\{ -\gamma_{2N+3} \ 0m,0n \right\} ds_n + \frac{1}{2} \oint_{\text{particle1}} \left\{ -\gamma_{2N+5} \ 0m,0n + \gamma_{2N+4} \ mn,00 \right\} ds_n = \\
 & = 2 \oint_{\text{particle1}} \left\{ -F_{N+2} \ 0m \ F_{N+2} \ 0n + \frac{1}{2} \delta_{mn} \left(F_{N+2} \ 0p \ F_{N+2} \ 0p \right) \right\} ds_n + \\
 & + 2 \oint_{\text{particle1}} \left\{ -F_{N+2} \ 0m \ F_{N+4} \ 0n - F_{N+2} \ 0n \ F_{N+4} \ 0m + F_{N+3} \ mp \ F_{N+3} \ np \right\} ds_n + \\
 & + 2 \oint_{\text{particle1}} \left\{ \delta_{mn} \left[F_{N+2} \ 0p \ F_{N+4} \ 0p - \frac{1}{4} F_{N+3} \ pq \ F_{N+3} \ pq \right] \right\} ds_n. \tag{114}
 \end{aligned}$$

В (114) входят не только члены порядка малости λ^{2N+6} , но и члены порядка малости λ^{2N+4} . Введем обозначения

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 & \equiv \frac{1}{2} \oint_{\text{particle1}} \left\{ \gamma_{2N+5} \ 0m,0n \right\} ds_n, \\
 \alpha_2 & \equiv -\frac{1}{2} \oint_{\text{particle1}} \left\{ \gamma_{2N+4} \ mn,00 \right\} ds_n, \\
 \beta_1 & \equiv 2 \oint_{\text{particle1}} \left\{ -F_{N+2} \ 0m \ F_{N+4} \ 0n - F_{N+2} \ 0n \ F_{N+4} \ 0m + F_{N+3} \ mp \ F_{N+3} \ np \right\} ds_n, \\
 \beta_2 & \equiv 2 \oint_{\text{particle1}} \left\{ \delta_{mn} \left[F_{N+2} \ 0p \ F_{N+4} \ 0p - \frac{1}{4} F_{N+3} \ pq \ F_{N+3} \ pq \right] \right\} ds_n.
 \end{aligned}$$

Таблица 2

Типы поверхностных интегралов

| | | | |
|-------|--|-------|---|
| I_1 | $\frac{Q^2}{r_1} \ddot{\xi}_k$ | I_6 | $\frac{qQ}{R} \ddot{\eta}_k$ |
| I_2 | $\frac{qQ(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{R^3} R_k$ | I_7 | $\frac{qQ(\dot{\eta}_s \dot{\eta}_s)}{R^3} R_k$ |
| I_3 | $\frac{qQ(R_l \dot{\xi}_l)}{R^3} \dot{\xi}_k$ | I_8 | $\frac{qQ(R_s \dot{\eta}_s)^2}{R^5} R_k$ |
| I_4 | $\frac{qQ(\dot{\xi}_l \dot{\eta}_l)}{R^3} R_k$ | I_9 | $\frac{qQ(R_s \ddot{\eta}_s)}{R^3} R_k$ |
| I_5 | $\frac{qQ(R_l \dot{\xi}_l)}{R^3} \dot{\eta}_k$ | | |

Результаты вычисления поверхностных интегралов от отдельных слагаемых представлены в табл. 3.

Значения поверхностных интегралов

| | α_1 | α_2 | β_1 | β_2 | $\alpha_1 + \alpha_2 + \beta_1 + \beta_2$ |
|-------|------------|------------|-----------|-----------|---|
| I_1 | 2/3 | | -2/3 | | 0 |
| I_2 | 3/2 | -1 | | | 1/2 |
| I_3 | 2 | -1 | | | 1 |
| I_4 | 1/3 | | | 2/3 | 1 |
| I_5 | -1/3 | | | -2/3 | -1 |
| I_6 | -1/3 | | -1/2 | | -1/2 |
| I_7 | | | -1/2 | | -1/2 |
| I_8 | | | 2 | -1/2 | 3/2 |
| I_9 | | | -1/2 | | -1/2 |

С учетом (85) получаем результирующие уравнения движения частиц. Выпишем уравнение только для первой из частиц

$$M\ddot{\xi}_k = -\frac{qQ}{R^3}R_k + qQ \left\{ \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\eta}_l)}{R^3}R_k - \frac{(R_l \dot{\xi}_l)}{R^3}\dot{\eta}_k + \frac{(R_l \dot{\xi}_l)}{R^3}\dot{\xi}_k + \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{2R^3}R_k - \frac{\ddot{\eta}_k}{2R} - \frac{(R_l \ddot{\eta}_l)}{2R^3}R_k + \frac{3(R_l \dot{\eta}_l)^2}{2R^5}R_k - \frac{(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{2R^3}R_k \right\}. \quad (115)$$

Это уравнение совпадает с уравнением (39), получаемым из лагранжиана Дарвина (37).

Обращает на себя внимание тот факт, что при вычислении поверхностных интегралов возникают в том числе и расходящиеся интегралы. К числу последних относятся выражения, содержащие $I_1 = \frac{Q^2}{r_1} \ddot{\xi}_k$. Сокращение этих интегралов, как следует из табл. 3, носит комплексный ха-

рактер в том смысле, что результирующий нулевой коэффициент получается за счет вклада как от левой, так и от правой части уравнений ОТО. Этот результат подтверждает самосогласованность конструируемой в данной работе аппроксимационной схемы на основе уравнений ОТО.

8. Сводка окончательных выражений

8.1. Схема получения выражений до λ^{2N+6} -приближения

Члены низшего порядка малости приведенных выше окончательных выражений для функций $\gamma_{\alpha\beta}$, A_α , $F_{\alpha\beta}$, а также для масс и зарядов частиц находятся без особых проблем вплоть до порядков, не выходящих за пределы λ^{2N+6} -приближения. В табл. 4 приведены последовательность и результаты промежуточных вычислений.

Таблица 4

Результаты вычислений до λ^{2N+6} -приближения

| Уравнение, условие разрешимости | Определяемая величина или получаемые соотношения | Примечание |
|---|--|--|
| Уравнение $[00; \lambda^{2N+2}]$ | γ_{2N+2}^{00} | Численные коэффициенты определяются по разложению решения Нордстрёма–Райсснера |
| Условие разрешимости $[0k; \lambda^{2N+3}]$ | $\dot{M} = 0$ $\dot{m} = 0$ | – |
| Уравнение $[0k; \lambda^{2N+3}]$ | γ_{2N+3}^{0k} | При нахождении используется координатное условие $[C.C.; \lambda^{2N+3}]$ |
| Уравнение $[0; \lambda^{N+2}]$ | A_{N+2}^0 | Численные коэффициенты определяются по разложению решения Нордстрёма–Райсснера |
| Условие разрешимости $[mn; \lambda^{2N+4}]$ | $M\ddot{\xi}_k = -\frac{qQ}{R^3}R_k$ $m\dot{\eta}_k = \frac{qQ}{R^3}R_k$ | – |
| Уравнение $[mn; \lambda^{2N+4}]$ | γ_{2N+4}^{mn} | При нахождении используется координатное условие $[C.C.; \lambda^{2N+4}]$ |
| Условие разрешимости $[k; \lambda^{N+3}]$ | $\dot{Q} = 0$ $\dot{q} = 0$ | – |
| Уравнение $[k; \lambda^{N+3}]$ | A_{N+3}^k | При нахождении используется калибровочное условие $[G.C.; \lambda^{N+3}]$ |
| Уравнение $[00; \lambda^{2N+4}]$ | γ_{2N+4}^{00} | – |
| Условие разрешимости $[0k; \lambda^{2N+5}]$ | $M_{2N+4} = \frac{1}{2}M(\dot{\xi}_l\dot{\xi}_l) + \frac{qQ}{2R}$ $m_{2N+4} = \frac{1}{2}m(\dot{\eta}_l\dot{\eta}_l) + \frac{qQ}{2R}$ | – |
| Уравнение $[00; \lambda^{2N+4}]$ | γ_{2N+5}^{0k} | При нахождении используется координатное условие $[C.C.; \lambda^{2N+5}]$ |
| Уравнение $[0; \lambda^{N+4}]$ | A_{N+4}^0 | – |
| Условие разрешимости $[k; \lambda^{N+5}]$ | $Q_{N+4} = \frac{1}{2}Q(\dot{\xi}_l\dot{\xi}_l)$ $q_{N+4} = \frac{1}{2}q(\dot{\eta}_l\dot{\eta}_l)$ | – |
| Условие разрешимости $[mn; \lambda^{2N+6}]$ | Уравнения движения частиц в $(v/c)^2$ -приближении | См. п. 6.2. |

8.2. Окончательные выражения λ^{2N+6} -приближения

 Выражения для $\gamma_{\alpha\beta}$

$$\gamma_{00} = \left(4\frac{M}{r_1} + 4\frac{m}{r_2}\right) + \left(4\frac{M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{r_1} - \frac{Q^2}{r_1^2} - 2\frac{M(X_l \dot{\xi}_l)^2}{r_1^3}\right) + \dots \quad (116)$$

$$\gamma_{0k} = \left(-4\frac{M\dot{\xi}_k}{r_1} - 4\frac{m\dot{\eta}_k}{r_2}\right) + \left(-4M\frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)\dot{\xi}_k}{r_1} + 2M\frac{(X_l \dot{\xi}_l)^2 \dot{\xi}_k}{r_1^3} + \frac{Q^2(X_l \dot{\xi}_l)X_k}{r_1^4} + \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} - \right. \\ \left. -4\frac{qQ(X_l \dot{\xi}_l)R_k}{R^3 r_1} - 2\frac{qQ(X_l \dot{\eta}_l)R_k}{R^3 r_1} + 2\frac{qQ(X_l R_l)\dot{\eta}_k}{R^3 r_1} - 2\frac{qQ(R_l \dot{\xi}_l)X_k}{R^3 r_1}\right) + \dots \quad (117)$$

$$\gamma_{mn} = 4M\frac{\dot{\xi}_m \dot{\xi}_n}{r_1} - \frac{Q^2 X_m X_n}{r_1^4} + 2\frac{qQ}{R^3} \frac{X_m R_n + X_n R_m - \delta_{mn}(X_l R_l)}{r_1} + \frac{4}{3} \frac{m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{R} \delta_{mn} + \frac{2}{3} \frac{qQ}{R^2} \delta_{mn} + \dots \quad (118)$$

 Компоненты метрики $g_{\alpha\beta}$ находятся по компонентам $\gamma_{\alpha\beta}$ с помощью формулы

$$g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + \gamma_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \eta_{\alpha\beta} (\eta^{\mu\nu} \gamma_{\mu\nu}). \quad (119)$$

 Выражения для A_α

$$A_0 = -\left(\frac{Q}{r_1} + \frac{q}{r_2}\right) - \frac{Q(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{2r_1} - \frac{q(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{2r_2} - \frac{Q(X_l \dot{\xi}_l)^2}{2r_1^3} - \frac{qQ^2(X_l R_l)}{2MR^3 r_1} - \\ - \frac{q[(x_l - \eta_l)\dot{\eta}_l]^2}{2r_2^3} + \frac{q^2 Q[R_l(x_l - \eta_l)]}{2mR^3 r_2} + \dots \quad (120)$$

$$A_k = \left(\frac{Q\dot{\xi}_k}{r_1} + \frac{q\dot{\eta}_k}{r_2}\right) + \dots \quad (121)$$

 Выражения для $F_{\alpha\beta}$

$$F_{0k} = -\left(\frac{QX_k}{r_1^3} + \frac{q(x_k - \eta_k)}{r_2^3}\right) - \frac{Q(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)X_k}{2r_1^3} + \frac{Q(X_l \dot{\xi}_l)\dot{\xi}_k}{r_1^3} - \frac{3}{2} \frac{Q(X_l \dot{\xi}_l)^2 X_k}{r_1^5} - \frac{qQ^2 R_k}{2MR^3 r_1} - \\ - \frac{qQ^2(X_l R_l)X_k}{2MR^3 r_1^3} - \frac{q(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)(x_k - \eta_k)}{2r_2^3} + \frac{q[(x_l - \eta_l)\dot{\eta}_l]\dot{\eta}_k}{r_1^3} - \\ - \frac{3}{2} \frac{q[(x_l - \eta_l)\dot{\eta}_l](x_k - \eta_k)}{r_2^5} - \frac{q^2 QR_k}{2mR^3 r_2} + \frac{q^2 Q[R_l(x_l - \eta_l)](x_k - \eta_k)}{2mR^3 r_2^3} + \dots \quad (122)$$

$$F_{mn} = - \left(\frac{Q(X_m \dot{\xi}_n - X_n \dot{\xi}_m)}{r_1^3} + \frac{q((x_m - \eta_m) \dot{\eta}_n - (x_n - \eta_n) \dot{\eta}_m)}{r_2^3} \right) + \dots \quad (123)$$

Выражение для массы и заряда

$$M = M + \left(\frac{M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{2} + \frac{qQ}{2R} \right) + \dots \quad (124)$$

$$Q = Q + \frac{1}{2} Q(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) + \dots \quad (125)$$

Уравнение движения второй частицы

$$m \ddot{\eta}_k = \frac{qQ}{R^3} R_k + qQ \left\{ - \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\eta}_l)}{R^3} R_k + \frac{(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \dot{\xi}_k - \frac{(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \dot{\eta}_k - \frac{(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{2R^3} R_k - \right. \\ \left. - \frac{\ddot{\xi}_k}{2R} - \frac{(R_l \ddot{\xi}_l)}{2R^3} R_k - \frac{3}{2} \frac{(R_l \dot{\xi}_l)^2}{R^5} R_k + \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{2R^3} R_k \right\}. \quad (126)$$

Вторые производные, входящие в (126), могут быть в рассматриваемом приближении исключены с помощью кулоновского закона взаимодействия (85).

Выражения (116)–(126) переходят в выражения, соответствующие (34)–(36), при обращении в нуль параметров второй частицы m , q и скоростей $\dot{\xi}_k$, $\dot{\eta}_k$.

9. Запись уравнений движения в физическом времени

Уравнения движения заряженных частиц, получаемые из лагранжиана Дарвина, записываются в координатном времени. Но если информация о движении заряженных частиц получается с помощью электромагнитных сигналов, то с экспериментом должны сравниваться следствия из уравнений движения частиц, записанных в терминах не координатного, а физического времени. Запишем уравнение движения в терминах физического времени.

Интервал физического времени dT определяется через интервал координатного времени dt и интервалы пространственных координат соотношением

$$dT = \sqrt{-g_{00}} dt - \frac{g_{0k} dx^k}{\sqrt{-g_{00}}}. \quad (127)$$

Квадрат интервала ds^2 записывается через dT так, как в плоском пространстве, т. е.

$$ds^2 = -dT^2 + dL^2, \quad (128)$$

где dL – физическая длина, определяемая соотношением

$$dL = \sqrt{\left(g_{mn} - \frac{g_{0m}g_{0n}}{g_{00}} \right) dx^m dx^n}. \quad (129)$$

В окрестности первой частицы из формул (116)–(119) в рассматриваемом приближении находим

$$\sqrt{-g} = 1 + \frac{M}{r_1} + \frac{m}{r_2} + 4 \frac{M(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l)}{r_1} - \frac{M(X_l \dot{\xi}_l)^2}{2r_1^3} - \frac{Q^2}{2r_1^2} - \frac{Q^2(X_l R_l)}{2R^3 r_1} + \frac{m(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)}{R} + \frac{qQ}{2R^2} + \dots \quad (130)$$

$$g_{0k} = \left(-4 \frac{M \dot{\xi}_k}{r_1} - 4 \frac{m \dot{\eta}_k}{r_2} \right) + \left(-4M \frac{(\dot{\xi}_l \dot{\xi}_l) \dot{\xi}_k}{r_1} + 2M \frac{(X_l \dot{\xi}_l)^2 \dot{\xi}_k}{r_1^3} + \frac{Q^2 (X_l \dot{\xi}_l) X_k}{r_1^4} + \frac{Q^2 \dot{\xi}_k}{r_1^2} - \right. \\ \left. - 4 \frac{qQ (X_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1} R_k - 2 \frac{qQ (X_l \dot{\eta}_l)}{R^3 r_1} R_k + 2 \frac{qQ (X_l R_l)}{R^3 r_1} \dot{\eta}_k - 2 \frac{qQ (R_l \dot{\xi}_l)}{R^3 r_1} X_k \right) + \dots \quad (131)$$

Из формул (127), (129–131) следует, что физические время и расстояния отличаются от соответствующих координатных времени и расстояний на величины, порядок малости которых выше тех, которые учитываются в рассматриваемом приближении. Поэтому уравнение вида (126) можно считать записанным в терминах физического времени и физического расстояния.

10. Обсуждение

В данной работе на примере системы из двух заряженных частиц последовательно выполнены все процедуры, предусмотренные методом ЭИГ, до λ^{2N+6} -приближения включительно. В результате в ПК приближении воспроизведены уравнения движения частиц, которые следуют из лагранжиана Дарвина. Одновременно с выводом уравнений движения получены явные выражения для компонент метрики и векторного потенциала электромагнитного поля.

Главная особенность решаемой задачи состоит в том, что метод ЭИГ применяется к ситуации с ненулевым тензором энергии-импульса. Для решения поставленной задачи пришлось классическую версию метода ЭИГ адаптировать к указанной ситуации с тем, чтобы применение метода было обоснованным. Адаптация состоит в следующем. Во-первых, аппроксимационные разложения записываются в тех же гармонических координатах, в которых записывается и точное решение уравнений ОТО для точечной заряженной частицы (т. е. решение Райсснера–Нордстрёма). Это позволяет калибровать аппроксимационные разложения по соответствующим разложениям точного решения без каких бы то ни было дополнительных пересчетов. Во-вторых, аккуратно проведено интегрирование по поверхностям, окружающим частицы-сингулярности, и доказано, что среди интегралов появляются расходящиеся. Такие интегралы в классической версии метода ЭИГ не были рассмотрены. В модификации Инфельда–Плебаньского [10] метода ЭИГ рассмотрение расходящихся интегралов было автоматически исключено с помощью аппарата специально введенных для этого сингулярных дельта-функций. На самом деле рассмотрение указанных интегралов необходимо для доказательства самосогласованности аппроксимационной схемы. То есть для доказательства вопроса, аналогичного вопросу о перенормируемости схемы в квантовой теории поля. В рассматриваемой задаче этот вопрос приобрел неожиданный аспект. Сокращение расходящихся поверхностных интегралов действительно происходит, но только

в том случае, если учитывать расходящиеся интегралы, появляющиеся как от левой части уравнений ОТО, так и от правой части. И такое комбинированное исчезновение расходящихся интегралов является, с нашей точки зрения, доказательством самосогласованности построенной с помощью метода ЭИГ аппроксимационной схемы. В-третьих, анализ порядков малости появляющихся в схеме величин привел к необходимости нестандартной расстановки порядков малости. То, что в схеме появился по меньшей мере еще один параметр малости, не было бы новым моментом. Ситуация с двумя параметрами малости рассматривается, например, в задаче о движении вращающихся частиц. Новый момент состоит в том, что для электрически связанной системы второй параметр малости должен выбираться так, чтобы в уравнениях движения заряженных частиц оставались только электродинамические члены. Проведенное рассмотрение показывает, что электрогравитационные члены в уравнениях движения могут появиться в области значений радиальной переменной R , в которой параметр малости $N \leq 2$. Однако, нахождение таких членов не было целью данной работы.

Таким образом, представленная работа на примере тестовой задачи с заранее известным ответом доказывает возможность нестандартного применения метода ЭИГ, т. е. применения в случаях отличных от нуля тензоров энергии-импульса.

Приложение

Техника вычислений по методу Эйнштейна–Инфельда–Гоффмана

Здесь приводятся некоторые технические приемы, используемые при выполнении процедур по методу ЭИГ. Приложение не является систематическим изложением материала, тем не менее позволяет ориентироваться в ключевых технических приемах. Используются обозначения, введенные в табл. 1.

Запись тензоров через лапласианы

Производные от величин типа $r_1 = \sqrt{X_1^2 + X_2^2 + X_3^2}$, где $X_k = x_k - \xi_k$, вычисляются стандартным образом:

$$r_{1,k} = \frac{X_k}{r_1}, \quad r_{2,k} = \frac{x_k - \eta_k}{r_2}.$$

Лапласианы определяются как

$$\Delta r_1 = \delta_{pq} r_{1,pq} = r_{1,ss}.$$

Список часто встречающихся гармонических функций

$$x_a x_b x_c - \frac{1}{5} r^2 [\delta_{ab} x_c + \delta_{bc} x_a + \delta_{ca} x_b]; \quad \left(x_m x_n - \frac{1}{3} r^2 \delta_{mn} \right); \quad (x_k);$$

$$\left(\frac{1}{r} \right); \quad \left(\frac{x_k}{r^3} \right); \quad \left(\frac{x_m x_n}{r^5} - \frac{1}{3} \frac{\delta_{mn}}{r^3} \right); \quad \left(\frac{x_a x_b x_c}{r^7} - \frac{1}{5} \frac{[\delta_{ab} x_c + \delta_{bc} x_a + \delta_{ca} x_b]}{r^5} \right).$$

Лапласианы от некоторых функций

$$\Delta \left(\frac{x_a x_b}{r^N} \right) = N(N-5) \frac{x_a x_b}{r^{N+2}} + \frac{2}{r^N} \delta_{ab}; \quad \Delta \left(\frac{1}{r^N} \right) = N(N-1) \frac{1}{r^{N+2}}; \quad \Delta (r x_a x_b) = 2r \delta_{ab} + 6 \frac{x_a x_b}{r};$$

$$\Delta (x_a x_b) = 2 \delta_{ab};$$

$$\begin{aligned} \Delta\left(\frac{x_a x_b}{r}\right) &= \frac{2}{r} \delta_{ab} - 4 \frac{x_a x_b}{r^3}; & \Delta\left(\frac{x_a x_b}{r^2}\right) &= \frac{2}{r^2} \delta_{ab} - 6 \frac{x_a x_b}{r^4}; & \Delta\left(\frac{x_a x_b}{r^3}\right) &= \frac{2}{r^3} \delta_{ab} - 6 \frac{x_a x_b}{r^5}; \\ \Delta\left(\frac{x_a x_b}{r^4}\right) &= \frac{2}{r^4} \delta_{ab} - 4 \frac{x_a x_b}{r^6}; & \Delta\left(\frac{x_a x_b}{r^5}\right) &= 2 \frac{\delta_{ab}}{r^5}; & \Delta\left(\frac{x_a x_b}{r^6}\right) &= 2 \frac{\delta_{ab}}{r^6} + 6 \frac{x_a x_b}{r^8}; & \Delta(r^2) &= 6; & \Delta(r) &= \frac{2}{r}; \\ \Delta\left(\frac{1}{r}\right) &= 0; & \Delta\left(\frac{1}{r^2}\right) &= \frac{2}{r^4}; & \Delta\left(\frac{1}{r^3}\right) &= \frac{6}{r^5}; & \Delta\left(\frac{1}{r^4}\right) &= \frac{12}{r^6}; & \Delta(r^2 x_a) &= 10 x_a; & \Delta(r x_a) &= 4 \frac{x_a}{r}; & \Delta(x_a) &= 0; \\ & & \Delta\left(\frac{x_a}{r}\right) &= -2 \frac{x_a}{r^3}; & \Delta\left(\frac{x_a}{r^2}\right) &= -2 \frac{x_a}{r^4}; & \Delta\left(\frac{x_a}{r^3}\right) &= 0; & \Delta\left(\frac{x_a}{r^4}\right) &= 4 \frac{x_a}{r^6}. \end{aligned}$$

Комбинируя приведенные и другие аналогичные соотношения, получаем выражения тензорных величин через лапласианы. Например:

$$\begin{aligned} r &= \Delta\left(\frac{1}{12} r^3\right); & 1 &= \Delta\left(\frac{1}{6} r^2\right); & \frac{1}{r} &= \Delta\left(\frac{1}{2} r\right); & \frac{1}{r^2} &= \Delta(\ln r); & \frac{1}{r^3} &= \Delta\left(-\frac{(\ln r)}{r}\right); \\ \frac{1}{r^4} &= \Delta\left(\frac{1}{2} \frac{1}{r^2}\right); & \frac{1}{r^5} &= \Delta\left(\frac{1}{6} \frac{1}{r^3}\right); & r x_a &= \left(\frac{1}{18} r^3 x_a\right); & x_a &= \Delta\left(\frac{1}{10} r^2 x_a\right); \\ \frac{x_a}{r} &= \Delta\left(\frac{1}{4} r x_a\right); & \frac{x_a}{r^2} &= \Delta\left(\frac{1}{3} x_a * (\ln r)\right); & \frac{x_a}{r^3} &= \Delta\left(-\frac{1}{2} \frac{x_a}{r}\right). \end{aligned}$$

Разложения

Предполагаем, что $r_1 \ll R$, т. е. разложения производятся в окрестности первой частицы. Тогда

$$\begin{aligned} r_2 &= R \left[1 - \frac{(X_s R_s)}{R^2} + \frac{r_1^2}{2R^2} - \frac{(X_s R_s)^2}{R^4} + \dots \right]; \\ \frac{1}{r_2} &= \frac{1}{R} \left[1 + \frac{(X_s R_s)}{R^2} - \frac{r_1^2}{2R^2} + \frac{3(X_s R_s)^2}{2R^4} - \frac{3r_1^2 (X_s R_s)}{2R^4} + \frac{5(X_s R_s)^3}{2R^6} + \dots \right]; \\ \frac{1}{r_2^2} &= \frac{1}{R^2} \left[1 + \frac{2(X_s R_s)}{R^2} - \frac{r_1^2}{R^2} + \frac{4(X_s R_s)^2}{R^4} + \dots \right]; \\ \frac{1}{r_2^3} &= \frac{1}{R^3} \left[1 + \frac{3(X_s R_s)}{R^2} - \frac{3r_1^2}{2R^2} + \frac{15(X_s R_s)^2}{2R^4} + \dots \right]; \\ \frac{1}{r_2^4} &= \frac{1}{R^4} \left[1 + \frac{4(X_s R_s)}{R^2} - \frac{2r_1^2}{R^2} + \frac{12(X_s R_s)^2}{R^4} + \dots \right]; \\ \frac{1}{r_2^5} &= \frac{1}{R^5} \left[1 + \frac{5(X_s R_s)}{R^2} - \frac{5r_1^2}{2R^2} + \frac{35(X_s R_s)^2}{R^4} + \dots \right]. \end{aligned}$$

Лемма об интегрировании роторных комбинаций

Лемма, о которой пойдет речь в этом приложении, доказана в работах [4, 5]. Приводим здесь ее формулировку.

Предположим, что трехмерное пространство является плоским и в нем выбрана декартова система координат. Предположим, что в этом пространстве задан антисимметричный тензор

$$Y_{ab} = -Y_{ba}. \quad (132)$$

При указанных предположениях справедлива следующая лемма: интеграл от дивергенции тензора Y_{ab} по любой замкнутой поверхности тождественно равен нулю, т. е.

$$I \equiv \oint_S Y_{ks,s} dS_k \equiv 0. \quad (133)$$

Комбинации типа $Y_{ab,b}$ от антисимметричного тензора будем называть роторными.

Важным представляется тот факт, что лемма оказывается справедливой и в том случае, когда внутри замкнутой поверхности имеется частица-сингулярность. Лемма позволяет упрощать вычисление поверхностных интегралов, выделяя роторные комбинации и обращая их автоматически в нуль.

Приведем пару примеров на использование леммы.

При нахождении условия разрешимости уравнения $[mn; \lambda^{2N+4}]$ было произведено интегрирование по сфере, окружающей первую частицу, уравнения $[0k; \lambda^{2N+3}]$, т. е. уравнения (59).

Интеграл имеет вид

$$\oint_{\text{particle 1}} \left\{ -\frac{1}{2} \left(\Delta \begin{matrix} \gamma & 0k \\ 2N+3 \end{matrix} \right) + \frac{1}{2} \left(-\begin{matrix} \gamma & 00,0 \\ 2N+2 & 1 \end{matrix} + \begin{matrix} \gamma & 0s,s \\ 2N+3 \end{matrix} \right)_{,k} \right\} dS_k = 0. \quad (134)$$

В фигурной скобке имеется комбинация

$$-\frac{1}{2} \left(\Delta \begin{matrix} \gamma & 0k \\ 2N+3 \end{matrix} \right) + \frac{1}{2} \left(\begin{matrix} \gamma & 0s,s \\ 2N+3 \end{matrix} \right)_{,k} = \frac{1}{2} \left(\begin{matrix} \gamma & 0s,k \\ 2N+3 \end{matrix} - \begin{matrix} \gamma & 0k,s \\ 2N+3 \end{matrix} \right)_{,s}, \quad (135)$$

которая является роторной. В силу леммы интеграл от этой комбинации тождественно равен нулю, поэтому условие разрешимости сводится просто к соотношениям (81).

Второй пример – интегрирование уравнения $[mn; \lambda^{2N+4}]$. Представим левую часть этого уравнения в виде суммы двух фигурных скобок

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left\{ \left(-\begin{matrix} \gamma & 0m,0n \\ 2N+3 & 1 \end{matrix} + \begin{matrix} \gamma & ms,sn \\ 2N+4 \end{matrix} \right) + \left(-\begin{matrix} \gamma & 0n,0m \\ 2N+3 & 1 \end{matrix} + \begin{matrix} \gamma & ns,sm \\ 2N+4 \end{matrix} \right) - \Delta \begin{matrix} \gamma & mn \\ 2N+4 \end{matrix} - \right. \\ & \quad \left. - \delta_{mn} \left(\begin{matrix} \gamma & 00,00 \\ 2N+2 & 11 \end{matrix} - 2 \begin{matrix} \gamma & 0s,0s \\ 2N+3 & 1 \end{matrix} + \begin{matrix} \gamma & pq,pq \\ 2N+4 \end{matrix} \right) \right\} = \\ & = \frac{1}{2} \left\{ -\begin{matrix} \gamma & 0m,0n \\ 2N+3 & 1 \end{matrix} - \begin{matrix} \gamma & 0n,0m \\ 2N+3 & 1 \end{matrix} - \delta_{mn} \left(\begin{matrix} \gamma & 00,00 \\ 2N+2 & 11 \end{matrix} - 2 \begin{matrix} \gamma & 0s,0s \\ 2N+3 & 1 \end{matrix} \right) \right\} + \\ & \quad + \frac{1}{2} \left\{ \left[\begin{matrix} \gamma & ms,sn \\ 2N+4 \end{matrix} - \Delta \begin{matrix} \gamma & mn \\ 2N+4 \end{matrix} \right] + \left[\begin{matrix} \gamma & ns,sm \\ 2N+4 \end{matrix} - \delta_{mn} \begin{matrix} \gamma & pq,pq \\ 2N+4 \end{matrix} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (136)$$

Внутри второй фигурной скобки имеется две квадратные скобки, каждая из которых является роторной комбинацией. В самом деле:

$$\left[\begin{array}{c} \gamma_{2N+4} \quad ms,sn \\ -\Delta \quad \gamma_{2N+4} \quad mn \end{array} \right] = \left(\begin{array}{c} \gamma_{2N+4} \quad ms,n \\ -\gamma_{2N+4} \quad mn,s \end{array} \right)_{,s}; \quad (137)$$

$$\left[\begin{array}{c} \gamma_{2N+4} \quad ns,sm \\ -\delta_{mn} \quad \gamma_{2N+4} \quad pq,pq \end{array} \right] = \left(\begin{array}{c} \delta_{ms} \quad \gamma_{2N+4} \quad np,p \\ -\delta_{mn} \quad \gamma_{2N+4} \quad sp,p \end{array} \right)_{,s}. \quad (138)$$

Получаем дивергенции от тензоров, антисимметричных по индексам n, s . От них поверхностный интеграл обращается тождественно в нуль.

Вариации Ли в квадратичном приближении

При доказательстве независимости уравнений движения частиц от вариаций Ли могут потребоваться члены для этих вариаций не только в линейном, но и в более высоких порядках приближения. Общая теория вариаций Ли в квадратичном приближении развита в работе [12].

Применительно к скалярному, векторному и тензорному полям выражения вариаций Ли в квадратичном приближении имеют вид

$$\delta_{\eta} \varphi = -\eta^{\nu} \varphi_{,\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu} \varphi_{,\mu\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu}{}_{,\mu} \varphi_{,\nu} + \dots \quad (139)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\eta} Y_{\alpha} = & -\eta^{\nu} Y_{\alpha,\nu} - \eta^{\nu}{}_{,\alpha} Y_{\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu} Y_{\alpha,\mu\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu}{}_{,\mu} Y_{\alpha,\nu} + \eta^{\mu}{}_{,\alpha} \eta^{\nu} Y_{\mu,\nu} + \\ & + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu}{}_{,\mu\alpha} Y_{\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu}{}_{,\alpha} \eta^{\nu}{}_{,\mu} Y_{\nu} + \dots \end{aligned} \quad (140)$$

$$\begin{aligned} \delta_{\eta} T_{\alpha\beta} = & -\eta^{\sigma} T_{\alpha\beta,\sigma} - \eta^{\sigma}{}_{,\alpha} T_{\sigma\beta} - \eta^{\sigma}{}_{,\beta} T_{\alpha\sigma} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu} T_{\alpha\beta,\mu\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu}{}_{,\mu} T_{\alpha\beta,\nu} + \\ & + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu}{}_{,\mu\alpha} T_{\nu\beta} + \frac{1}{2} \eta^{\mu} \eta^{\nu}{}_{,\mu\beta} T_{\alpha\nu} + \frac{1}{2} \eta^{\mu}{}_{,\alpha} \eta^{\nu}{}_{,\mu} T_{\nu\beta} + \frac{1}{2} \eta^{\mu}{}_{,\beta} \eta^{\nu}{}_{,\mu} T_{\alpha\nu} + \\ & + \eta^{\mu}{}_{,\alpha} \eta^{\nu} T_{\mu\beta,\nu} + \eta^{\mu}{}_{,\beta} \eta^{\nu} T_{\alpha\mu,\nu} + \eta^{\mu}{}_{,\alpha} \eta^{\nu}{}_{,\beta} T_{\mu\nu} + \dots \end{aligned} \quad (141)$$

Используя формулы (139)–(141), можно построить выражение для вариаций Ли от любого тензорного поля. Заметим, что линейные по вектору η^{α} члены в (139)–(141) совпадают с выражениями для вариаций Ли, обычно приводимыми в литературе. Вариации Ли обладают стандартным набором свойств: ассоциативностью, дистрибутивностью и т. д.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1988.
2. Jackson J. D. Classical Electrodynamics. New York: John Willey&Sons, 1999.
3. Todd B. Krause, Apte A., Morrison P. J. A unified approach to the Darwin approximation // Physics of Plasmas. 2007. Vol. 14. P. 102112.

4. Einstein A., Infeld L., Hoffmann B. // Ann. Math. 1938. Vol. 39. P. 65.
5. Einstein A., Infeld L. // Can. J. Math. 1949. Vol. 1. P. 209.
6. Gorbatenko M. V. The Second International A.D. Sakharov Conference on Physics. Proc. of the World Scientific Publishing Co Pte Ltd. 1997. P. 258.
7. <http://www.nasa.gov/home/>; http://en.wikipedia.org/wiki/Gravity_Probe_B; <http://einstein.stanford.edu/>.
8. James L. Anderson // Phys. Rev. 1977. Vol. D56, N 8. P. 4675.
9. Горбатенко М. В. // Теоретическая и математическая физика. 2005. Т. 142, № 1. С. 160.
10. Инфельд Л., Плебаньский Е. Движение и релятивизм. Движение тел в общей теории относительности. М.: Ин. лит-ра, 1962.
11. Брумберг В. А. Релятивистская небесная механика. М.: Наука, 1972.
12. Горбатенко М. В. // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1996. Вып. 3. С. 74.

On an Obtainment of Equations of Charge Particles Self-Consistent Motion by Means of Einstein-Infeld-Hoffman Method

M. V. Gorbatenko

The classical version of the method of Einstein-Infeld-Hoffman (EIH) of 1949 year was developed for the equation of General Relativity (GR) with zero energy-momentum tensor. In this work, an improved version of this method is applied for an obtainment of motion equations of two charge particles that is a case when energy-momentum tensor isn't zero. It is received the known from the electrodynamics equations which are resulted of Darwin Lagrangian. Some conceptual questions are discussed that arise at attempts of using of the GR equations with non-zero energy-momentum tensor for the obtainment of particle motion equations (a presence two and more smallness parameters, a presence an exact solution for one particle in coordinates which are used in approximated expansions of the EIH method, an automatic disappearance of divergent integrals at receiving of particle motion equations and so far).

УДК 537.876

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_40

Аналитические решения некоторых задач дифракции сверхширокополосного электромагнитного излучения в высокочастотном приближении для уравнений Максвелла

Н. П. Пятаков, А. В. Солдатов

Представлены некоторые аналитические решения задач дифракции сверхширокополосного электромагнитного излучения (СШП ЭМИ) на круглых отверстиях в высокочастотном приближении. Постановка задачи выбрана таким образом, что в задачах остается единственный безразмерный параметр – отношение длительности импульса СШП ЭМИ, выраженной в пространственных единицах, к диаметру круглого отверстия. Это позволяет наглядным образом определить основные закономерности процесса дифракции.

Введение

Явление дифракции является одним из наиболее изученных элементов теории распространения электромагнитных волн. В большей степени это касается, прежде всего, стационарных задач, когда установившееся пространственное распределение компонентов электромагнитного поля имеет гармоническую зависимость от времени. Для этого случая разработан целый набор аналитических методов исследования проблем дифракции в различной постановке, включающий как точные методы, основанные на решении интегральных уравнений принципа Гюйгенса, так и различные приближенные методы [1, 2]. Эти методы продолжают оставаться актуальными, несмотря на бурное развитие численных методик и специализированных электродинамических программных комплексов.

Вместе с тем, вопросы, связанные с дифракцией СШП ЭМИ, исследованы в меньшей степени. Использование известных решений для волн с гармонической зависимостью от времени

(получаемое через процедуру обратного преобразования Фурье и перехода к временному представлению) далеко не всегда может привести к наглядным результатам. Причина кроется в том, что процессы генерации, распространения и дифракции СШП ЭМИ обладают рядом особенностей по сравнению с аналогичными для гармонических волн. Среди этих особенностей (наглядное их представление будет дано далее) отметим следующие:

- характер диаграммы направленности (ДН), кардинально отличающейся от ДН источников гармонических волн. Это отличие проявляется в отсутствии ярко выраженных «лепестков» ДН – угловая зависимость ДН источников СШП ЭМИ плавная;

- амплитудно-временные и амплитудно-частотные характеристики зависят от направления распространения от источника СШП ЭМИ. Это можно пояснить следующим образом. ЭМИ с длиной волны λ имеет угол дифракционной расходимости $\theta \sim \lambda/D$, где D – диаметр апертуры излучающей антенны. Поэтому излучение с меньшей длиной волны (с большей частотой) сконцентрировано в относительно малом телесном угле, а более низкочастотная часть излучения расщеплена по большему телесному углу;

- область формирования волновой зоны определяется длительностью импульса и поэтому имеет различную протяженность в каждом направлении (для гармонических волн граница волновой зоны имеет сферическую поверхность). Это обстоятельство вынуждает исследовать особенности распространения СШП ЭМИ в ближней зоне и при формировании волновой зоны.

Все это оставляет актуальной задачу нахождения аналитических решений (пусть и приближенных) задач дифракции СШП ЭМИ. В настоящей работе получены аналитические оценки для основных характеристик (амплитудно-временных и пространственно-угловых зависимостей) СШП ЭМИ при дифракции на круглых отверстиях.

1. Уравнения высокочастотного приближения

Под высокочастотным приближением понимаем введенную в работе [3] приближенную систему уравнений, следующую из уравнений Максвелла, когда производится переход к задержанному времени и слагаемыми с производными от компонентов поля по пространственной переменной вдоль направления распространения волны пренебрегается по сравнению со слагаемыми, содержащими производные по переменной задержанного времени от этих же компонентов.

Полагаем, что волна распространяется из круглого отверстия в экране, расположенного в плоскости $z=0$. При этом распределение поперечных компонентов поля в этой плоскости будем задавать специфическим профилем, продолженным на бесконечность по поперечной пространственной координате. Вид этого профиля, позволяющего получить аналитические решения, будет конкретизирован далее. Постановка задачи в высокочастотном приближении одинакова как для случая падения электромагнитной волны на экран, так и для случая излучения из открытого конца волновода. Поэтому мы будем два рассматриваемых случая описывать в терминах волноводных мод: когда исходная волна обладает осевой симметрией (ТМ-мода) и не обладает ею (плоская волна, или ТЕМ-мода).

1.1. ТМ-мода

Рассмотрим случай осесимметричного распределения компонентов электромагнитного поля. Пусть отличными от нуля будут только компоненты E_ρ, E_z, H_φ , которые удовлетворяют следующей системе уравнений Максвелла в цилиндрических координатах (ρ, φ, z) , записанной с использованием переменной $\tau = ct - z$:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial \tau} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho H_\varphi), \\ \frac{\partial E_\rho}{\partial \tau} = \frac{\partial H_\varphi}{\partial \tau} - \frac{\partial H_\varphi}{\partial z}, \\ \frac{\partial H_\varphi}{\partial \tau} = \frac{\partial E_z}{\partial \rho} + \frac{\partial E_\rho}{\partial \tau} - \frac{\partial E_\rho}{\partial z}. \end{cases} \quad (1)$$

Получим для этой системы уравнения высокочастотного приближения. Сложив два последних уравнения, будем иметь следующее уравнение:

$$\frac{\partial (E_\rho + H_\varphi)}{\partial z} = \frac{\partial E_z}{\partial \rho},$$

его будем использовать вместо последнего уравнения системы (1). Кроме того, во втором уравнении (1) будем полагать, следуя [3]: $\left| \frac{\partial H_\varphi}{\partial z} \right| \ll \left| \frac{\partial H_\varphi}{\partial \tau} \right|$. Тогда $E_\rho = H_\varphi$. Используя обозначение $F = E_\rho + H_\varphi$, приведем исходную систему к следующему виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial \tau} = \frac{1}{2\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho F, \\ \frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial E_z}{\partial \rho}. \end{cases} \quad (2)$$

Граничные условия для системы (2) формулируются следующим образом:

- 1) при $\rho = 0$ $F = 0$;
- 2) при $z = 0$ $F = F_0(\tau, \rho)$, где F_0 – функция источников; на внешних границах ставится условие излучения;
- 3) при $\rho \rightarrow \infty$ $F \rightarrow 0$, $E_z \rightarrow 0$.

Из системы (2) получаем уравнение для функции F

$$\frac{\partial^2 F}{\partial z \partial \tau} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho F. \quad (3)$$

Отметим, что вывод уравнения (3) аналогичен выводу приближенного параболического уравнения для волн с гармонической зависимостью от времени [4].

1.2. ТЕМ-мода

В этом разделе получим уравнение высокочастотного приближения, аналогичное (3) для случая распределения компонентов электромагнитного поля, не обладающего осевой симметрией. Ограничимся случаем, когда отличными от нуля будут только компоненты E_x, H_y в декартовых координатах. Запишем волновое уравнение для компонента $E = E_x$ в цилиндрических координатах (нет зависимости от полярного угла), используя переменную τ :

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} E = 2 \frac{\partial^2 E}{\partial z \partial \tau} - \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} E = 0.$$

Пренебрегая членом со второй производной по координате z , получим уравнение в высокочастотном приближении, аналогичное уравнению (3) для данной исходной пространственной конфигурации электромагнитного поля:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z \partial \tau} = \frac{1}{2\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} E. \quad (4)$$

Граничные условия для уравнения (4) формулируются следующим образом:

- 1) при $\rho = 0$ E ограничено;
- 2) при $z = 0$ $E = E_0(\tau, \rho)$, где E_0 – функция источников;
на внешних границах ставятся условия излучения;
- 3) при $\rho \rightarrow \infty$ $E \rightarrow 0$.

2. Решения уравнений и анализ

При получении решений будем использовать пространственные переменные $(\rho$ и $z)$, нормированные на некоторую величину b , имеющую размерность длины, которую будем считать эффективным радиусом круглого отверстия. За ними оставим те же обозначения. Наряду с переменной τ мы будем использовать две безразмерные величины: $s = \tau/b$ и $\chi = \tau/\tau_0$, где τ_0 – характерный масштаб исходной временной зависимости СШП ЭМИ, имеющий размерность длины. Основным безразмерным параметром, связывающим b и τ_0 , обозначим как $a = \tau_0/b$. Очевидно: $\chi = s/a$.

При использовании новых безразмерных переменных (ρ, z, s) уравнения (3) и (4) сохраняют свой вид. Например, уравнение (3) примет вид

$$\frac{\partial^2 F}{\partial z \partial s} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho F. \quad (5)$$

Для получения аналитических решений везде в настоящей работе в качестве временной зависимости исходного (на граничной плоскости $z = 0$) СШП ЭМИ используем кусочно-гладкую функцию

$$E_0 = F_0 = g(\chi) = \eta(\chi)\chi - 2\eta(\chi-1)(\chi-1) + 2\eta(\chi-3)(\chi-3) - \eta(\chi-4)(\chi-4), \quad (6)$$

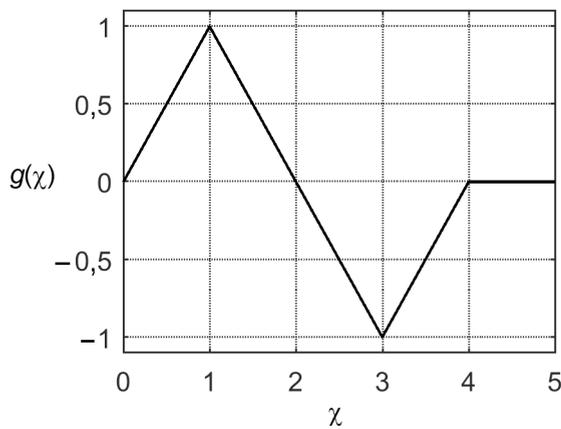


Рис. 1. Временная зависимость исходного СШП ЭМИ

где η – единичная функция Хевисайда. Функция g представлена на рис. 1. Выбор этой функции определен ее относительной простотой, позволяющей получить аналитические зависимости, и, кроме того, ее интеграл по временной переменной равен нулю, что характерно для компонент электромагнитного поля в зоне свободного распространения [5, задача 409]. Поперечный профиль падающей волны будем задавать специально подобранной (но реалистичной) функцией $\varphi_F(\rho)$, определенной на всей плоскости $z = 0$, но быстро спадающей с увеличением радиуса и моделирующей круглое отверстие конечного радиуса.

2.1. ТМ-мода

Дополним уравнение (5) граничным условием

$$F|_{z=0} = F_0 = g(s/a)\varphi_F(\rho), \quad s/a = \tau/\tau_0. \quad (7)$$

Произведем преобразования Ганкеля по радиальной переменной уравнения (5) по формулам

$$\hat{\Phi}(\lambda) = \int_0^\infty d\rho \rho J_1(\lambda\rho)\Phi(\rho), \quad \Phi(\rho) = \int_0^\infty d\lambda \lambda J_1(\lambda\rho)\hat{\Phi}(\lambda).$$

Уравнение (5) для образа функции F тогда примет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \hat{F}}{\partial z \partial s} + \frac{\lambda^2}{2} \hat{F} = 0.$$

Его решение для заданной в (6) функции g запишется в виде [6]

$$\hat{F} = \frac{\hat{\Phi}_F}{\lambda z a} (\eta(u_0)u_0 J_1(\lambda u_0) - 2\eta(u_1)u_1 J_1(\lambda u_1) + 2\eta(u_3)u_3 J_1(\lambda u_3) - \eta(u_4)u_4 J_1(\lambda u_4)), \quad (8)$$

где $u_k = \sqrt{2za(s/a - k)}$.

Дальнейшее решение зависит от конкретного вида φ_F . Рассмотрим пример зависимости вида

$$\varphi_F = \rho \exp(-\rho^2/2). \quad (9)$$

Представление Ганкеля для функции (9) есть

$$\hat{\phi}_F(\lambda) = \int_0^{\infty} d\rho \rho J_1(\lambda\rho) \phi_F(\rho) = \lambda \exp\left(-\lambda^2/2\right). \quad (10)$$

Подставляя (10) в (8) и воспользовавшись табличным интегралом

$$\int_0^{\infty} d\lambda \lambda J_1(\lambda\rho) J_1(\lambda u) e^{-\lambda^2/2} = \exp\left(-\frac{\rho^2 + u^2}{2}\right) I_1(u\rho),$$

где I – модифицированная функция Бесселя, получаем

$$F(\rho, z, \chi) = \frac{e^{-\rho^2/2}}{az} \left\{ \eta(u_0) S(u_0) - 2\eta(u_1) S(u_1) + 2\eta(u_3) S(u_3) - \eta(u_4) S(u_4) \right\}, \quad (11)$$

где

$$S(u) = u \exp(-u^2/2) I_1(u\rho), \quad u_k = \sqrt{2za(\chi - k)}, \quad \chi = s/a = \tau/\tau_0. \quad (12)$$

Соотношения (11), (12) являются решением задач (5)–(7), (9) и определяют пространственно-временные зависимости компонентов электромагнитного поля в высокочастотном приближении во всей области полупространства $z > 0$. Интересно сравнить это решение с асимптотическим решением в волновой зоне, получаемым методом интеграла Френеля–Кирхгофа. Вычисление этого асимптотического решения получается при выполнении стандартной вычислительной процедуры [4]. Введем сферическую систему координат (r, θ, φ) с началом, совпадающим с центром круглого отверстия и полярной осью, нормальной к плоскости отверстия (совпадающей с осью OZ , введенной ранее цилиндрической системы координат). Поскольку поперечные компоненты поля в волновой зоне имеют асимптотическую зависимость от радиуса $\sim 1/r$, асимптотическое решение будем описывать функцией

$$V(\chi, \theta) = rE_{\perp}, \quad (13)$$

где E_{\perp} – поперечный компонент электрического или магнитного поля. Далее в этом разделе мы будем в качестве E_{\perp} использовать функцию $F = E_{\rho} + H_{\varphi}$, введенную в (2), поскольку в рамках высокочастотного приближения эта величина совпадает с удвоенным значением радиального электрического поля: $F = 2E_{\rho}$. Так как для вычисления интеграла Френеля–Кирхгофа требуется определение скалярной величины на круглом отверстии, то в качестве таковой мы используем функцию

$$F_x^0 = F_0(t, \rho) \cos \varphi', \quad (14)$$

где φ' – азимутальный угол текущей точки на круглом отверстии. Пусть точка наблюдения M лежит в плоскости XOZ . Ее координаты в сферической системе есть $(r, \theta, \varphi = 0)$. Для рассматриваемого случая исходный интеграл в лапласовском представлении выглядит следующим образом:

$$\hat{F}_M = \int \frac{dA_{\text{out}}}{2\pi R} p \hat{F}_0 \cos \varphi' \exp(-pR), \quad (15)$$

где R – расстояние от текущей точки на выходной поверхности до точки наблюдения M , $dA_{\text{out}} = \rho' d\rho' d\varphi'$ – элемент площади поверхности отверстия. Асимптотика (15) при $r \rightarrow \infty$ получа-

ется заменой $R \approx r$ в знаменателе и $R \approx r - \frac{x\rho' \cos \varphi'}{r} = r - \rho' \sin \theta \cos \varphi'$ в фазовом множителе [4].

В результате записываем ($x = r \sin \theta$, штрих у ρ' и φ' опускаем)

$$\begin{aligned} \widehat{V} &= \frac{pe^{-pr}}{2\pi} \widehat{g}(p) \int_0^\infty d\rho \rho \varphi_F(\rho) \int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi \exp(pp \sin \theta \cos \varphi) = \\ &= pe^{-pr} \widehat{g}(p) \int_0^\infty d\rho \rho \varphi_F(\rho) I_1(pp \sin \theta). \end{aligned} \quad (16)$$

Исходя из вида функции g (6), мы можем записать

$$V(\chi) = V_1(\chi) - 2V_1(\chi - 1) + 2V_1(\chi - 3) - V_1(\chi - 4), \quad (17)$$

где образ \widehat{V}_1 вычисляется как

$$\widehat{V}_1(p) = e^{-pr} \frac{b}{p\tau_0} \int_0^\infty d\rho \rho^2 e^{-\rho^2/2} I_1(pb\rho \sin \theta) = \frac{b^2 \sin \theta}{\tau_0} \exp\left(-pr + \frac{p^2 b^2 \sin^2 \theta}{2}\right),$$

а для самой функции получаем

$$V_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{b}{\tau_0} \exp\left(-\frac{\tau^2}{2b^2 \sin^2 \theta}\right),$$

или в безразмерном виде

$$V_1(\chi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(-\frac{a^2 \chi^2}{2 \sin^2 \theta}\right). \quad (18)$$

Заметим, что в данной записи V безразмерно, поскольку является произведением безразмерного поля на безразмерное расстояние (измеряемое в единицах b). В этой записи временной интервал $-\infty \leq \chi \leq \infty$, в силу того что задержка между приходом сигнала в точку наблюдения из ближайшей точки на плоскости $z = 0$ и нулевой точки стремится к бесконечности вместе с $r \rightarrow \infty$.

Таким образом, получены решения: (11), (12) для уравнения (5); и (17), (18) для асимптотического значения поля в волновой зоне, полученного по методу интеграла Френеля–Кирхгофа, зависящие от единственного безразмерного параметра, равного отношению длительности импульса к радиусу круглого отверстия $a = \tau_0/b$, пригодные для аналитического исследования.

Дальнейшие результаты проиллюстрируем графиками. На рис. 2, 3 представлены результаты сравнения временных форм импульсов в дальней зоне, полученные по формулам (11), (12) и асимптотическим формулам (17), (18). Для удобства сравнения решения здесь и далее представлены в сферической системе координат $(r = \sqrt{\rho^2 + z^2}, \text{tg } \theta = \rho/z)$. Как видно из этих графиков, оба решения достаточно хорошо согласуются между собой для малых a (см. рис. 2). Для больших значений a согласие двух решений хуже в области больших углов θ (см. рис. 3), для которых асимптотическое решение не дает достаточную степень точности [4]. В этом случае заметное расхождение имеют как амплитудные значения, так и их положение на временной оси.

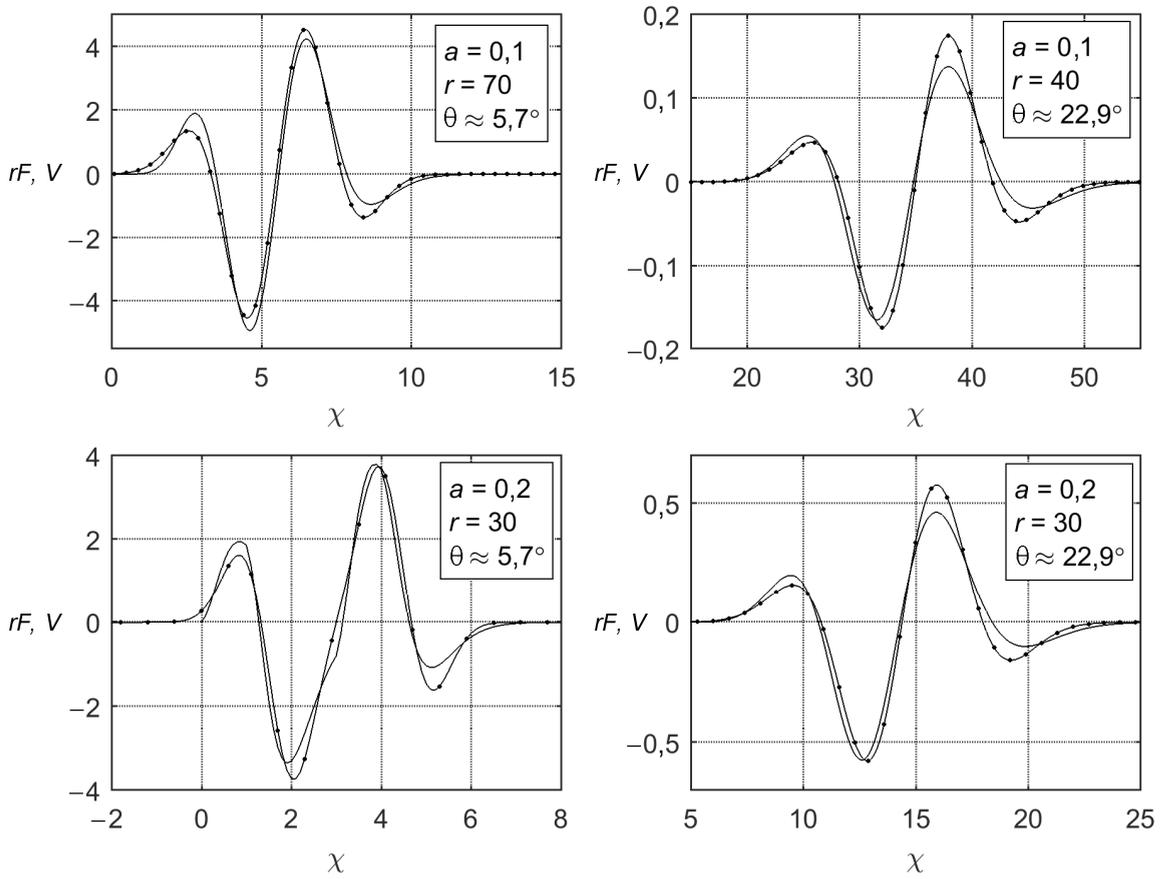


Рис. 2. Сравнение временных форм импульса для двух решений в дальней зоне для $a = 0,1; 0,2$;
 — — решение rF (11), — — решение V (17)

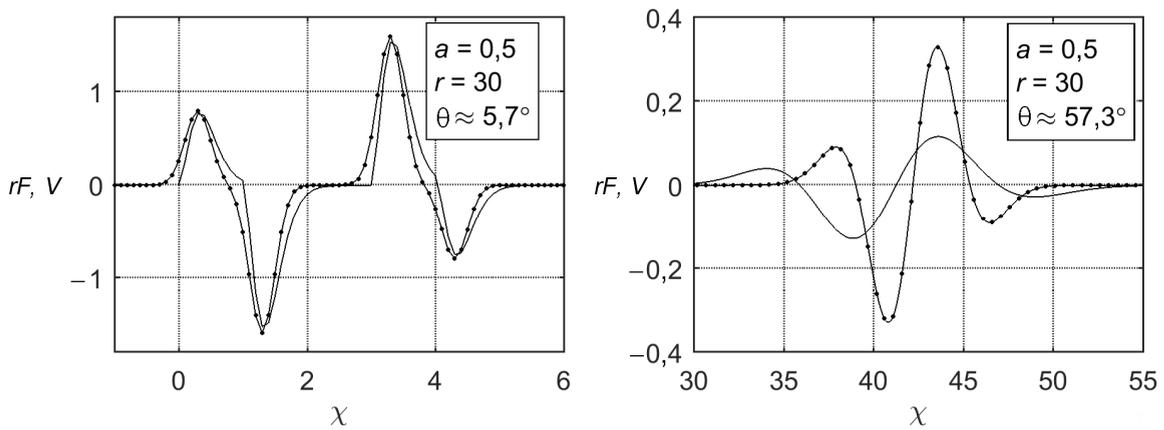


Рис. 3. Сравнение временных форм импульса для двух решений в дальней зоне для $a = 0,5; 1$;
 — — решение rF (11), — — решение V (17). Окончание рисунка на с. 48

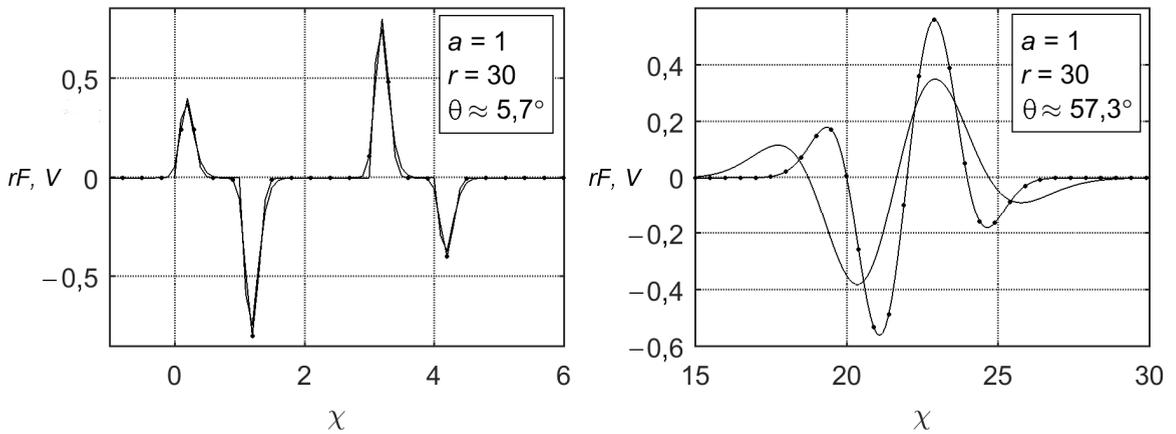


Рис. 3. Окончание

Представляет интерес вопрос о величине радиуса волновой зоны, в которой имеет место асимптотическое поведение временных форм поля в зависимости от радиуса $\sim 1/r$. В этом смысле показателен характер выхода «потенциала излучения» $A = r \max_{\tau} |F|$ на постоянное значение в зависимости от расстояния r для различных углов θ . Эти кривые для значений параметра $a = 0,1; 0,5$ представлены на рис. 4. Интересно отметить, что для разных углов характер выхода «потенциала излучения» на постоянное значение различен: возможен выход как без смены знака производной, так и со сменой знака. Кроме того, значение R_W – радиуса волновой зоны – существенно образом зависит от угла θ . (R_W определим из условия достижения в этой точке значения «потенциала излучения» $0,9$ от его асимптотического значения. Понятно, что сам уровень $0,9$ достаточно условен.) Чем меньше угол, тем большее значение приобретает R_W . То есть поверхность границы волновой зоны имеет сложный характер, она вытянута вдоль оси.

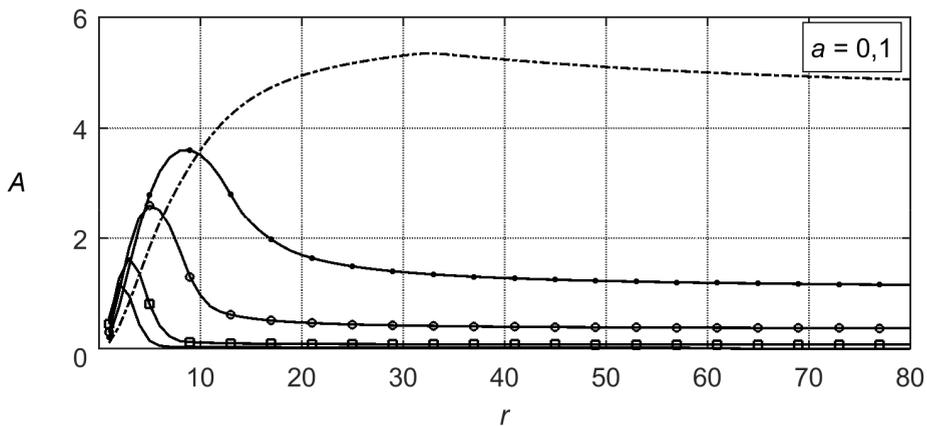


Рис. 4. Зависимость «потенциала излучения» от расстояния для различных аксиальных углов: \cdots – $\theta \approx 5,7^\circ$, --- – $\theta \approx 11,4^\circ$, $\text{---}\bullet\text{---}$ – $\theta \approx 17,1^\circ$, $\text{---}\square\text{---}$ – $\theta \approx 28,6^\circ$, --- – $\theta \approx 40,1^\circ$. Окончание рисунка на с. 49

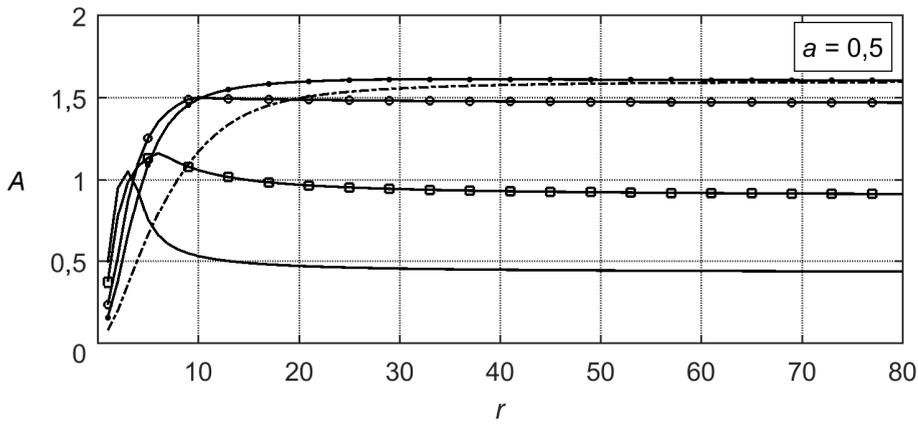


Рис. 4. Окончание

На рис. 5 показаны угловые распределения «потенциала излучения» для решения (11), (12) для различных параметров. Там же приведен «потенциал излучения» $A_V = \max_{\tau} |V|$ для асимптотического решения (17), (18). Эти графики иллюстрируют выход распределения (11), (12)

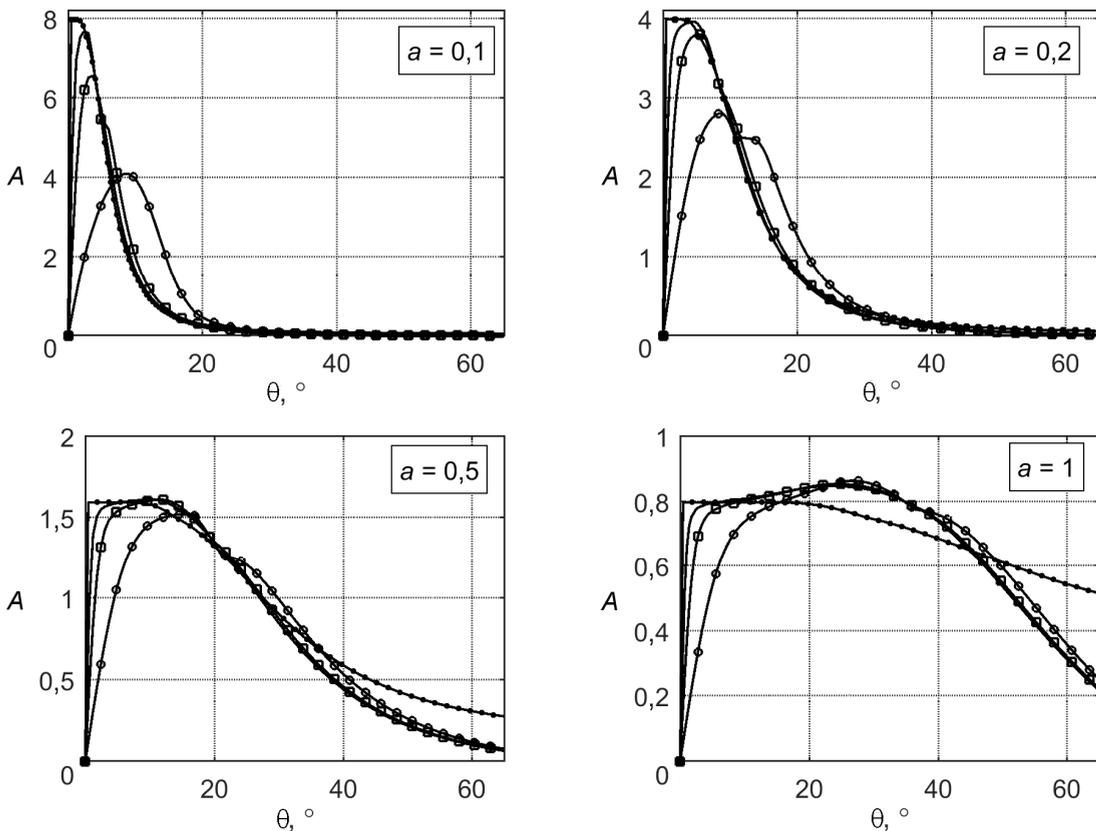


Рис. 5. Угловое распределение «потенциала излучения»: \bullet — $r = 10$, \blacksquare — $r = 30$, \blacktriangle — $r = 70$, \blacklozenge — A_V

на асимптотическое (17), (18) там, где высокочастотное приближение справедливо ($a < 0,2$). Также необходимо отметить, что угловая ширина распределения пропорциональна величине $a = \tau_0/b$ как и для гармонических волн, только с заменой длины волны на длительность импульса СШП ЭМИ.

Для проверки некоторых интегральных соотношений рассчитаем мощность излучения по формуле: $P_w = 2\pi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta V^2$. Находим максимум $P_{w \max}$ и его отношение к максимальной мощности на выходной апертуре, вычисляемой по формуле: $P_{i \max} = \max_{\tau} P_i = \pi$, где

$P_i = \int dS F_0^2 = 2\pi [g(\chi)]^2 \int_0^{\infty} d\rho \rho F^2 = \pi [g(\tau/\tau_0)]^2$. Кроме того, определим полную энергию по формуле:

$W_w = \int dt P_w = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\chi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta V^2$, и ее отношение к энергии на выходной апертуре, вычисляемой по формулам:

$$W_i = \int dt P_i = \pi \int_0^{\infty} d\chi [g(\chi)]^2 = \pi 4 \int_0^1 d\chi \chi^2 = 4\pi/3.$$

Эти характеристики в зависимости от параметра a представлены на рис. 6. Данные зависимости показывают, что полная энергия излучения сохраняется с 5 %-й точностью при $a < 0,2$, когда высокочастотное приближение справедливо. В то же время дефицит по пиковой мощности может составлять до 40 %. Это связано с самим характером СШП ЭМИ, когда временная форма импульса зависит от направления распространения. Это приводит к тому, что амплитудное значение поля в различных точках на сферической поверхности достигается в разные моменты времени, что приводит к уменьшению пиковой мощности при сохранении полной энергии.

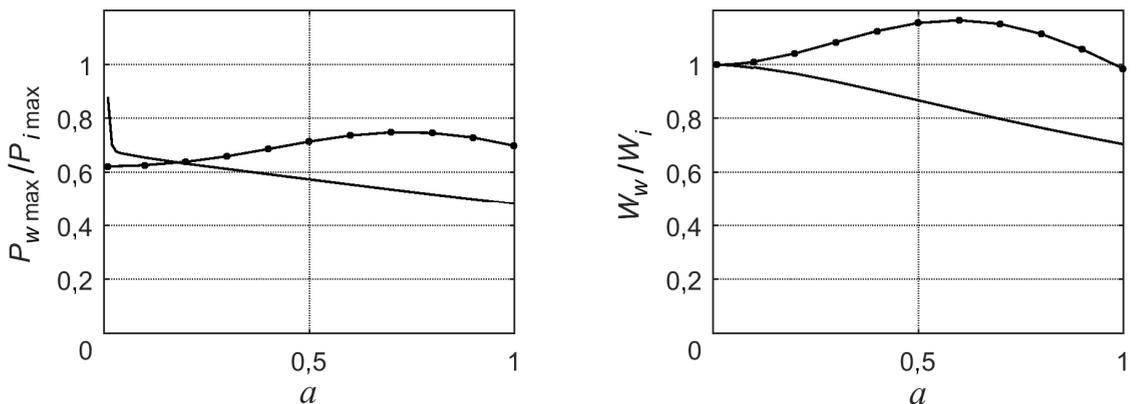


Рис. 6. Зависимость интегральных характеристик от параметра a :
 — для решения $rF(11)$, —•— для решения $V(17)$

2.2. ТЕМ-мода

Дополним уравнение (4) граничным условием в виде

$$E|_{z=0} = g(\tau/\tau_0)\varphi_E(\rho). \quad (19)$$

Для временной зависимости $g(\chi)$ будем использовать форму (6), а для радиального профиля – зависимость вида

$$\varphi_E = \exp(-\rho^2/2). \quad (20)$$

Заметим, что имеется связь между функциями, определяемыми уравнениями (3) и (4):

$$F = -\frac{\partial E}{\partial \rho}.$$

Поэтому решением (4), в безразмерном виде, будет функция

$$E = \int_{\rho}^{\infty} d\rho' F(\rho') \quad (21)$$

с функцией F , определяемой формулой (11).

Мы можем сразу вычислить значения E на оси ($\rho = 0$), используя табличный интеграл

$$\int_0^{\infty} dx e^{-px^2} I_1(cx) = \frac{1}{c} \left[\exp\left(\frac{c^2}{4p}\right) - 1 \right].$$

Имеем

$$E(\rho=0) = \frac{1}{az} \{ \eta(u_0)Q(u_0) - 2\eta(u_1)Q(u_1) + 2\eta(u_3)Q(u_3) - \eta(u_4)Q(u_4) \}, \quad (22)$$

где $Q(u) = 1 - \exp(-u^2/2)$, $u_m = \sqrt{2az(\chi - m)}$.

Отметим, что для случая ТМ-волны поле на оси равно нулю (см. (11)).

Аналогично предыдущему разделу, будем сравнивать решение (21) с асимптотическим, получаемым по аналогии с (16). Для асимптотического решения в волновой зоне записываем

$$\begin{aligned} \widehat{W} = \widehat{E}_x r &= \frac{pe^{-pr}}{2\pi} \hat{g}(p) \int_0^{\infty} d\rho \rho \varphi_E(\rho) \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(p\rho \sin\theta \cos\varphi) = \\ &= pe^{-pr} \hat{g}(p) \int_0^{\infty} d\rho \rho \varphi_E(\rho) I_0(p\rho \sin\theta). \end{aligned} \quad (23)$$

Используя (9), можно записать

$$W(\chi) = W_1(\chi) - 2W_1(\chi - 1) + 2W_1(\chi - 3) - W_1(\chi - 4), \quad (24)$$

где $\widehat{W}_1(p) = e^{-pr} \frac{b}{p\tau_0} \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\rho^2/2} I_0(pb\rho \sin\theta) = \frac{b}{p\tau_0} \exp\left(-pr + \frac{p^2 b^2 \sin^2\theta}{2}\right)$.

Выполняя обратное преобразование Лапласа, получаем

$$W_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{b}{\tau_0} \int_{-\infty}^{\tau/b \sin\theta} d\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right).$$

или в безразмерном виде

$$W_1(\chi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \int_{-\infty}^{a\chi/\sin\theta} d\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right). \tag{25}$$

Заметим, что в записи (24), (25) временной интервал $-\infty \leq \chi \leq \infty$, в силу того задержка между приходом сигнала в точку наблюдения из ближайшей точки на плоскости $z = 0$ и нулевой точки стремится к бесконечности вместе с $r \rightarrow \infty$. Для значения угла $\theta = 0$ (ось симметрии задачи) решение можно получить непосредственно из (22)

$$W_1(\chi, \theta = 0) = \frac{1}{a} \eta(\chi).$$

Дальнейший анализ строится таким же образом, как и для предыдущей задачи. Поэтому комментарии к рисункам, идентичные предыдущей задаче, мы опускаем. На рис. 7, 8 представлены результаты сравнения временных форм импульсов в дальней зоне, полученные по формулам (21), (22) и асимптотическим формулам (24), (25).

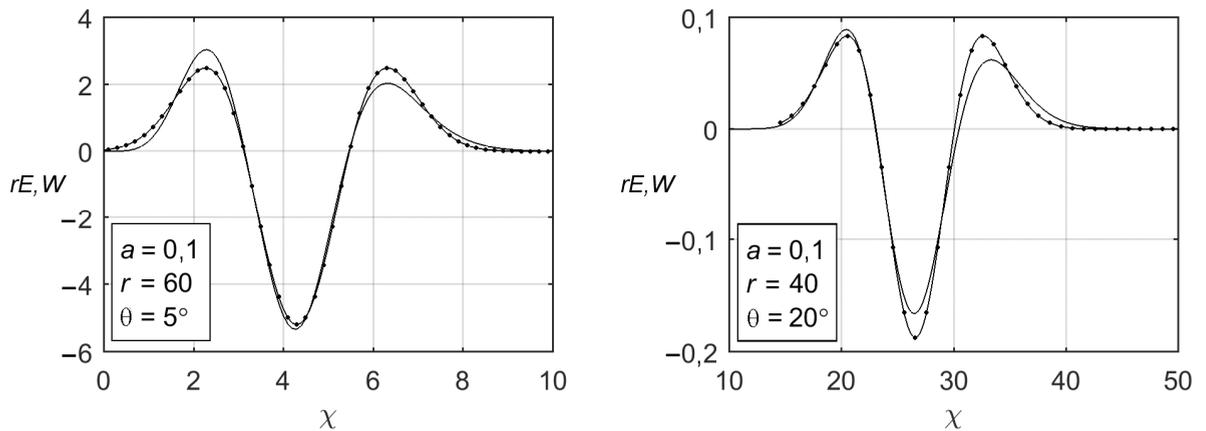


Рис. 7. Сравнение временных форм импульса для двух решений в дальней зоне для $a = 0,1; 0,2$: — — для решения $rE(21)$, —•— для решения $W(24)$. Окончание рисунка на с. 53

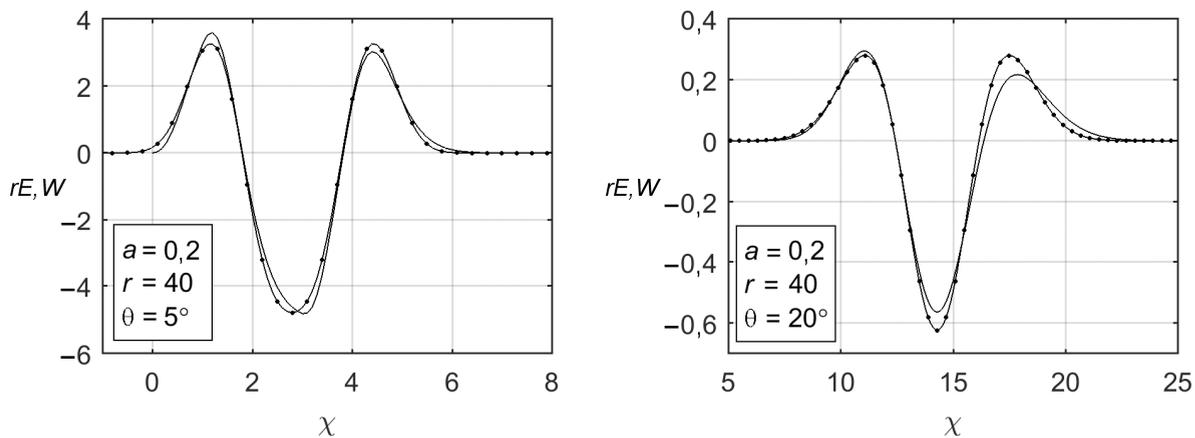


Рис. 7. Окончание

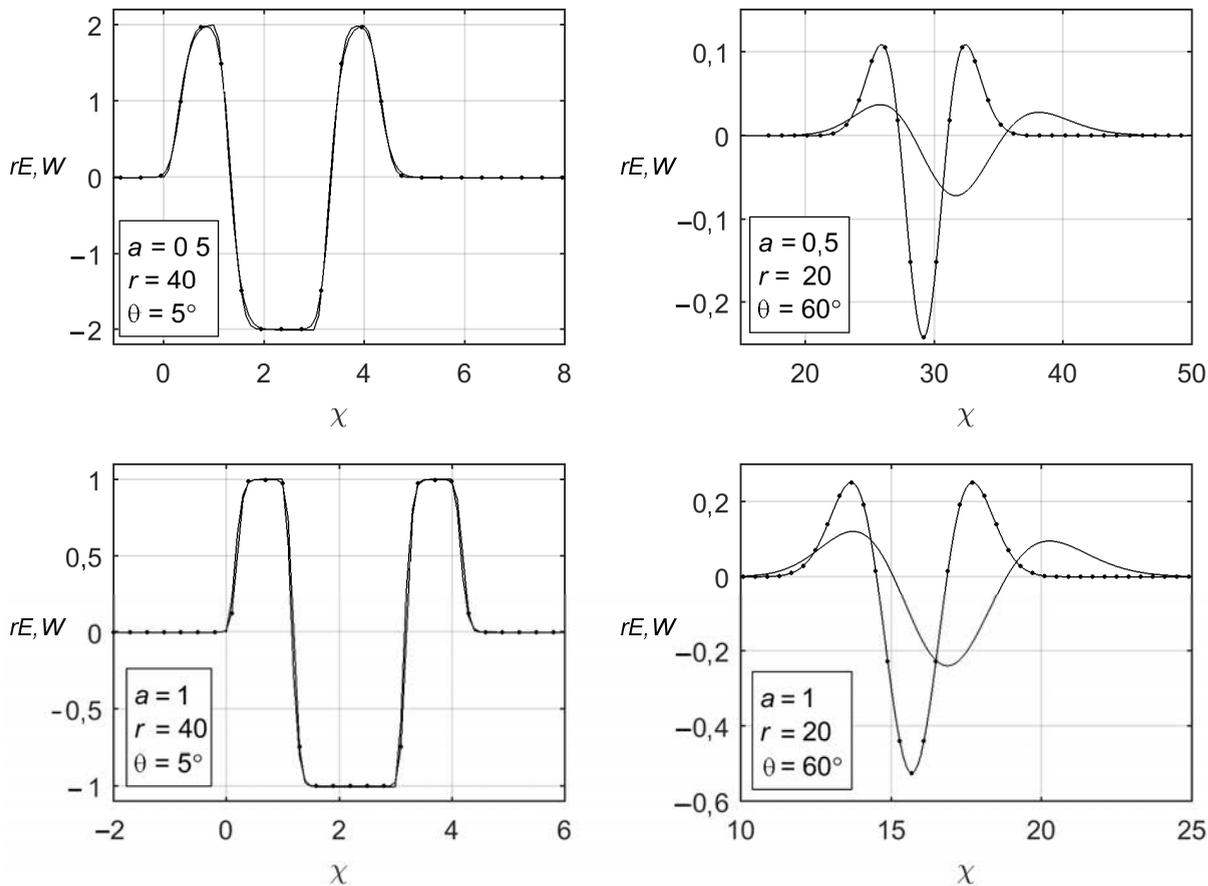


Рис. 8. Сравнение временных форм импульса для двух решений в дальней зоне для $a = 0,5; 1$:
 — — решение $rE(21)$, \bullet — решение $W(24)$

Кривые зависимости «потенциала излучения» от расстояния для значений параметра $a = 0,1; 0,5$ представлены на рис. 9.

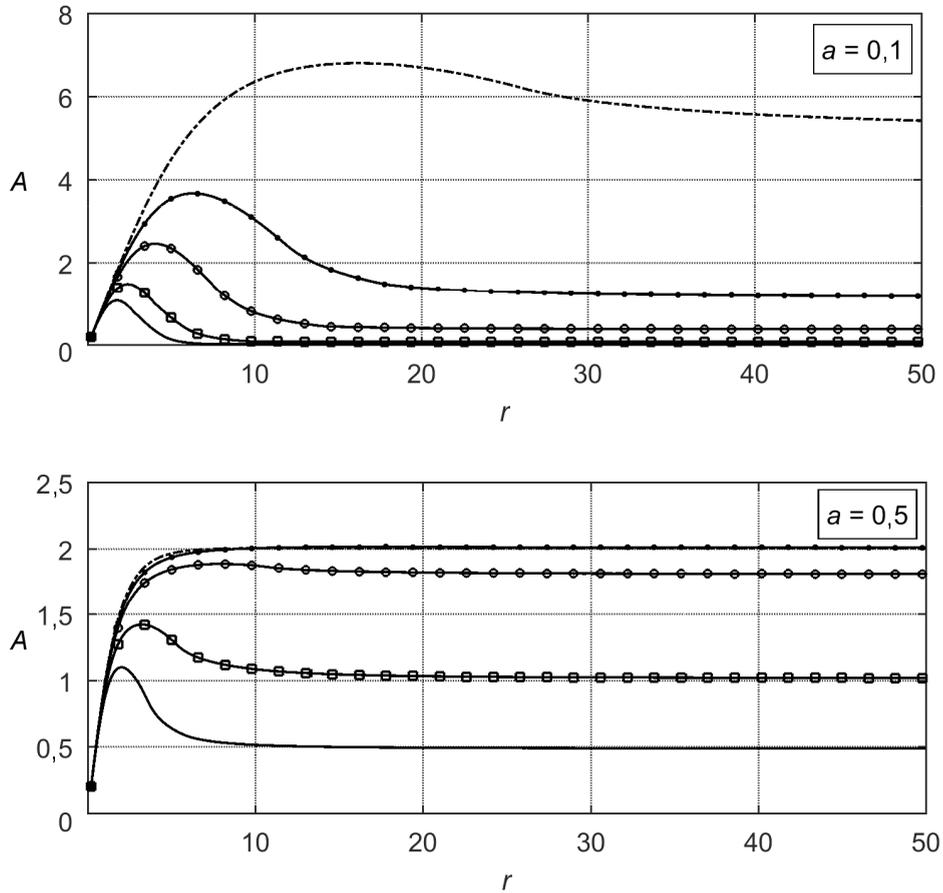


Рис. 9. Зависимость «потенциала излучения» от расстояния для различных аксиальных углов:
 - - - - $\theta \approx 5^\circ$, —•— $\theta \approx 10^\circ$, —○— $\theta \approx 15^\circ$, —□— $\theta \approx 25^\circ$, —△— $\theta \approx 35^\circ$

На рис. 10 приведены угловые распределения «потенциала излучения» для решения (21) и асимптотического решения (24), (25). Основное отличие этих зависимостей от аналогичных из предыдущей задачи состоит в том, что максимум распределения приходится на аксиальный угол $\theta = 0$.

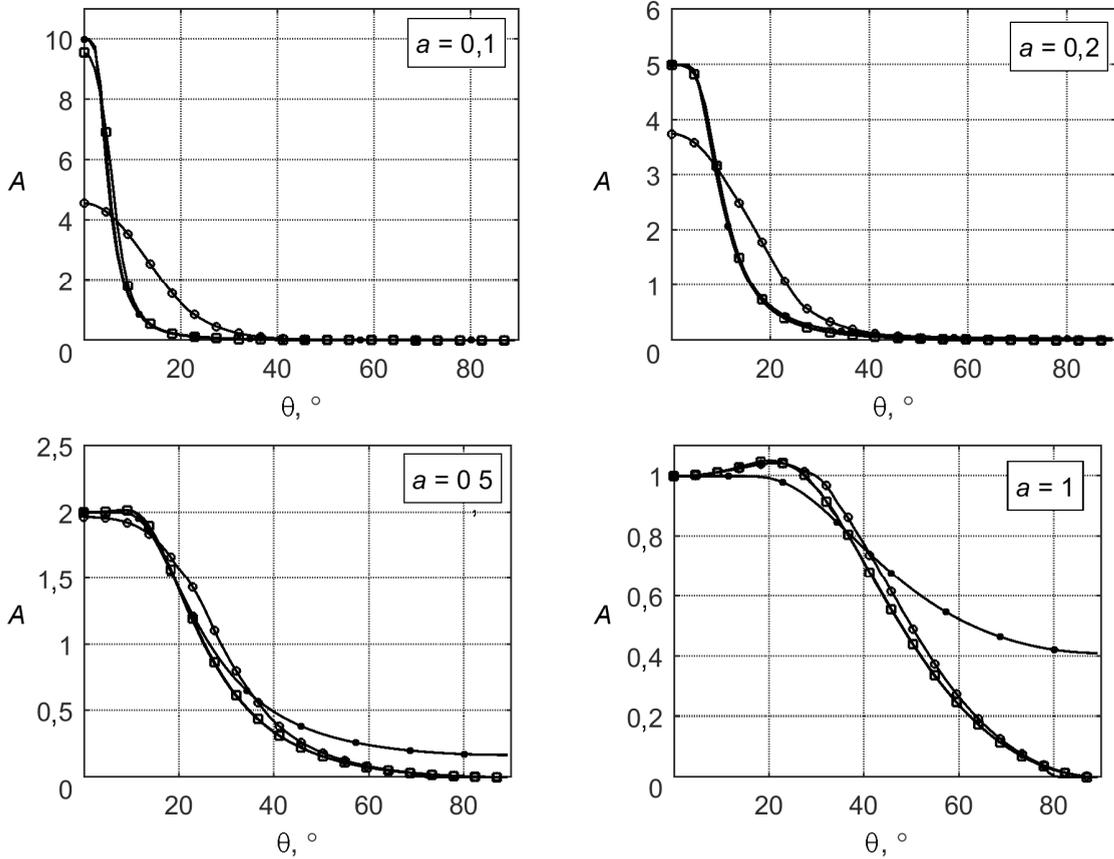


Рис. 10. Угловое распределение «потенциала излучения»: \circ — $r = 5$, \square — $r = 20$, \triangle — $r = 40$, — — A_w

Зависимость интегральных характеристик (нормированной мощности и энергии) от параметра a представлена на рис 11.

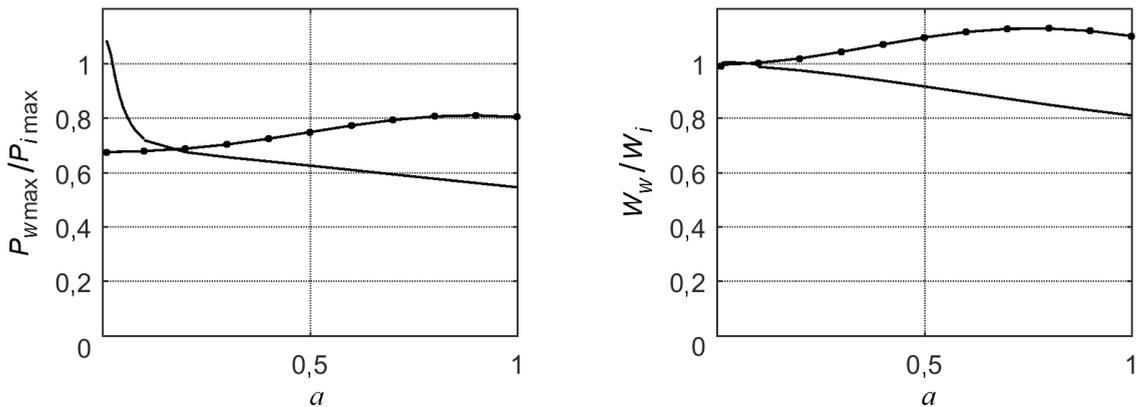


Рис. 11. Зависимость интегральных характеристик от параметра a : — — для решения $rE(21)$, $\text{—}\bullet\text{—}$ — для решения $W(24)$

Заключение

В высокочастотном приближении получены аналитические решения двух типов задач дифракции СШП ЭМИ на круглых отверстиях: при распространении ТМ- и ТЕМ-моды. Характер этих решений определяется единственным безразмерным параметром a – отношением длительности СШП импульса, выраженной в пространственных единицах, к радиусу отверстия. Отметим следующие важные результаты.

При малом параметре a , когда справедливо высокочастотное приближение, в волновой зоне два приближения: по методу высокочастотного уравнения и асимптотическое значение интеграла Френеля–Кирхгофа дают одинаковые результаты, за исключением случая больших аксиальных углов, когда точность вычислений по методу интеграла Френеля–Кирхгофа становится невысока.

Амплитудно-временная зависимость компонентов электромагнитного поля существенным образом зависит от аксиального угла. Это связано с принципиально различным поведением излучения из различных частотных диапазонов: более высокие частоты сконцентрированы в более узком аксиальном угле. Такое поведение влечет за собой два следствия. Первое – ДН излучения коренным образом отличается от ДН гармонических по времени сигналов с наличием основного и боковых лепестков. ДН СШП импульса имеет характер плавной функции азимутального угла с единственным максимумом. Угол максимальной концентрации энергии в волновой зоне (ширина ДН) пропорционален отношению длительности импульса к радиусу круглого отверстия. Второе – значения пиковой мощности, вычисляемые по потоку вектора Пойнтинга на апертуре круглого отверстия и в дальней зоне, могут значительно различаться.

Список литературы

1. Хенл Х., Мауэ А., Вестфаль К. Теория дифракции. М.: Мир, 1964.
2. Уфимцев П. Я. Теория дифракционных краевых волн в электродинамике. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007.
3. Karzas W. J., Letter R. Detection of the Electromagnetic Radiation from Nuclear Explosion in Space // Phys. Rev. 1965. Vol. 137, N 5B. P. 1369–1378.
4. Вайнштейн Л. А. Электромагнитные волны. М.: Радио и связь, 1988.
5. Алексеев А. И. Сборник задач по классической электродинамике. М.: Наука, 1977.
6. Солдатов А. В., Терехин В. А. Распространение сверхширокополосного электромагнитного сигнала в ионосферной плазме // Физика плазмы. 2016. Т. 42, № 10. С. 927.

Analitical Solutions of Some Diffraction Problems for the Ultra-Wide Band Electromagnetic Waves in High-Frequency Approximation for Maxwell Equations

N. P. Pyatakov, A. V. Soldatov

Some analytical solutions of diffraction problems for the ultra-wide band (UWB) electromagnetic waves in round holes in the high-frequency approximation are presented. Problem formulation has been chosen in such a way that just a single dimensionless parameter defines the solution. The parameter is the ratio of UWB pulse duration expressed in distance dimension to the round hole diameter. It allows us to define the main specialties of diffraction conveniently.

УДК 530.1; 539.8

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_58

Кластерная модель образования наночастиц и мезообъектов ударными волнами в тяжелых металах и при выбросах с их поверхности

Э. Э. Лин

На основе кластерной модели рассчитаны наиболее вероятные, средние и максимально возможные размеры наночастиц и мезообъектов, образующихся в процессах ударно-индуцированной перестройки микроструктуры тяжелых металлов и последующих выбросов частиц с поверхности макроскопических образцов вблизи дефектов кристаллической решетки. Предложенная модель дает полный расчетный диапазон характеристических размеров исследуемых нано- и мезообъектов от ≈ 1 нм до ≈ 370 мкм.

Введение

Традиционно теоретическое описание взрывных выбросов частиц с поверхности металлов разделяется на атомистическое и молекулярно-динамическое моделирование, а также на рассмотрение газодинамической стадии процесса формирования пылевых облаков в многофазной среде [1]. В работе [2] предложен твердофазный механизм ударно-волнового образования пылевых частиц тяжелых металлов, в частности, актиноида [3]. Этот механизм связан с разрушением кристаллической решетки вещества на дефектах структуры в результате разрывов межатомных связей и образования «обломков» кристаллической решетки – атомных кластеров. В дальнейшем происходит коалесценция атомных кластеров (наночастиц) внутри ударной волны (УВ) в результате их фононных возбуждений и взаимной компенсации незадействованных электронных связей поверхностных атомов.

Предложенный кластерный подход занимает промежуточное положение между атомистическим моделированием и газодинамическими расчетами и основан на представлениях о существовании в кристаллах фононов и точечных дефектов – вакансий и межузельных атомов. Эти «базовые» дефекты обуславливают разрыв межатомных связей в результате возбуждения колебаний решетки при ударном воздействии и подбарьерных переходов в квантово-механической системе,

когда число колебаний во «фронте» УВ чрезвычайно велико ($\sim 10^2 - 10^3$). Принципиально возможность квантового туннелирования атомов в кристалле при внешнем воздействии доказана в работе [4]. В статье [2], на основе дифференциального уравнения для роста среднего размера объектов со временем, полученного в работе [5] исходя из соотношений неопределенностей «координата–импульс» в пространстве размеров кластеров a и «энергия–время», которые в случае квантовой системы в когерентном состоянии (в приближении гармонических колебаний атомов с одинаковой частотой) выполняются в виде точных равенств, рассчитаны средние размеры наночастиц и мезозерен в УВ, лежащие в диапазоне от 10 нм до 300 мкм. Данный диапазон охватывает различные режимы твердофазного механизма агрегации объектов: малый поток зародышей на частицу, фронтальные столкновения, касательные взаимодействия, одновременное возбуждение объектов во всем объеме. Можно полагать, что эти режимы соответствуют процессам перестройки микроструктуры металла при ударном воздействии. Перестройка внутри УВ является первичным процессом по отношению к последующему выбросу частиц с поверхности образца при выходе УВ в вакуум, газ или жидкость и при образовании встречной волны разрежения, распространяющейся внутрь твердого образца. Выбросы могут происходить на приповерхностных дефектах кристаллической структуры вещества: вакансиях и межузельных атомах, микрополостях и порах, дислокациях, при движении которых образуются вакансии, а также на межзеренных границах. Можно полагать, что в потоке объектов, образовавшемся в многофазной среде при выбросе наночастиц с поверхности образца, могут происходить коалесценция наночастиц и агрегация мезозерен по описанному выше фононному механизму в режимах малого потока зародышей на частицу и касательных взаимодействий объектов.

В данной работе проведены расчеты характеристических размеров наночастиц и мезообъектов, которые могут образоваться в процессе ударно-индуцированной перестройки микроструктуры металла внутри УВ и последующего выброса частиц с поверхности образца. Исходя из приведенного в работе [5] решения методом Вентцеля–Крамерса–Бриллюена кинетического уравнения Фоккера–Планка (УФП), описывающего распространение волны плотности распределения объектов в пространстве размеров a , можно записать следующую формулу для относительной плотности P распределения, которая отражает существование множества локальных максимумов P , соответствующих наиболее вероятным (устойчивым) размерам:

$$P \approx \left(\frac{a}{a_0} \right)^{-3/4} \times \cos \frac{2\sqrt{2}}{5} \frac{\lambda}{\beta^{1/2}} \left(\left(\frac{a}{a_0} \right)^{5/2} - 1 \right). \quad (1)$$

В этой формуле, во избежание чрезмерных подробностей непринципиального характера, целесообразно не брать модуль косинуса, а рассматривать только положительную часть осциллирующего множителя. Здесь параметр $\beta \approx \hbar t_i / 2m_0 a_0^2$ (\hbar – приведенная постоянная Планка) определяется массой m_0 и размером a_0 зародыша, а также характерным параметром времени t_i взаимодействия объектов, $\lambda \approx \sqrt{15/2}$ – постоянная, определяемая путем сшивки решения УФП для малых частиц с первым максимумом уравнения (1), соответствующим зародышу. При описании процессов внутри образца для учета интенсивности УВ параметр t_i целесообразно принять равным периоду колебаний атомов, задаваемому ударным фронтом: $t_i = 2\pi\hbar/k_B T$, где T – температура во фронте УВ, k_B – постоянная Больцмана. В качестве зародыша целесообразно рассмотреть наночастицу с размером $a_0 \equiv a_* = 2a_c$, где a_c – размер ячейки кубической кристаллической решетки. Это

отражает трансляционную симметрию решетки, т. е. образование кристаллического порядка. При описании процессов в потоке выброшенных частиц параметр t_i целесообразно принять равным времени пробега звуковой волны по зародышу: $t_i = 2a_c/c_0$, c_0 – скорость звука в веществе образца.

Максимально возможный размер объектов можно оценить по формуле, полученной в работе [5] на основе соотношения неопределенностей для координаты и импульса в пространстве размеров a объектов при условии сохранения массы в элементарном процессе взаимодействия объекта с зародышем:

$$a_{\max} \approx \frac{2m_0 a_0^3}{9\hbar \Delta t_{\min}} = \frac{2\rho_0 a_0^6}{9\hbar \Delta t_{\min}}, \quad (2)$$

где ρ_0 – плотность вещества с кубической кристаллической решеткой. В процессах внутри образца $\Delta t_{\min} = 2\pi\hbar/kT$, в процессах выброса $\Delta t_{\min} = 2a_c/c_0$.

Средние размеры объектов после выброса с поверхности образца, при указанных выше режимах агрегации и при условии сохранения ближнего порядка на базе двух размеров кристаллической ячейки, рассчитываются по следующим формулам [2, 5]:

$$\langle a \rangle_{sf} = \left(\frac{75k_B T a_c^3}{A m_u} \right)^{1/5} t^{2/5}, \quad (3)$$

$$\langle a \rangle_{sm} = \left(\frac{27k_B T a_c}{4A m_u} \right)^{1/3} t^{2/3}, \quad (4)$$

где A и m_u – массовое число и атомная единица массы. Формула (3) соответствует малому потоку (st) зародышей на частицу, формула (4) – касательному взаимодействию объектов (сдвиговый механизм « sm »).

На рис. 1 и 2 приведены расчеты по формуле (1) для процессов внутри образца из свинца с параметром гранцентрированной кубической решетки $a_c = 0,49496$ нм [6] при температурах $T = 300$ и 500 К. Шаг расчетов равнялся атомному радиусу. Можно видеть, что с увеличением интенсивности УВ наибольший по величине $P(a)$ локальный максимум после зародышей смещается в сторону увеличения координаты a . При этом в распределении $P(a)$ появляются более широкие максимумы (сдвоенные и строенные пульсации), означающие слияние наночастиц. Аналогичные распределения $P(a)$ получены для актиноида [3]. Максимально возможный размер зерен, рассчитанный по формуле (2) для УВ в свинце при $T = 300$ К, $a_{\max} \approx 140$ мкм, при $T = 500$ К $a_{\max} \approx 230$ мкм. В случае актиноида при $T = 500$ К $a_{\max} \approx 200$ мкм, при $T = 900$ К $a_{\max} \approx 370$ мкм. Таким образом, рассчитанные в данной работе размеры твердофазных частиц, образующихся внутри макроскопических образцов из рассматриваемых металлов при ударных воздействиях, лежат в диапазоне от ≈ 1 нм до ≈ 370 мкм. Он включает в себя упомянутые выше средние размеры объектов, рассчитанные в работе [2].

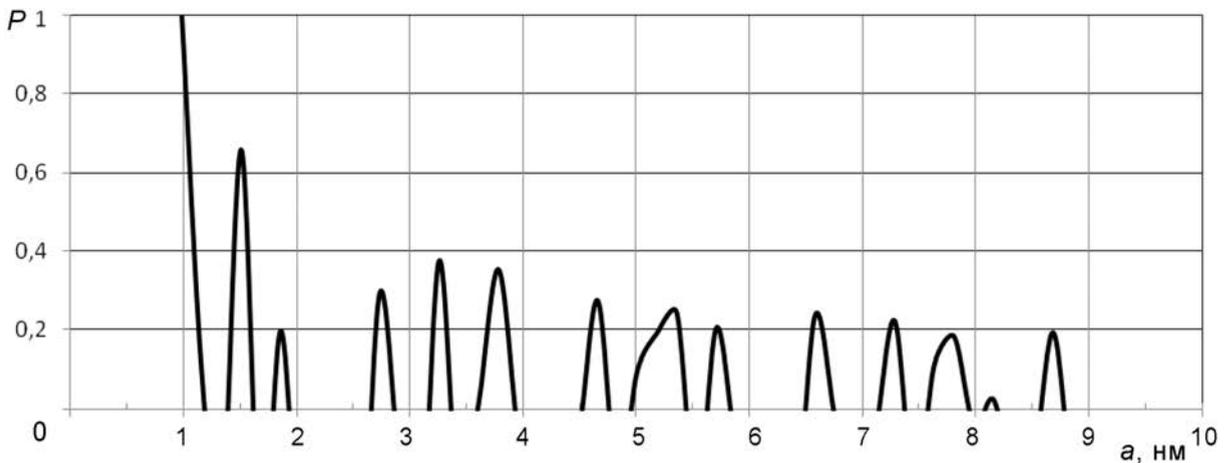


Рис. 1. Относительная плотность распределения наночастиц свинца по размерам в УВ внутри образца при $T = 300$ К (шаг расчетов равен $0,175$ нм – атомный радиус [6], наибольший по величине $P(a)$ локальный максимум после зародыша соответствует размеру $1,5$ нм, расчет «оборван» на размере 10 нм)

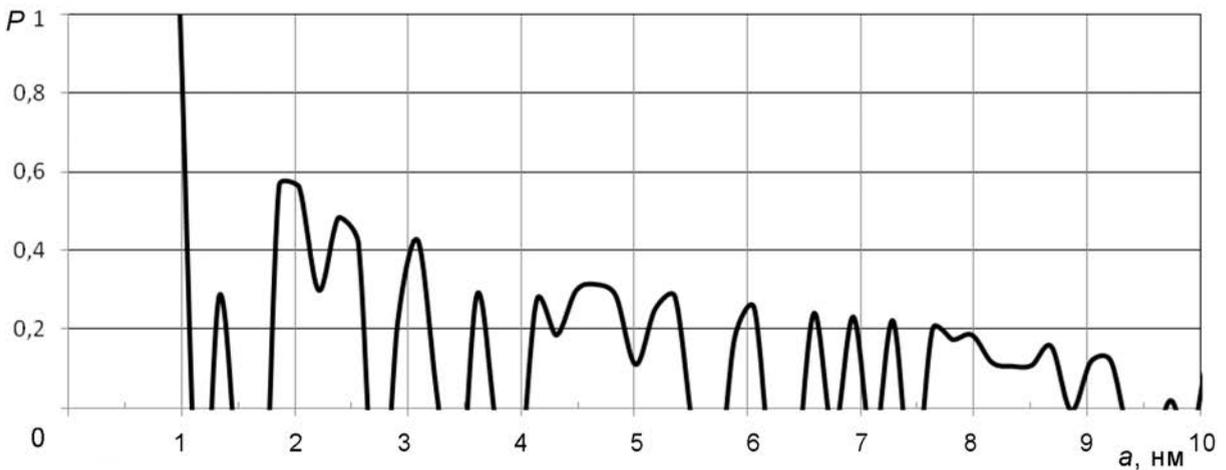


Рис. 2. Относительная плотность распределения наночастиц свинца по размерам в УВ внутри образца при $T = 500$ К (шаг расчетов равен $0,175$ нм – атомный радиус [6], наибольший по величине $P(a)$ локальный максимум после зародыша соответствует размеру 2 нм, расчет «оборван» на размере 10 нм)

Расчеты по формуле (1) показали, что в потоках выброшенных наночастиц распределения $P(a)$ приблизительно соответствуют аналогичным распределениям в УВ внутри образца. Расчеты по формулам (3), (4) дают следующие интервалы средних размеров пылевых частиц свинца при длительностях ударного процесса $t = 10^{-9} - 10^{-6}$ с и указанных выше температурах: в режиме малого потока зародышей $\langle a \rangle_{sf} = (0,010 - 0,18)$ мкм; в режиме касательных взаимодействий $\langle a \rangle_{sm} = (0,03 - 4)$ мкм. Максимально возможный размер частиц свинца, оцененный по формуле (2), составляет: $a_{\max} \approx 27$ мкм. Близкие значения характеристических размеров $\langle a \rangle_{sf}$, $\langle a \rangle_{sm}$ исследуе-

мых объектов рассчитаны для рассматриваемого актиноида. Верхняя граница $\langle a \rangle_{sm}$ и указанная величина a_{max} находятся в качественном соответствии с экспериментальными данными работ, перечисленных в [1, 2]. Следует отметить, что в совокупности со спектрами $P(a)$ полученные величины $\langle a \rangle_{sf}$, $\langle a \rangle_{sm}$ расширяют диапазон возможных размеров пылевых частиц в нанометрическую область, при этом данный кластерный подход не содержит запретов на выбросы крупных мезозерен, образовавшихся в УВ внутри образца.

Средний пространственный шаг l выбросов вдоль поверхности полированных образцов определяется средним расстоянием между дефектами кристаллической решетки. Если выбросы происходят вблизи вакансий с атомной концентрацией $\alpha = 0,01-0,02$ (1–2 % атомных вблизи температуры плавления [7]), то величину среднего шага можно оценить как $l_v \approx (\alpha n)^{-1/3} \approx (1,1-1,5)$ нм ($n \approx (3,2-3,7)10^{28} \text{ м}^{-3}$ – концентрации атомов Pb и δ -Pu). Это сравнимо с размером наночастиц, т. е. в случае сильной УВ выброс наночастиц на вакансиях происходит по всей ударно-нагруженной поверхности образца. В свинце при комнатной температуре вакансии находятся на расстоянии около 100 атомов [3]. Это означает, что в случае слабой УВ в свинце средний шаг выбросов наночастиц на вакансиях приблизительно равен 35 нм (атомный радиус Pb равен 0,175 нм [6]). При выбросах на дислокациях величина среднего шага l_d определяется поверхностной плотностью дислокаций, которая зависит от способа обработки (отжиг или деформация) и составляет полный диапазон $\eta_d = (10^{10} - 10^{16}) \text{ м}^{-2}$ [3]. Отсюда получаем: $l_d \approx 1/\sqrt{\eta_d} = (0,01-10)$ мкм. При выбросах на межзеренных границах максимальная величина шага l_{max} определяется величинами a_{max} в образце: $l_{max} = a_{max} = 140-370$ мкм.

Предложенная кластерная модель дает полный расчетный диапазон характеристических размеров исследуемых нано- и мезообъектов в процессах их образования внутри ударных волн в тяжелых металлах и при последующих выбросах частиц с поверхностей макроскопических образцов. Полученные результаты могут оказаться полезными при экспериментальных исследованиях выбросов вещества с поверхности ударно-нагруженных образцов и постопытному анализу их микроструктуры.

Список литературы

1. Buttler W. T., Williams R. J. R., Najjar F. M. Foreword to the Special Issue of Ejecta // Journal of Dynamic Behavior of Materials. 2017. Vol. 3. Issue 2. P. 141–145.
2. Лин Э. Э., Михайлов А. Л., Хворостин В. Н. Твердофазный механизм ударно-волнового образования пылевых частиц тяжелых металлов // Письма в журнал технической физики. 2016. Т. 42. Вып. 15. С. 67–71.
3. Хеккер З. С. Плутоний – от атомов к микроструктуре // Плутоний. Фундаментальные проблемы. В 2-х томах / Пер. с английского под ред. Б. А. Надыкто, Л. Ф. Тимофеевой. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003. С. 495.

4. Слядников Е. Е. Двухуровневая квантовая система в деформированном кристалле // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6, № 3. С. 23–28.
5. Lin E. E. Asymptotic Models for Studying Kinetics of Formation of Compact Objects with Strong Internal Bonds // World Journal of Mechanics. 2014. Vol. 4. N 6. P. 170–194.
6. Егоров А. М. Свинец: Физический энциклопедический словарь. Т. 4 / Под ред. Б. А. Введенского, Б. М. Вула. М.: Советская энциклопедия, 1965. С. 493.
7. Шефтель Н. Н. Вакансии: Физический энциклопедический словарь. Т. 1 / Под ред. Б. А. Введенского, Б. М. Вула. М.: Советская энциклопедия, 1960. С. 219.

Cluster Model of Formation of Nanoparticles and Mesoobjects in Shock Waves in Heavy Metals and at Emissions from Their Surface

E. E. Lin

Using the cluster model, we have calculated the most probable, average and maximum sizes of nanoparticles and meso-objects formed in the processes of shock-induced restructuring of the microstructure of heavy metals and during subsequent emissions of particles from the surface of macroscopic samples near the crystal lattice defects. The proposed model relates to the full range of characteristic sizes of the studied nano- and meso-objects from $\approx 1\text{nm}$ to $\approx 370\ \mu\text{m}$.

УДК 539.14

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_64

Электронный вакуумный заряд для сверхкритического ядра

С. Ф. Гаранин, Е. М. Кравец

Решается уравнение Дирака с учетом конечных размеров ядра. В этом случае решение уравнения Дирака можно построить для любой, положительной или отрицательной, энергии. Рассматривались ядра с различными зарядами Z , как $Z < Z_c$, так и $Z > Z_c$, где $Z = Z_c$ – «критическое» значение заряда, при котором энергия нижнего дискретного уровня доходит до границы нижнего континуума $\varepsilon = -mc^2$. Определена поляризация вакуума и найден вакуумный заряд для нескольких значений Z . Найдено, что для докритического заряда ядра $Z < Z_c$ полный заряд вакуума равен нулю, а для $Z > Z_c$ вакуум перестраивается и полный заряд вакуума становится равным $-2e$. Получено распределение вакуумного заряда для $j=1/2$ как для докритических, так и для сверхкритических ядер.

Введение

Как известно [1], уравнение Дирака с чисто кулоновым полем и точечным ядром можно рассматривать лишь при $Z\alpha < 1$ (Z – заряд ядра, $\alpha = e^2/\hbar c \cong 1/137,04$ – постоянная тонкой структуры), т. е. $Z < 137$. Учет конечных размеров ядра [2] снимает эту трудность, потенциал становится конечным на малых расстояниях и решение уравнения Дирака можно построить для любой, положительной или отрицательной, энергии. Однако, с возрастанием Z энергия нижнего дискретного уровня уменьшается и при некотором «критическом» значении заряда $Z = Z_c$ доходит до границы нижнего континуума $\varepsilon = -1^*$.

© Physics Letters. 2019. A 383. P. 27–34.

* Мы будем пользоваться системой единиц $\hbar = c = m = 1$, где m – масса электрона. Значениям $\varepsilon \geq 1$ соответствует верхний континуум решений уравнения Дирака, $-1 < \varepsilon < 1$ – дискретный спектр, а $\varepsilon \leq -1$ – нижний континуум.

При $Z > Z_c$ первый дискретный уровень исчезает из спектра и, как показано в работе [3], вакуум перестраивается – ему соответствует состояние с зарядом $-2e$. При этом для близких к критическому зарядов ядра $Z - Z_c \ll Z_c$ у отрицательных энергий при $-1 < \varepsilon < -1$ имеется квазидискретный уровень и распределение заряда $-2e$ в пространстве близко к распределению электронной плотности для этого квазидискретного уровня (а также с несколько меньшей точностью близко к распределению заряда в K -оболочке для $Z = Z_c$), на котором согласно принципу Паули могут находиться два электрона. Если создавать ядро с $Z > Z_c$, сталкивая два тяжелых ядра достаточно медленно, т. е. с нерелятивистской скоростью, то переход в состояние с заряженным вакуумом будет осуществляться в результате рождения двух электрон-позитронных пар, позитроны уходят на бесконечность, а электроны распределяются вблизи ядра, образуя новое вакуумное состояние.

Вопросы заряженного вакуума рассматривались не только в многочисленных работах, цитируемых в [3], но и в последующих работах, цитируемых в [4], с использованием в т. ч. и квазиклассического статистического подхода (релятивистского уравнения Томаса–Ферми), и в многочисленных работах, цитируемых в [5], в т. ч. рассматривающих и постановку экспериментов для регистрации возникающих при образовании сверхкритических ядер позитронов. Задачей о рождении пар занимались также специалисты по математической физике, которые получили строгие результаты [6, 7] в вопросе об их существовании в зависящем от времени внешнем поле. Этот вопрос сохраняет актуальность и в настоящее время (см., например, работу [8]).

Однако, существующая в литературе определенная идеологическая ясность в последнее время начала в некоторых работах подвергаться сомнениям. Так, в работе [9] точка зрения об образовании заряженного вакуума для сверхкритических ядер была признана неправомерной, поскольку, по мнению авторов, «рождение электрон-позитронных пар из вакуума сверхкритическим кулоновским полем невозможно: электрон такой пары не может оккупировать уже занятое состояние в море Дирака». Далее, в работе [10], посвященной энергетическому спектру электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра, высказывается мнение, что одночастичная релятивистская квантовая механика с гамильтонианом Дирака неудовлетворительна с физической точки зрения ввиду неограниченности энергетического спектра электронов снизу.

В то же время, поскольку для конечных потенциалов решение уравнения Дирака строится для любой энергии, можно определить поляризацию вакуума и найти вакуумный заряд для любого, в т. ч. и сверхкритического, ядра, используя формулу [11]:

$$\rho = \frac{e}{2} \left\{ \sum_{(+)} |\Psi_{\kappa, \varepsilon}(r)|^2 - \sum_{(-)} |\Psi_{\kappa, \varepsilon}(r)|^2 \right\}, \quad (1)$$

где $\kappa = \mp(j+1/2)$ для $j = l \pm 1/2$, (+) означает сумму по состояниям дискретного спектра $-1 < \varepsilon < 1$ и интеграл по верхнему континууму $\varepsilon \geq 1$, а (-) – интеграл по нижнему континууму $\varepsilon \leq -1$. Формула (1) является исходной при приближенном, при $Z - Z_c \ll Z_c$, описании K -оболочки сверхкритического ядра, а также для приближенных расчетов (с учетом части спектра энергий), не основанных на использовании параметров малости, распределения заряда в K - и L -оболочках для атомов с большими Z [5]. Можно, однако, используя формулу (1) для всего спектра энергий, провести расчет поляризации вакуума точно для фиксированного значения κ и убедиться, что для докритического заряда ядра $Z < Z_c$ полный заряд вакуума равняется нулю,

а для $Z > Z_c$ он равен $-2e$. При этом одновременно будет получено распределение вакуумного заряда для сверхкритического ядра. Такой подход должен быть справедливым для любого заряда Z и не содержит параметров малости, таких как α . Учет поправок, связанных с α , можно производить, используя это нулевое приближение. Такую программу мы проведем в настоящей работе.

Этот подход, насколько нам известно, ранее не исследовался. Стандартным для квантово-электродинамических (QED) задач является использование теории возмущений с использованием параметра малости $Z\alpha$ (см., например, [12], где расчет поляризации вакуума произведен с точностью до третьего порядка). Однако, такой подход, к сожалению, нельзя использовать для определения вакуумного заряда в сверхкритических полях, где происходит перестроение спектра энергий и необходим выход за рамки теории возмущений. В другом подходе для исследования поляризации вакуума для сверхкритического заряда [5, 13] для расчета плотности вакуумного заряда разность между (1) и соответствующим выражением для докритической плотности интегрируется по энергии вблизи резонанса, соответствующего квазидискретному уровню, «ныряющему» в нижний континуум. Это, вероятно, приближенно правильно на малых расстояниях, однако и там точность остается неопределенной, если ширина квазидискретного уровня не мала. На больших же расстояниях, скорее всего, плотность должна осциллировать, а интеграл от нее – расходиться. Поэтому остается вопрос о полном заряде в сверхкритическом потенциале, тем более что рассматривается не весь спектр энергий. Поэтому у некоторых авторов [6] появляются сомнения в рождении пар в сверхкритическом поле. Представляется, что прямое интегрирование точного выражения (1) по всему спектру уровней поможет снять эти вопросы и уточнить результаты расчетов вакуумного заряда. Численное интегрирование уравнений Дирака можно проводить для любых конечных (а не только кулоновских) потенциалов, и потому этот подход можно использовать для других задач (например, можно учесть влияние вакуумного заряда на само его распределение, т. е. решать задачу с учетом самосогласования).

Радиальные уравнения

Радиальные функции уравнения Дирака с центрально-симметричным потенциалом $U(r)$ удовлетворяют системе уравнений [1]

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dr} + \frac{\kappa}{r}F - (\varepsilon + 1 - U)G &= 0, \\ \frac{dG}{dr} - \frac{\kappa}{r}G + (\varepsilon - 1 - U)F &= 0. \end{aligned} \tag{2}$$

Для конечных потенциалов функции F и G обращаются в нуль при $r = 0$. В численных расчетах для выхода из особой точки $r = 0$ использовалось разложение по степеням r . Коэффициенты разложения были получены, подставляя это разложение в (2) и учитывая, что $U(r \rightarrow 0) \equiv U_0 = \text{const}$.

На больших расстояниях волновые функции дискретного спектра экспоненциально затухают и должны быть нормированы условием: $\int |\psi|^2 dV = 1$; для функций F и G это означает

$$\int_0^{\infty} (F^2 + G^2) dr = 1. \quad (3)$$

Для удобства численных расчетов будем считать, что на больших расстояниях потенциал $U(r)$ зануляется (для достаточно больших радиусов зануление потенциала не должно привести к большим ошибкам в определении вакуумного заряда). Тогда можно считать, что волновые функции на больших расстояниях ведут себя как волновые функции свободного движения, чем можно воспользоваться для определения нормировочного множителя. Условия для определения нормировочного множителя для $|k|=1$ получаются следующим образом.

При $U(r) \equiv 0$ решение системы уравнений (2) имеет вид

$$\begin{aligned} F(r) &= \sqrt{\frac{pr}{2}} \sqrt{\frac{\varepsilon+1}{\varepsilon}} J_{\left|k+\frac{1}{2}\right|}(pr), \\ G(r) &= \text{sign}(\kappa) \sqrt{\frac{pr}{2}} \sqrt{\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon}} J_{\left|k-\frac{1}{2}\right|}(pr), \end{aligned} \quad (4)$$

где $p = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$. Волновые функции непрерывного спектра считаем нормированными на δ -функцию по импульсам

$$\int \psi_p^* \psi_{p'} dV = \delta(p - p'). \quad (5)$$

Решение системы (2) на больших расстояниях для произвольного потенциала отличается от (4) только фазовыми сдвигами δ_κ , значения которых определяются видом поля на близких расстояниях [1]. В численных расчетах определить значения этих сдвигов с достаточной точностью затруднительно, поэтому для нормировки F и G необходимо использовать выражение, не содержащее δ_κ .

Функции F и G выражаются, согласно (4), через функции Бесселя с положительными индексами (через $J_{\frac{1}{2}}$ и $J_{\frac{3}{2}}$ в случае $|k|=1$). С помощью рекуррентного соотношения для цилиндрических функций: $zJ_{p-1}(z) + zJ_{p+1}(z) = 2pJ_p(z)$, выразим функции Бесселя с отрицательными индексами $J_{-\frac{1}{2}}$ и $J_{-\frac{3}{2}}$ через функции Бесселя с положительными индексами $J_{\frac{1}{2}}$ и $J_{\frac{3}{2}}$. Затем, выражая функции Бесселя $J_{\frac{1}{2}}$ и $J_{\frac{3}{2}}$ через F и G , с помощью соотношения [14], справедливого для

функций Бесселя с полуцелыми индексами: $J_{\kappa-\frac{1}{2}}(z) J_{-\kappa-\frac{1}{2}}(z) + J_{\kappa+\frac{1}{2}}(z) J_{-\kappa+\frac{1}{2}}(z) = (-1)^\kappa \frac{2}{\pi z}$,

получим, что на больших расстояниях функции F и G должны удовлетворять соотношениям

$$(\varepsilon - 1) \left(1 + \frac{1}{(pr)^2} \right) F^2 + \frac{2}{r} FG + (\varepsilon + 1) G^2 = \frac{p^2}{\pi\varepsilon} \text{ при } \kappa = -1,$$

$$(\varepsilon + 1) \left(1 + \frac{1}{(pr)^2} \right) G^2 - \frac{2}{r} FG + (\varepsilon - 1) F^2 = \frac{p^2}{\pi\varepsilon} \text{ при } \kappa = 1.$$

При возрастании энергии увеличивается частота осцилляций функций F и G согласно (4), поэтому вычисление этих функций на больших расстояниях становится затруднительным. Для определения нормировочного множителя при $|\varepsilon| \gg 1$ можно воспользоваться тем, что в этом случае плотность заряда**

$$\rho_{\kappa, \varepsilon}(r) \equiv |\psi_{\kappa, \varepsilon}(r)|^{2**} = \frac{1}{r^2} (F^2 + G^2), \quad (6)$$

усредненная по осцилляциям, становится равной квазиклассическому значению (11) (см. следующий раздел) на расстояниях, гораздо меньших радиуса зачуждения потенциала.

Для удобства расчетов плотность заряда в непрерывном спектре для данного ε находилась одновременно для электрона и позитрона, т. е. вычислялась величина

$$\tilde{\rho}_{\kappa, \varepsilon}(r) = |\psi_{\kappa, \varepsilon}(r)|^2 - |\psi_{\kappa, -\varepsilon}(r)|^2. \quad (7)$$

При заданной энергии ε в отсутствие внешнего поля (при $U(r) \equiv 0$) удобнее проводить вычисления, когда плотность заряда равна нулю для любых значений энергии электрона, однако при решении системы (2) при заданном κ и последующем вычислении (7) это не выполняется. Из-за симметрии системы (2) при $U(r) \equiv 0$ относительно замены $\kappa \rightarrow -\kappa$, $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$ этим свойством обладает сумма $\tilde{\rho}_{\kappa, \varepsilon}(r) + \tilde{\rho}_{-\kappa, \varepsilon}(r)$. Поэтому при решении системы (2) в непрерывном спектре для

заданного значения энергии ε вычислялась величина $R_{\kappa, \varepsilon}(r) = r^2 \left(|\psi_{|\kappa|, |\varepsilon|}(r)|^2 + |\psi_{-|\kappa|, |\varepsilon|}(r)|^2 - |\psi_{|\kappa|, -|\varepsilon|}(r)|^2 - |\psi_{-|\kappa|, -|\varepsilon|}(r)|^2 \right)$.

На рис. 1 приведен график функции $R_{\kappa, \varepsilon}(r)$ для нескольких значений энергии, показывающий характерное поведение плотности заряда в непрерывном спектре.

**² Здесь и далее плотность заряда и $|\psi_{\kappa, \varepsilon}(r)|^2$ будем считать умноженными на 4π , учитывая интегрирование по углам.

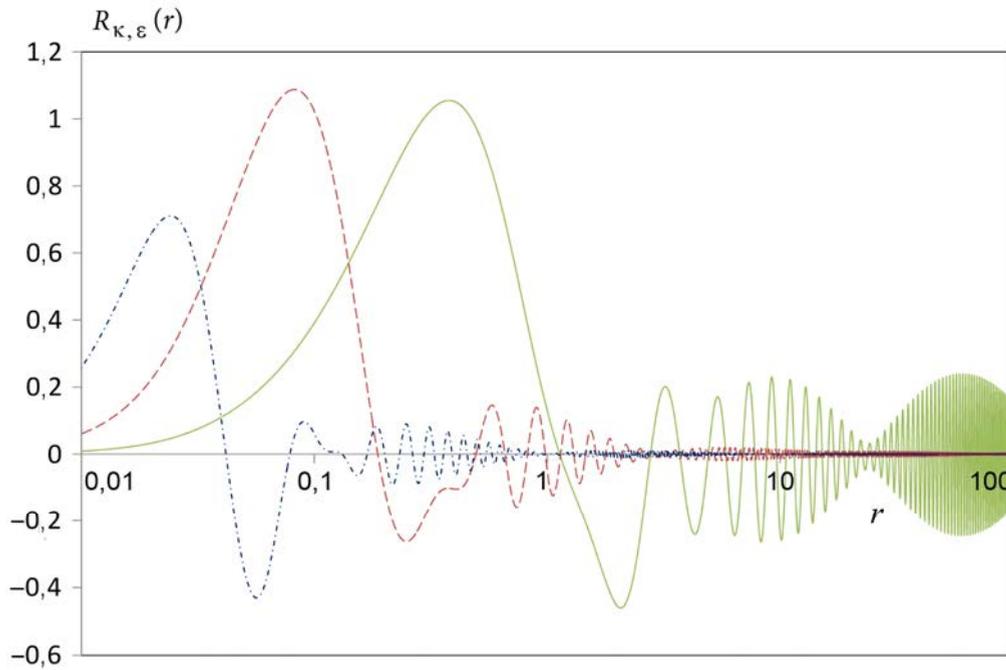


Рис. 1. Функция $R_{\kappa, \epsilon}(r)$ для $\kappa=1$ и нескольких значений энергии, $Z=100$: — $\epsilon=2$,
 - - - $\epsilon=10$, - · - · $\epsilon=50$

Рис. 1 показывает, что функция $R_{\kappa, \epsilon}(r)$ в области $r > 0,1$ имеет осциллирующее поведение, в котором частота осцилляций зависит от энергии ϵ . При интегрировании по непрерывному спектру по формуле (1) эти высокочастотные осцилляции исчезают и в результате получается функция (рис. 2, и раздел «Вычислительная методика»)

$$r^2 \rho^C(r) = \sum_{\epsilon > 1} R_{\kappa, \epsilon}(r), \quad (8)$$

имеющая лишь небольшие затухающие колебания в области $r > 0,1$. Аналогичные колебания имеет функция

$$r^2 \rho^D(r) = \sum_{-1 < \epsilon < 1} r^2 \left(\left| \Psi_{|\kappa|, \epsilon}(r) \right|^2 + \left| \Psi_{-|\kappa|, \epsilon}(r) \right|^2 \right), \quad (9)$$

найденная при суммировании по дискретному спектру, и связаны эти колебания с поведением волновых функций дискретного спектра. После суммирования (8) и (9) эти особенности взаимно компенсируются и получается гладкая монотонная функция $r^2 \rho(r) = r^2 (\rho^D(r) + \rho^C(r))$ (остаются лишь высокочастотные колебания на малых радиусах, связанные с обрезанием интегрирования в численном расчете, см. раздел «Вычислительная методика»).

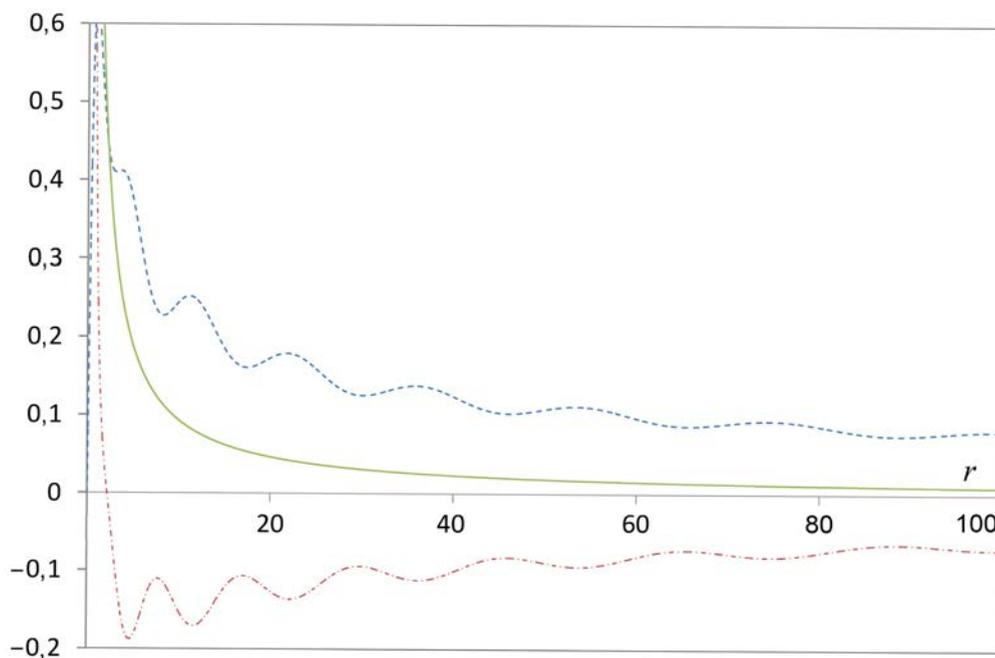


Рис. 2. Функции $r^2 \rho^D(r)$ – (1), $r^2 \rho^C(r)$ – (2), $r^2 \rho(r)$ – (3) для $Z = 100$: --- – 1, - - - – 2, — – 3

Квазиклассическое решение радиального уравнения

Рассмотрим поведение решений радиального уравнения при больших волновых числах, т. е. когда можно считать, что функции F и G ведут себя как $\exp(\pm i \int k(r) dr)$, а характерные длины волн $1/p$ малы по сравнению с характерными размерами задачи (квазиклассическое приближение). Тогда система уравнений (2) запишется в виде (здесь в методических целях мы сохраним единицу m для массы электрона)

$$\pm ikF + \frac{\kappa}{r}F - (\varepsilon + m - U)G = 0,$$

$$\pm ikG - \frac{\kappa}{r}G + (\varepsilon - m - U)F = 0$$

и из него будет следовать дисперсионное соотношение

$$(\varepsilon - U)^2 = k^2 + m^2 + \frac{\kappa^2}{r^2}. \quad (10)$$

Уравнение (10) показывает, что эффективная масса электронов при одномерном движении с фиксированным κ равна $m\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{m^2 r^2}}$ и растет с уменьшением радиуса. Это означает, что

на малых радиусах размытие волнового пакета электрона становится меньше и электрон можно локализовать не с точностью до комптоновской длины волны, а с точностью до некоторой доли радиуса $\sim r/\kappa$.

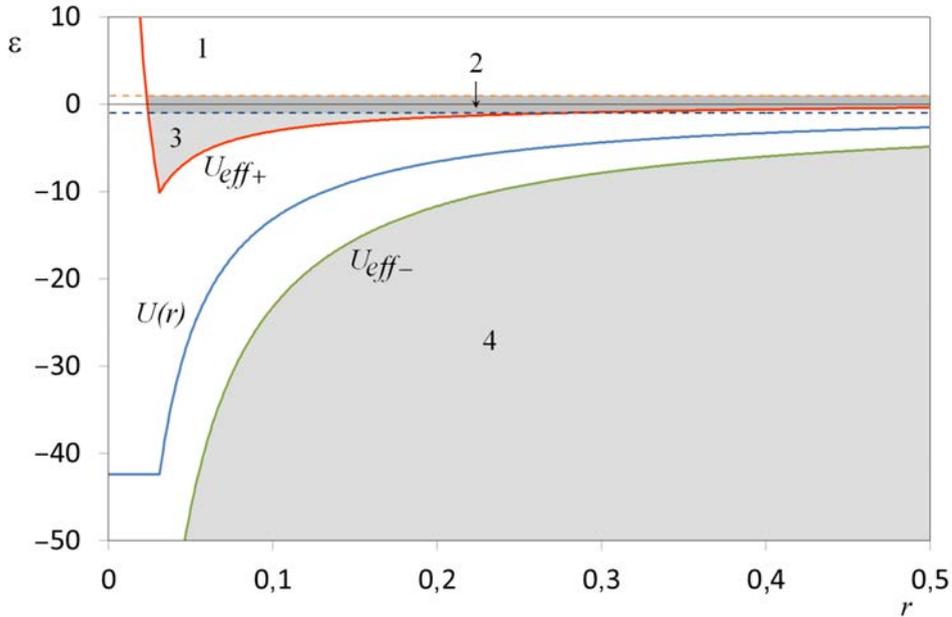


Рис. 3. Квазиклассически разрешенные области движения электронов при $\kappa=1$, $Z=180$: 1 – область верхнего континуума, 2 – дискретный спектр, 3 и 4 – области нижнего континуума

На рис. 3 изображен график эффективной потенциальной энергии: $U_{eff\pm}(r) = U(r) \pm \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}}$

для $\kappa=1$ и потенциала $U(r)$, представляющего собой «обрезанный» кулоновский потенциал

$$U(r) = -Z\alpha \begin{cases} r_0^{-1}, & r < r_0 \\ r^{-1}, & r > r_0, \end{cases}$$

для $r_0=0,031(\approx 12\Phi)$ и $Z=180$, что в этом случае несколько превышает Z_c (см. раздел «Вычислительная методика»). Выше энергий

$$\max \begin{cases} U(r) + \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}} \\ -1 \end{cases}$$

располагается квазиклассически разрешенная область движения электронов, состоящая из дискретного (при $\varepsilon < 1$) спектра и области верхнего континуума (при $\varepsilon > 1$). Квазиклассически же разрешенная область нижнего континуума (заштрихованная светло-серым цветом на рис. 3)

состоит из двух доменов: области энергий $U(r) + \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}} < \varepsilon < -1$, появляющейся при $Z > 141.3$,

и области $\varepsilon < U(r) - \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}}$, между которыми располагается классически запрещенная область,

соответствующая потенциальному барьеру для движения электронов между ними. Наличие этого барьера приводит к тому, что уровни в первом домене являются квазидискретными, с шириной, экспоненциально обращающейся в нуль на пороге (при $\varepsilon = -1$) [3]. Отметим, что квазиклассические условия квантования позволяют довольно точно определять положение этих уровней. Так, даже для первого уровня в этом домене условие его появления, определенное по правилам квантования Бора–Зоммерфельда: $\int k dr = \frac{\pi}{2}$, дает для $r_0 = 0,031$ величину $Z_c = 181,42$, с хорошей точностью совпадающую с точным значением $Z_c = 177,46$ (см. следующий раздел).

Квазиклассическое пространственное распределение вероятности нахождения электрона будет пропорционально $\frac{1}{v} = \frac{dk}{d\varepsilon}$, что с учетом (10) и нормировки (5) дает

$$\rho_{\kappa, \varepsilon}^{QCl} = \frac{p}{\pi \varepsilon r^2} \frac{\varepsilon - U(r)}{\sqrt{(\varepsilon - U(r))^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}}}. \quad (11)$$

Коэффициент в (11) был получен при сравнении выражения $\frac{dk}{d\varepsilon}$ и усредненной по осцилляциям формулы (6) при $r \rightarrow \infty$ с учетом того, что в этом случае $U(r) \rightarrow 0$ и функции F и G из (6) удовлетворяют (4) с точностью до фазового сдвига δ_κ .

Вычислим, используя (11), квазиклассическую плотность распределения зарядов в поле $U(r)$. Для этого, в соответствии с (1), надо проинтегрировать (11) по положительным энергиям и вычесть интеграл по отрицательным энергиям. Тогда плотность распределения зарядов (без учета множителя $e/2$) будет равна

$$\begin{aligned} \rho^{QCl} r^2 &= \int_{\sqrt{\varepsilon_1^2 - 1}}^{\sqrt{\varepsilon_2^2 - 1}} dp \left(2\rho_{\kappa, \varepsilon}^{QCl} r^2 - 2\rho_{\kappa, -\varepsilon}^{QCl} r^2 \right) = \int_{\sqrt{\varepsilon_1^2 - 1}}^{\sqrt{\varepsilon_2^2 - 1}} dp \frac{2\sqrt{\varepsilon^2 - 1}}{\pi \varepsilon} \left(\frac{\varepsilon - U}{\sqrt{(\varepsilon - U)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}}} - \frac{\varepsilon + U}{\sqrt{(\varepsilon + U)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}}} \right) = \\ &= \frac{2}{\pi} \left(\sqrt{(\varepsilon - U)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}} - \sqrt{(\varepsilon + U)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}} \right) \Bigg|_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2}, \end{aligned}$$

где ε_1 и ε_2 – пределы интегрирования по энергии (здесь для некоторой общности не конкретизируем пределы интегрирования).

Если взять интеграл по всей возможной области энергий (так что ε_1 будет определяться обращением в нуль соответствующего радикала, а $\varepsilon_2 = \infty$), получим

$$\rho^{QCl} r^2 = -\frac{4}{\pi} U. \quad (12)$$

При вычислении $r^2 \rho^{QCl}(r)$ здесь область нижнего континуума (3) на рис. 3 (если таковая появляется при больших Z) мы относили к верхнему континууму. Эффект перехода электронов из дискретного спектра в нижний континуум при увеличении заряда ядра будем далее учитывать точно. Формула же (12) показывает, что даже при постоянной величине потенциала буквальное применение выражения (1) будет приводить к объемному вакуумному заряду. Очевидно, однако, что наличие постоянного во всем пространстве потенциала не должно приводить к объемно-заряженному вакууму.

Фактически, конечно, вакуум будет перестраиваться так, чтобы изменение потенциала на постоянную величину не приводило к объемному заряду (12), что можно обеспечить перестроением части спектра электронов при больших ε и k . Таким образом, при рассмотрении вакуумного заряда для фиксированного значения k из выражения (1) следует вычесть величину (12), так что ρ_{vac} будет определяться

$$\rho_{vac}(r) = \rho - \rho^{QCl} = e \left\{ \sum_{(+)} |\Psi_{k, \varepsilon}(r)|^2 - \sum_{(-)} |\Psi_{k, \varepsilon}(r)|^2 + \frac{4}{\pi} \frac{U}{r^2} \right\} \quad (13)$$

(мы учли множитель 2 из-за двукратного вырождения по проекции момента при $|k|=1$, соответственно сумма в (13) не содержит суммирования по этим проекциям). Таким образом, предполагаем, что вычитание (12) из (1) осуществляет своеобразную перенормировку заряда. В стандартной QED процедуре перенормировки [1], когда потенциал $U(r)$ является чисто кулоновским,

это условие является условием, налагаемым на поляризационный оператор $P(k^2): \frac{P(k^2)}{k^2} \rightarrow 0$

при $k^2 \rightarrow 0$. Наши расчеты далее покажут, что формула (13) обеспечивает нулевой заряд вакуума для любого несверхкритического потенциала и это можно рассматривать как условие «полноты» системы функций в одномерной задаче.

Если рассматривать трехмерную задачу, то, используя квазиклассическое приближение, можно увидеть, что буквальное применение формулы (1) будет приводить к расходимостям при больших энергиях, так что формулу (1) в этом случае также следует исправить, вычитая соответствующие квазиклассические выражения.

Вычислительная методика

При численном расчете системы (2) мы стартовали из точки $r = 0,0001$ с помощью разложения F и G по степеням и интегрировали уравнения методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Шаг сетки по радиусу был равен $h_r = 10^{-5}$ при $r < r_0$ и $h_r = 5 \cdot 10^{-5}$ при $r > r_0$. Энергии дискретного спектра, по которым проводится суммирование в (9), находились из условия затухания вол-

новой функции на больших расстояниях, а нормировочный коэффициент определялся из условия (3). При интегрировании по непрерывному спектру ($|\varepsilon| > 1$) мы интегрировали по импульсам и шаг по импульсам выбирался так, чтобы обеспечить сходимость выражения (8) с учетом корневой особенности при $\varepsilon \rightarrow 1$. При $1 < \varepsilon < 20$ этот шаг брался равным $h_p = 0,001$, при $20 < \varepsilon < 100$ $h_p = 0,005$, при $100 < \varepsilon < 2000$ $h_p = 0,01$. Интегрирование по энергиям в формулах (13) обрезалось при $|\varepsilon| = 2000$, поскольку вклад от энергий $|\varepsilon| > 2000$ в полный вакуумный заряд, вычисляемый с помощью (11) по формуле: $Q_{\text{vac}} = \int \rho_{\text{vac}}(r) r^2 dr$, становится сравнимым с погрешностью вычислений. Достижение достаточной точности контролировалось как сходимостью результатов при дроблении сеток, так и получением гладкого монотонного поведения функции $\rho(r)$ на рис. 2. Таким образом находилась функция $\rho(r)$ при $Z < Z_c$. Интегральную точность наших расчетов для определения полного вакуумного заряда можно оценить как $\sim 10^{-4}$.

При превышении критического значения заряда ядра в спектре появляется квазидискретный уровень, обусловленный погружением основного уровня дискретного спектра ε_0 в область нижнего континуума. В результате при энергиях, близких к ε_0 , у плотности $\rho_{\kappa,\varepsilon}(r)$ на радиусах $r \sim 0,1$ появляется резкий минимум, приводящий в итоге к тому, что полный вакуумный заряд Q_{vac} становится равным $-2e$. Характерная ширина по ε этого уровня γ зависит от Z по закону $\gamma \sim \exp\left(-\text{const} \sqrt{\frac{Z_c}{Z - Z_c}}\right)$ [3], т. е. она очень мала для Z , не сильно превышающих Z_c (для ядер $Z = 180$ и $Z = 190$ она оказывается равной $4 \cdot 10^{-6}$ и $5 \cdot 10^{-4}$ соответственно). Таким образом, используемая при $Z < Z_c$ сетка энергий не обеспечивает подробное описание зависимости $\rho_{\kappa,\varepsilon}(r)$, необходимое для вычисления Q_{vac} с достаточной точностью. Поэтому для сверхкритических ядер сетка по энергии сильно дробилась при $\varepsilon \sim \varepsilon_0$ до величин порядка $\sim 0,01\gamma$, добиваясь сходимости по полному заряду Q_{vac} с точностью $\sim 10^{-4}$.

Результаты расчетов для ядер с различными Z

Докритические ядра с зарядами $Z = 100$ и 175

Рассмотрим результаты расчетов для ядра с зарядом $Z = 100$, заметно меньшим Z_c . Основной уровень дискретного спектра ($\kappa = -1, n_r = 0$) в этом случае $\varepsilon_0 = 0,6860$. На рис. 4 показаны графики плотностей $r^2 \rho^D(r)$ и $r^2 \rho^C(r)$ (8, 9), соответствующие дискретному и непрерывному спектрам, суммарной плотности заряда $r^2 \rho(r)$ и величины $r^2 \rho^{QCl}(r)$ (12).

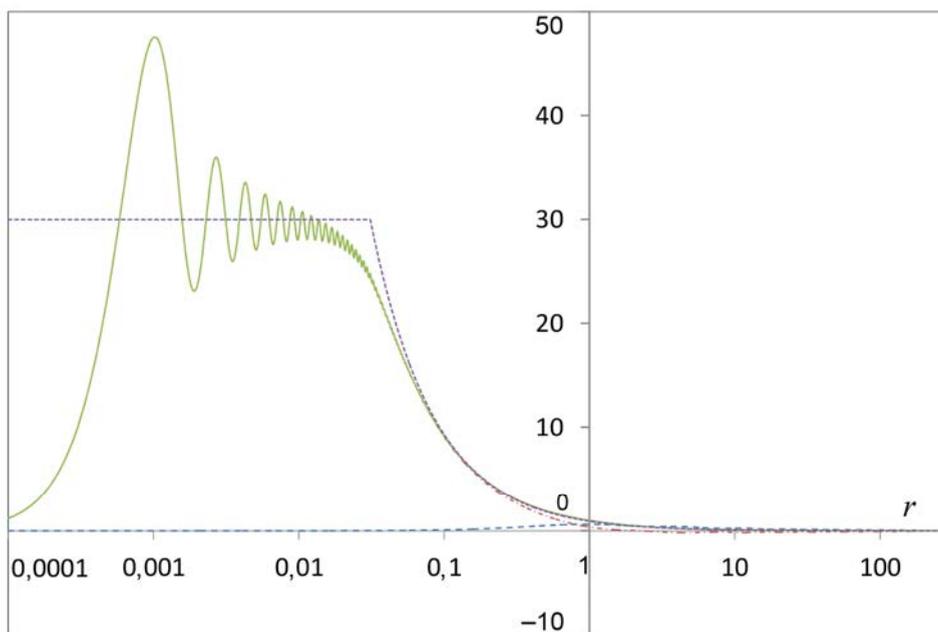


Рис. 4. Величины, полученные для ядра с $Z = 100$: 1 – $r^2 \rho^D(r)$, 2 – $r^2 \rho^C(r)$, 3 – $r^2 \rho(r)$, 4 – $r^2 \rho^{QCl}(r)$:
 --- - 1, - 2, ——— - 3, - - - - 4

Из рис. 4 видно, что для ядра с $Z = 100$ основной вклад в суммарную плотность заряда вносит непрерывный спектр. При $r > 0,1$ плотность заряда $\rho(r)$ хорошо совпадает с $\rho^{QCl}(r)$. При малых радиусах $r < 0,01$ функция осциллирует вокруг квазиклассического значения $-\frac{4}{\pi}U_0$. Осцилляции плотности при малых радиусах связаны с тем, что интегрирование по энергиям в формуле (8) обрезалось на уровне $|\varepsilon| = 2000$.

Распределение величины $\rho_{vac}(r)/\rho^{QCl}(r)$ представлено на рис. 5. Несмотря на то что плотность заряда $\rho(r)$ в области $r \sim r_0 = 0,031$ заметно меньше квазиклассической величины $\rho^{QCl}(r)$, полный вакуумный заряд при $Z = 100$ получается равным $Q_{vac} = 2,26 \cdot 10^{-5}e$ и оказывается порядка погрешности вычислений. Таким образом, можно сказать, что наши вычисления подтвердили, что для $|k|=1$ для докритического ядра $Z < Z_c$ полный заряд вакуума равен нулю.

Если сравнить точное распределение $r^2 \rho(r)$ и квазиклассическое $r^2 \rho^{QCl}(r)$, пропорциональное потенциалу, то, отвлекаясь от осцилляций $r^2 \rho(r)$, связанных с численной неточностью и обусловленных обрезанием интегрирования на $|\varepsilon| = 2000$, можно увидеть, что квантово-механическое распределение $r^2 \rho(r)$ как бы размывает квазиклассическое $r^2 \rho^{QCl}(r)$, причем размывание на малых радиусах оказывается порядка r , а на больших расстояниях – порядка 1. Это как раз

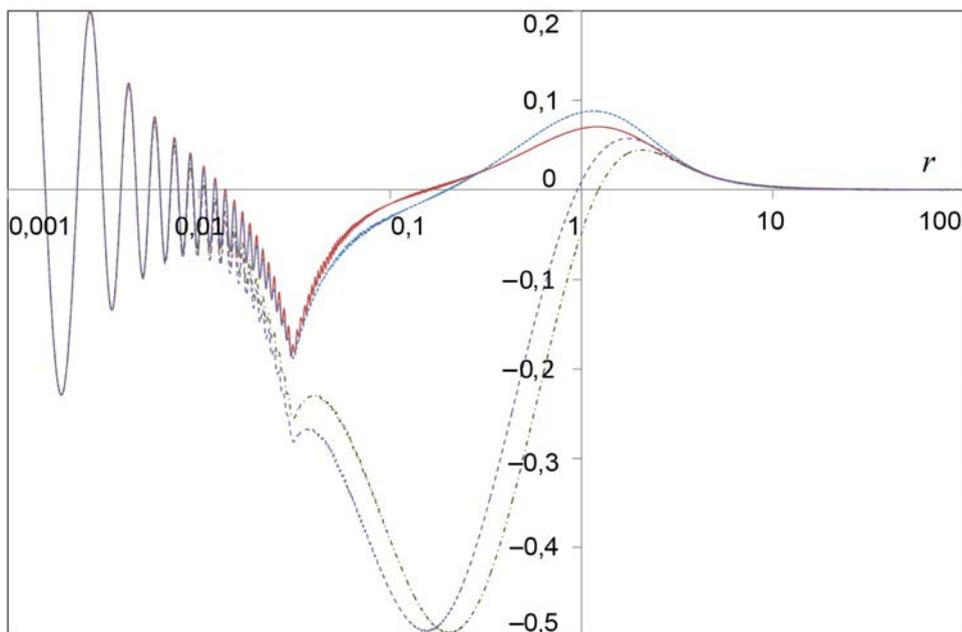


Рис. 5. Распределение величины $\rho_{vac}(r)/\rho^{QC}(r)$ для ядер с $Z = 100, 175, 180, 190$: — $Z = 100$,
 - - - $Z = 175$, - · - · $Z = 180$, - - - $Z = 190$

связано с отмечавшейся зависимостью эффективной массы электрона от радиуса $m\sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{m^2 r^2}}$.

В результате поляризации вакуума отрицательный заряд, образующийся на малых радиусах, полностью компенсируется положительным зарядом, распределенным на больших r . Величина каждого из этих зарядов для $Z = 100$ согласно рис. 5 оказывается равной $0,134e$.

Надо сказать, что распределение вакуумного заряда значительно отличается от плотности заряда в потенциале Юлинга [1]. Знак объемного заряда поляризации вакуума противоположен знаку плотности заряда в потенциале Юлинга: на малых расстояниях в нашей задаче плотность заряда отрицательна, а для потенциала Юлинга заряд на малых расстояниях положителен (и бесконечен), а на больших расстояниях наша плотность заряда положительна и убывает как $1/r^3$, тогда как для потенциала Юлинга она отрицательна и убывает экспоненциально. По-видимому, это связано с перестроением части спектра электронов при больших ϵ и κ . Следует считать, что в линейном по Z приближении сумма вкладов от всех κ дает потенциал Юлинга. Однако, можно надеяться, что нелинейные по Z вклады в поляризацию вакуума, если они будут быстро убывать на больших r , учитываются правильно и их вклады можно суммировать для разных κ .

При возрастании заряда ядра Z энергия нижнего дискретного уровня уменьшается и достигает границы нижнего континуума $\epsilon = -1$ при некотором Z_c . Значение Z_c зависит от поведения потенциала на малых расстояниях и в рассматриваемой нами модели прямоугольного обрезания получается равным $Z_c = 177,5$, что хорошо согласуется с данными работ [8, 9].

Для ядра с зарядом $Z = 175$, немного меньшего Z_c , энергия нижнего уровня дискретного спектра $\varepsilon_0 = -0,8831$. Распределение плотности $\rho(r)$, полученное для $Z = 175$, близко по форме к распределению, найденному для $Z = 100$, и отличается лишь большим вкладом дискретного спектра. Это распределение представлено на рис. 5. Полный вакуумный заряд $Q_{vac} = -1,03 \cdot 10^{-4} e$, т. е. он равен нулю в пределах погрешностей вычислений. Сравнение кривых для $Z = 100$ и $Z = 175$ на рис. 5 показывает, что в диапазоне Z от 100 до 175 поляризация вакуума примерно линейна по Z . Так, суммарный вакуумный заряд, образующийся на больших радиусах, равен $0,277e$ и примерно соответствует увеличенному в 1,75 раз заряду для $Z = 100$. Нелинейные по Z члены дают положительный вклад в величину этого заряда, и этот вклад по сравнению с линейным для $Z = 175$ можно оценить как $\sim 23\%$.

Полученная в расчетах для $Z = 100$ и $Z = 175$ точность вычислений показывает, что эти расчеты можно применить для нахождения вакуумного заряда для сверхкритических ядер $Z > Z_c$.

Сверхкритические ядра с зарядами $Z = 180$ и 190

Когда Z превышает Z_c , полный заряд вакуума должен стать равным $-2e$. Покажем это на примере ядра с $Z = 180 > Z_c$. Результаты расчетов для этого ядра представлены на рис. 6.

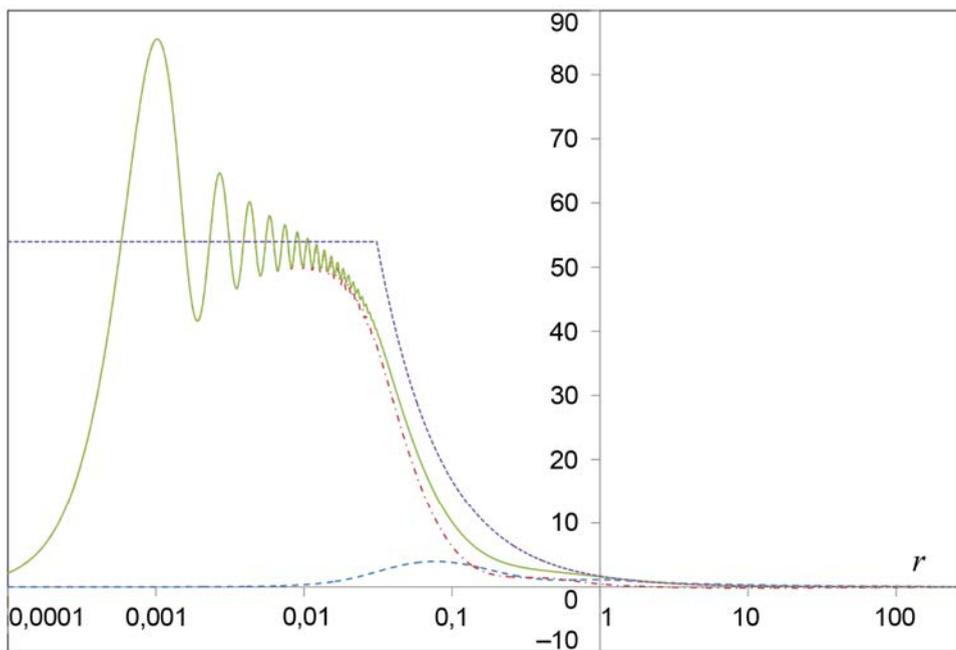


Рис. 6. Величины, полученные для ядра с $Z = 180$: 1 – $r^2 \rho^D(r)$, 2 – $r^2 \rho^C(r)$, 3 – $r^2 \rho(r)$, 4 – $r^2 \rho^{QC1}(r)$:
 --- 1, -.-.- 2, — 3, - - - 4

Рис. 6 показывает, что, в отличие от ядер с $Z = 100$ и 175 , в сверхкритическом ядре с $Z = 180$ плотность заряда на радиусах $\sim 0,1$ заметно меньше $\rho^{QCl}(r)$, приближаясь к ней лишь при $r > 1$.

Распределение вакуумного заряда представлено на рис. 5. Величина Q_{vac} получается равной $Q_{vac} = -2,0001e$. Таким образом, подтверждается точка зрения об образовании заряженного вакуума для сверхкритических ядер.

На рис. 5 приведено распределение вакуумного заряда для $Z = 190$ – ядра, для которого Z значительно превышает Z_c , но границу $\varepsilon = -1$ еще не пересек следующий дискретный уровень. Сравнение кривых для $Z = 180$ и 190 показывает, что найденные распределения качественно и даже количественно похожи. Полный вакуумный заряд для $Z = 190$, как и $Z = 180$, получается равным $Q_{vac} = -2,0001e$, т. е. он равен $-2e$ в пределах погрешностей вычислений.

При дальнейшем повышении заряда ядра Z границу $\varepsilon = -1$ будут пересекать следующие уровни: $2P_{1/2}$, $2S_{1/2}$, $3P_{1/2}$ и т. д., и при каждом пересечении вакуумный заряд будет возрастать на 2. Соответствующие вычисления можно проделать и для этих случаев (одновременно учитывая некоторую экранировку заряда ядра вакуумными электронами). Мы, однако, ограничимся здесь только первым уровнем, имея в виду принципиальную сторону вопроса.

Распределение вакуумного заряда

Для того чтобы различить линейные и нелинейные по Z вклады в плотность вакуумного заряда $\rho_{vac}(r)$ докритического ядра, представим $\rho_{vac}(r)$ в виде разложения (такая зависимость $\rho_{vac}(r)$ от Z была нами получена в результате интерполяции результатов расчетов с разными докритическими Z , в т. ч. и $Z = 50$; из-за небольшого набора данных мы имели возможность использовать только один нелинейный член)

$$\rho_{vac}(r) = Z\alpha \rho_1(r) + (Z\alpha)^5 \rho_2(r), \quad (14)$$

где $\rho_1(r)$ и $\rho_2(r)$ – универсальные функции, не зависящие от Z .

Функции $\rho_1(r)$ и $\rho_2(r)$ были найдены, используя результаты расчетов с $Z = 100$ и 175 . Полученные функции представлены на рис. 7, для удобства показа на графике представлены функции $r^3\rho_1(r)$ и $r^3\rho_2(r)$. Высокочастотные осцилляции функций связаны с неточностями расчетов, вызванными обрезанием спектра энергий в численных расчетах. У величины $r^2\rho_1(r)$ виден излом на радиусе $r_0 = 0,031$, отражающий поведение потенциала $U(r)$ в этой точке. Рисунок показывает, что нелинейный вклад в поляризацию вакуума даже для Z , близких к критическим, мал по сравнению с линейным.

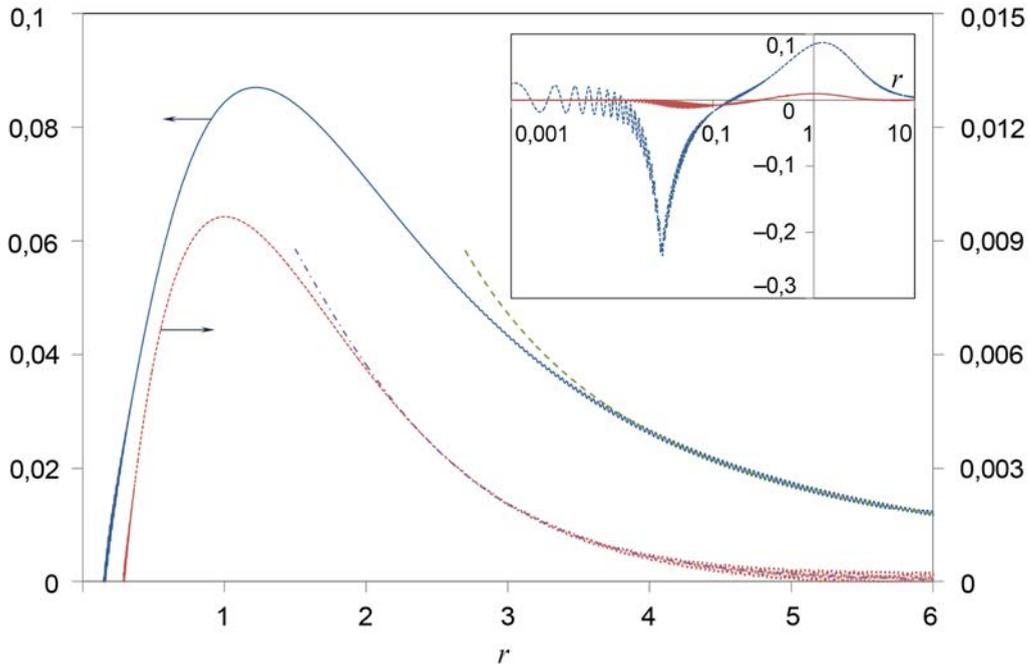


Рис. 7. Функции $r^3 \rho_1(r)$ – (1) и $r^3 \rho_2(r)$ – (2), (3) – асимптотика (15) функции $\rho_1(r)$, (4) – асимптотика (16) функции $\rho_2(r)$: — 1, - - - 2, - - - 3, - - - 4

На расстояниях $r \gg 1$ функции $r^2 \rho_1(r)$ и $r^2 \rho_2(r)$ спадают по следующим законам:

$$r^2 \rho_1(r) \sim r^{-3}, \quad (15)$$

$$r^2 \rho_2(r) \sim \exp(-ar), \quad a = 1,43. \quad (16)$$

Если нелинейный по Z вклад в поляризацию вакуума определяется правильно, то из-за противоположного знака объемному заряду потенциала Юлинга он для больших Z будет в некоторой степени компенсировать влияние этого объемного заряда.

В сверхкритическом ядре к выражению (14) добавляется слагаемое, отвечающее за дополнительный вакуумный заряд $Q_{\text{vac}} = -2e$ (назовем ее плотностью заряда вакуумной оболочки $\rho_0(r)$):

$$\rho_{\text{vac}}(r) = Z\alpha \rho_1(r) + (Z\alpha)^4 \rho_2(r) + \rho_0(r). \quad (17)$$

Плотность заряда вакуумной оболочки $r^2 \rho_0(r)$, полученная для $Z = 180$ и 190 с помощью формулы (17), представлена на рис. 8.

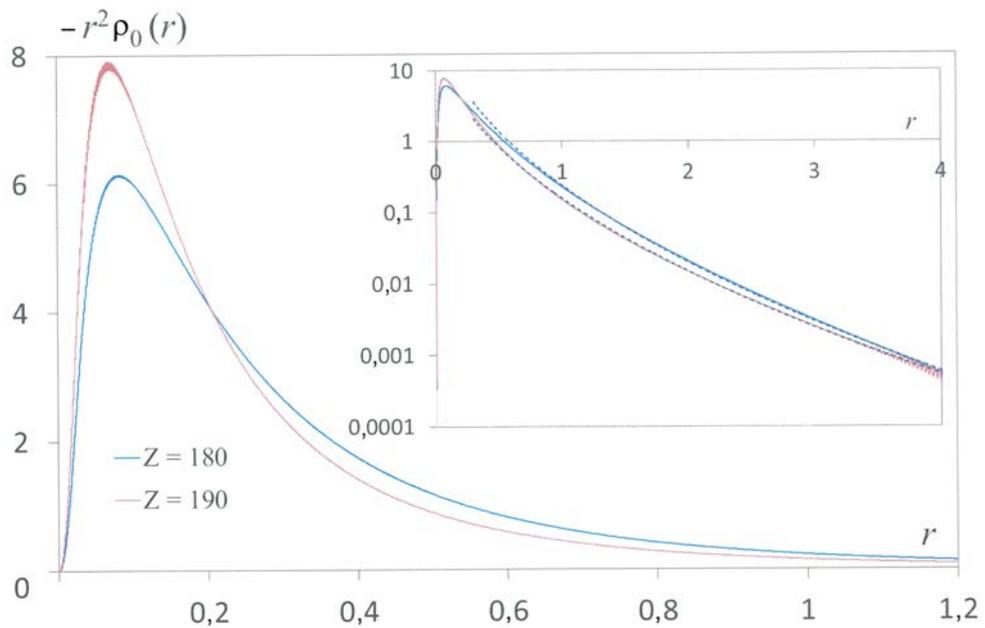


Рис. 8. Плотность заряда вакуумной оболочки $r^2\rho_0(r)$ для $Z=180$ и 190 и эта же величина на больших расстояниях. Пунктирными линиями показаны асимптотики $r^2\rho_0(r) \sim \exp(-C\sqrt{r})$

Из рис. 8 видно, что, в соответствии с данными работы [3], заряд вакуумной оболочки локализован в пределах области $r < 1$. Его распределение весьма похоже на распределение заряда вакуумной оболочки, приведенное в работе [5] и полученное приближенно. Наше распределение кажется несколько более широким: так, наш максимум плотности соответствует примерно в 1,3 большим радиусам, чем для распределения, приведенного в работе [5]. Рис. 8 показывает, что при увеличении Z происходит некоторое сжатие вакуумной оболочки.

Оказывается, что на больших радиусах плотность заряда вакуумной оболочки хорошо описывается зависимостью

$$r^2\rho_0(r) \sim \exp(-C\sqrt{r}), \tag{18}$$

которая соответствует спаду плотности для дискретного уровня на границе нижнего континуума [3]. Для $Z=180$ такой спад плотности в зависимости от радиуса для представленных на рис. 8 радиусов можно было бы объяснить квазиклассическим подбарьерным затуханием волновой функции для квазидискретного уровня и соответствующим спадом плотности $\sim \exp(-\int |k| dr)$, где k определяется формулой (10), в которой ε – энергия квазидискретного уровня: $\varepsilon_0 = -1,127$. Однако, для $Z=190$ квазидискретный уровень $\varepsilon_0 = -1,685$ находится довольно далеко от границы $\varepsilon = -1$, барьер для него невысок, заканчивается на радиусе $r = 2,3$ и никак не может дать спада плотности рис. 8. Тем не менее, величина $r^2\rho_0(r)$ соответствует асимптотике (18) даже несколько луч-

ше, чем в случае $Z = 180$. Постоянная C : $C = 6,0$ для $Z = 180$ (величина $4\sqrt{2Z\alpha} = 6,48$), $C = 5,7$ для $Z = 190$ (величина $4\sqrt{2Z\alpha} = 6,66$). Таким образом, постоянная C примерно соответствует аналогичной величине $4\sqrt{2Z\alpha}$ из работы [3], но, в отличие от [3], уменьшается при увеличении Z . Интересно было бы выяснить причины асимптотического поведения (18) плотности заряда вакуумной оболочки.

Заключение

Используя формулу (1), в которой производятся суммирование и интегрирование по энергиям для фиксированного значения κ (т. е. для одномерной задачи), рассматривается поляризация вакуума, возникающая в конечном заданном потенциале, в т. ч. и в потенциале, соответствующем сверхкритическому заряженному ядру, для которого дискретные уровни опускаются в нижний континуум. Показано, что в этом случае необходимо модернизировать эту формулу, вычитая из нее выражение, которое дает эта формула для постоянного потенциала на каждом радиусе. Тогда для докритических зарядов ядер полный заряд вакуума оказывается равным нулю, а для сверхкритических ядер он становится кратным удвоенному (из-за вырождения по направлениям момента) числу уровней, перешедших из дискретного спектра в нижний континуум. Однако, линейный по Z вклад в поляризацию вакуума имеет знак, противоположный знаку объемного заряда в потенциале Юлинга, что можно объяснить перестроением электронного спектра при высоких энергиях и больших κ . Можно надеяться, однако, что нелинейный по Z вклад, который спадает по радиусу довольно быстро, и распределение по радиусу заряда вакуумных оболочек, которые получаются в этом подходе, описываются правильно. Учет же потенциала Юлинга в полную поляризацию вакуума можно производить отдельно, после суммирования нелинейных вкладов и вкладов вакуумных оболочек от всех κ .

Произведены численные расчеты поляризации вакуума для обрезанного кулоновского потенциала для ряда докритических и сверхкритических Z : 100, 175, 180, 190. Расчеты показали, что для докритических Z поляризация вакуума в нашем подходе пропорциональна разнице между размытым потенциалом и точным, причем степень размытия на малых радиусах – порядка доли радиуса, а на больших расстояниях – порядка комптоновской длины волны электрона. Величина нелинейного по Z вклада в поляризацию вакуума оказывается небольшой и, например, для $Z = 175$, близкого к Z_c , для полного заряда вакуума на больших расстояниях составляет $\approx 23\%$. Для $Z > Z_c$ вакуум перестраивается и полный заряд вакуума становится равным $-2e$. Плотность этого заряда на больших расстояниях спадает как $\exp(-C\sqrt{r})$.

Список литературы

1. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989.
2. Pomeranchuk I., Smorodinsky Ya. On energy levels in systems with $Z > 137$ // J. Phys. USSR. 1945. Vol. 9. P. 97–100.
3. Зельдович Я. Б., Попов В. С. Электронная структура сверхтяжелых атомов // Успехи физических наук. 1971. Т. 105, № 3. С. 403–440.
4. Мигдал А. Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. М.: Наука, 1978.
5. Greiner W., Muller B., Rafelski J. Quantum electrodynamics of strong fields. Berlin: Springer-Verlag, 1985.
6. Nenciu G. Existence of the spontaneous pair creation in the external field approximation of Q.E.D. // Commun. Math. Phys. 1987. 109. P. 303–312.
7. Pickl P., Dürr D. Adiabatic pair creation // Ibid. 2008. 282. P. 161–198.
8. Godunov S. I., Machet B., Vysotsky M. I. Resonances in positron scattering on a supercritical nucleus and spontaneous production of e^+e^- -pairs // Eur. Phys. J. 2017. C 77(11). P. 782.
9. Кулешов В. М., Мур В. Д., Нарожный Н. Б. и др. Кулоновская задача с зарядом ядра $Z > Z_{cr}$ // Успехи физических наук. 2015. Т. 185, № 8. С. 845–852.
10. Воронов Б. Л., Гитман Д. М., Левин А. Д., Феррейра Р. Особенности энергетического спектра электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра // Теоретическая и математическая физика. 2016. Т. 187, № 2. С. 213–231.
11. Dirac P. A. M. Discussion of the infinite distribution of electrons in the theory of the positron // Proc. Cambridge Phil. Soc. 1934. 30. P. 150–163.
12. Wichmann E. H., Kroll N. M. Vacuum polarization in a strong Coulomb field // Phys. Rev. 1956. 101. P. 843–859.
13. Muller B., Rafelski J., Greiner W. Electron wave functions in over-critical electrostatic potentials // Nuovo Cimento. 1973. A 18. P. 551–573.
14. Рыжик И. М., Градштейн И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1963.

Electronic Vacuum Charge for a Supercritical Nucleus

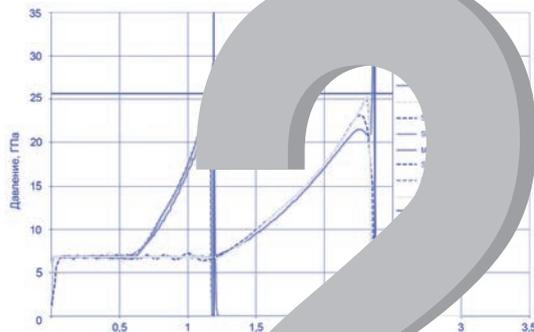
S. F. Garanin, E. M. Kravets

The Dirac equation is solved taking into account the finite size of the nucleus. In this case a solution of the Dirac equation can be constructed for any energy, both positive and negative. We consider nuclei with different charges Z , both $Z < Z_c$ and $Z > Z_c$, where $Z = Z_c$, is the «critical» charge, at which the energy of the lowest discrete state reaches the boundary of the lower continuum $\varepsilon = -mc^2$. Polarization of vacuum is determined, and the vacuum charge for several values of Z is found. For an undercritical nuclear charge, $Z < Z_c$, the total vacuum charge appears to be zero, while for $Z > Z_c$, the vacuum gets rearranged, and the total vacuum charge becomes equal to $-2e$. The vacuum charge distribution for $j = 1/2$ for both undercritical and overcritical nuclei is calculated.

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 2

| | |
|--|-----|
| <i>Тимаев Д. С., Адаменков Ю. А., Буйко С. А., Кудряшов Е. А., Мазанов В. А., Макейкин Е. Н., Маркин С. В., Мелехин А. С., Рогачев В. Г., Сиренко А. В.</i> Динамика превращения частицы углерода на кварцевой подложке в лазерном поле | 86 |
| <i>Деркач И. Н., Кудряшов Е. А., Качалин Г. Н., Кирдяев Н. А., Ладейщикова В.В., Тимаев Д. С.</i> Повреждение запыленных оптических элементов в поле непрерывного лазерного излучения | 106 |
| <i>Вронский М. А., Повышев В. М., Полякова С. Ю., Столмакова Е. С.</i> Фазовый метод решения задачи на собственные значения для уравнения Дирака | 116 |
| <i>Донской Е. Н.</i> Использование PL-оценок потока в точке расчета для расчета поглощенной дозы, создаваемой радионуклидами в воздухе | 138 |
| <i>Рослов В. И., Малькин А. Г., Горбунов А. В.</i> Геометрические вопросы моделирования траекторий частиц в методике С-007 | 146 |
| <i>Михайлюков К. Л., Храмов И. В., Скобеев А. В., Потапов С. В., Фролова Н. В., Романова М. Д.</i> Методика «ПИ» моделирования протонных изображений | 160 |
| <i>Краюхин А. А., Янилкин Ю. В., Стадник А. Л.</i> Численное моделирование движения жестких ударников в упругопластических средах на неподвижной счетной сетке по методике ЭГАК..... | 174 |
| <i>Епишков И. М., Залялова И. В., Линник Д. М., Сулова С. Ю.</i> Исследование применимости метода SPH к моделированию процессов газодинамики с детонацией в двумерном случае | 186 |
| <i>Логинов Д. В.</i> Модуль геометрического ядра GeoCore пакета программ 3D-РНД | 200 |
| <i>Родионов А. В.</i> Искусственная вязкость для подавления численной неустойчивости типа «карбункул» в расчетах трехмерных задач | 208 |
| <i>Иоилов А. Г., Колобянин В. Ю., Свиридова И. А., Стадник А. Л., Янилкин Ю. В.</i> Использование адаптивно-встраиваемой дробной счетной сетки при численном моделировании взаимодействия воздушной ударной волны с изломом границы течения | 218 |
| <i>Князев В. Н., Воронков Р. А., Богданов Е. Н., Рычагов Е. В., Родионов А. В.</i> Кинетическая модель ударно-волнового инициирования детонации гетерогенных взрывчатых веществ с учетом разогрева очагов | 224 |
| <i>Бодров Е. В., Змушко В. В., Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сеньковский Е. Д., Сотсков Е. А.</i> Расчетно-экспериментальное исследование развития турбулентного перемешивания в газовой слойке при прохождении ударной волны | 234 |
| <i>Забавичев И. Ю., Потехин А. А., Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А.</i> Моделирование образования каскада смещений и переходных ионизационных процессов в кремниевых полупроводниковых структурах при нейтронном воздействии ... | 248 |
| <i>Волкова Е. И., Манин П. А., Попков С. А.</i> Способ минимизации механических напряжений в чувствительном элементе микромеханических устройств при монтаже в корпус | 260 |
| <i>Пименов С. А.</i> Концепция построения алгоритмов оценки вероятности безотказной работы конструкций на основе линеаризации функции многих случайных аргументов | 270 |

РАЗДЕЛ



2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 536.49+519.673

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_86

Динамика превращения частицы углерода на кварцевой подложке в лазерном поле

Д. С. Тимаев, Ю. А. Адаменков,
С. А. Буйко, Е. А. Кудряшов, В. А. Мазанов,
Е. Н. Макейкин, С. В. Маркин, А. С. Мелехин,
В. Г. Рогачев, А. В. Сиренко

Приведены результаты расчетно-экспериментальных исследований лазерного нагрева частиц углерода (графита) размером ~500 мкм, расположенных на кварцевой подложке в инертных средах азота и аргона в диапазоне интенсивностей лазерного излучения от 0,35 до 3,5 кВт/см². Экспериментально измерена температура частиц в поле воздействия лазерного излучения. Показано, что нагрев частиц углерода приводит к повреждению поверхности кварцевой подложки практически по всей зоне лазерного пятна с образованием кратера, центр которого совпадает с центром частицы. С использованием разработанного в РФЯЦ-ВНИИЭФ программного комплекса ЛОГОС проведено численное моделирование процесса взаимодействия лазерного излучения с частицей углерода (графита), находящейся на подложке из кварца. Полученные результаты указывают на наличие химической реакции между углеродом и кварцем с возможным образованием слоя карбида кремния (SiC) на поверхности подложки.

Введение

Поведение частиц пыли в поле мощного лазерного излучения представляет большой научный и практический интерес, так как при нагреве частиц до высокой температуры в сотни и тысячи градусов появляется возможность для интенсивного протекания различных физико-химических процессов.

Динамика превращения свободно взвешенных аэрозольных частиц в поле мощного лазерного излучения сопровождается рядом эффектов, один из которых – горение в воздухе частиц углерода – подробно изучен в ряде работ [1–5].

В работах [6, 7] исследовался лазерный нагрев частиц различной химической природы, в т. ч. углеродных, нанесенных на зеркальную подложку из слоев оксидов кремния и оксидов

металлов, находящихся в воздушной среде. В этих работах описаны физические процессы, протекающие при взаимодействии непрерывного лазерного излучения с частицами, абсорбированными на малопоглощающей оптической поверхности. В частности, показано, что при лазерном облучении ансамбля углеродных частиц возникала вспышка, образовывались газообразные продукты, а общая масса частиц на поверхности подложки радикально уменьшалась. Однако, авторы практически не рассматривали химические процессы, хотя, как это видно из анализа представленных в этих работах данных, они играют важную роль.

В данной работе проведено исследование динамики превращения одиночных частиц графита субмиллиметрового размера, предварительно нанесенных на прозрачную кварцевую подложку, в поле непрерывного лазерного излучения. Исследования проводились в бескислородной среде азота или аргона, когда отсутствовало горение углерода в кислороде воздуха. Такой экспериментальный подход показал, что в этих условиях высокотемпературный нагрев частицы углерода, находящейся в контакте с поверхностью кварца, возможно приводит к образованию пленки полупроводникового карбида кремния (SiC) и сопровождается резким изменением оптических свойств поверхности кварцевой подложки. При этом поверхность подложки повреждается практически по всей зоне лазерного пятна с образованием глубокого кратера, центр которого совпадает с центром частицы.

1. Эксперимент

1.1. Схема проведения опытов и методики измерения

Исследования нагрева частицы углерода, находящейся на прозрачной кварцевой подложке в инертной газовой среде, проводились по схеме, представленной на рис. 1. Лазерное излучение (ЛИ) направлялось на кварцевую подложку диаметром 2,5 см и высотой 1,0 см, в центре которой размещалась исследуемая частица субмиллиметрового размера.

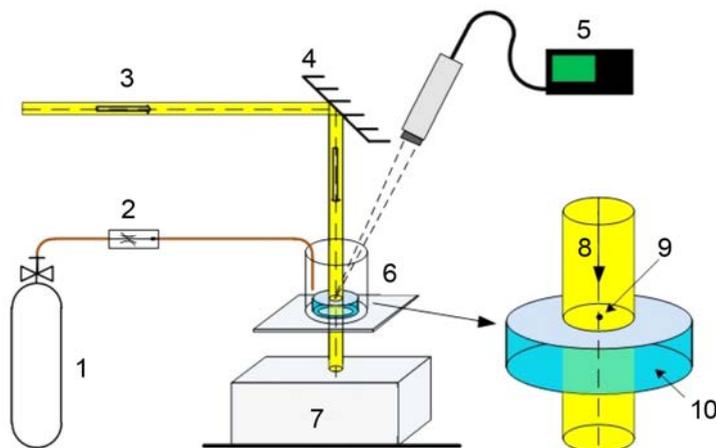


Рис. 1. Схема исследования нагрева углеродных частиц на кварцевой подложке в поле лазерного излучения: 1 – баллон, 2 – натекающий; 3, 8 – лазерное излучение, 4 – зеркало, 5 – пирометр, 6 – образец, 7 – ловушка ЛИ, 9 – углеродная частица, 10 – кварцевая подложка

Непрерывное излучение длиной волны 1,07 мкм генерировалось промышленным волоконным лазером. Выходной пучок ЛИ, имеющий гауссово распределение интенсивности, проходил через телескопическую систему линз, расширялся до необходимых размеров, отражался от зеркала и падал на образец с частицей. Эффективный радиус лазерного пятна на образце по уровню 0,86 в экспериментах составлял $r_{\text{eff}} = 5$ мм и 6 мм. Максимальная плотность мощности ЛИ в центре пятна менялась от 0,35 до 3,5 кВт/см². Время воздействия ЛИ на образец $t_{\text{л}}$ составляло 30 или 120 с в зависимости от постановки эксперимента.

Пространственное распределение интенсивности в пятне ЛИ измерялось при видеосъемке пятна воздействия на рассеивающем экране с помощью видеокамеры. Погрешность измерения распределения интенсивности ЛИ составляла ± 13 %.

Исследуемые частицы углерода, по форме близкой к сферической, выбирались из измельченного порошка графита с характерным размером ~ 500 мкм. С каждой кварцевой подложкой проводилось по 5–7 экспериментов, каждую последующую частицу помещали на свободное от лазерного воздействия место. Перед установкой частицы поверхность кварцевой подложки очищалась мыльным раствором и этиловым спиртом.

Для проведения экспериментов в инертной газовой среде исследуемый образец помещался на дно полузамкнутого объема, который создавался кварцевой трубой диаметром 75 мм и высотой 120 мм. При проведении опыта осуществлялась постоянная продувка этого объема азотом или аргоном с контролем отсутствия в объеме кислорода.

Перед экспериментами для определения фактического размера частицы поверхность образца с частицей фотографировалась при помощи микроскопа. После лазерного разрушения частицы таким же способом фотографировалась зона повреждений на кварцевой подложке.

Яркостная температура частицы на подложке определялась с помощью пирометра на рабочей длине волны 0,67 мкм. Диаметр фокусировки измерительного пятна равнялся ~ 1 мм. Спектроскопическая температура частицы определялась с помощью матричного спектрометра в диапазоне длин волн от 0,2 до 1,1 мкм. Особенности применяемой пирометрической и спектрометрической методик измерения температуры твердых тел изложены в работах [8, 9]. Погрешность измерения температуры составляла ± 5 %.

Так как в расчетах и при сопоставлении с результатами экспериментов использовалась термодинамическая (реальная) температура, то определение реальной температуры по экспериментальной яркостной температуре осуществлялось с использованием уравнения яркостной пирометрии [10, 11]:

$$\frac{1}{T_b} = \frac{1}{T} - \frac{\lambda}{C_2} \ln \varepsilon(\lambda, T), \quad (1)$$

где T_b – яркостная температура реального тела, К; T – термодинамическая (реальная) температура, К; $\varepsilon(\lambda, T)$ – спектральная степень черноты; λ – длина волны излучения.

Согласование сильно зависело от степени черноты объекта, температура которого определялась пирометрическим способом: чем меньше степень черноты, тем сильнее истинная температура отличалась от яркостной. Если для графита степень черноты не сильно отличалась от единицы и слабо менялась с ростом температуры, то для полупроводника SiC, который образовывался при лазерном нагреве частицы углерода, находящейся на кварцевой подложке, степень черноты заметно меньше единицы и сильно зависела от температуры. Поэтому в разделе 1 сравнивались между собой экспериментально полученные яркостные температуры, а в разделе 2 – расчетные температуры сравнивались с экспериментальными реальными температурами, полученными

по формуле (1) с учетом экспериментально определенной степени черноты по спектроскопическим измерениям.

Идентификация продукта синтеза лазерного нагрева частиц графита на кварцевой подложке проводилась с использованием фотолюминесцентной спектроскопии. Для этого исследуемый образец облучался ЛИ длиной волны 325 нм от непрерывного гелий-кадмиевого лазера с одновременной регистрацией спектров фотолюминесценции с помощью матричного спектрометра в диапазоне длин волн от 350 до 650 нм.

1.2. Экспериментальные результаты

Эксперименты по исследованию лазерного нагрева и динамики превращения частиц углерода (графита), находящихся на прозрачной кварцевой подложке под действием непрерывного лазерного излучения, проводились в бескислородной газовой среде азота или аргона при атмосферном давлении.

1.2.1. Лазерный нагрев частиц графита в среде азота или аргона

Зависимости яркостной температуры от времени частиц графита на кварцевой подложке при воздействии ЛИ в среде азота и аргона приведены на рис. 2. Из рисунка видно, что при интенсивностях ЛИ, воздействующего на частицу графита, менее $1,5 \text{ кВт/см}^2$ (как в азоте, так и в аргоне) температура частицы монотонно увеличивалась до стационарной, величина которой пропорциональна интенсивности ЛИ. Такой ход температуры характерен при лазерном нагреве химически инертных частиц, когда частица и подложка не претерпевают никаких фазовых изменений.

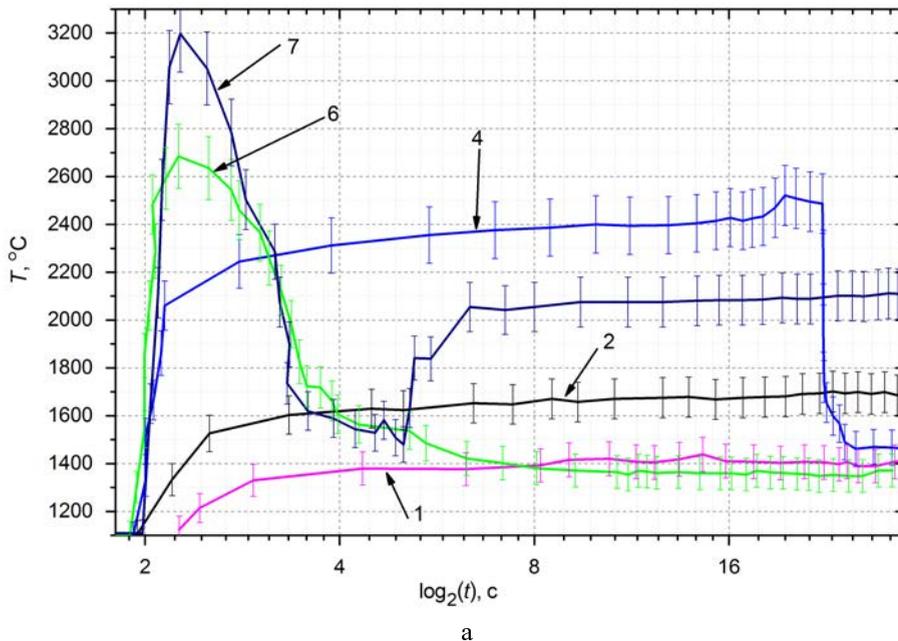
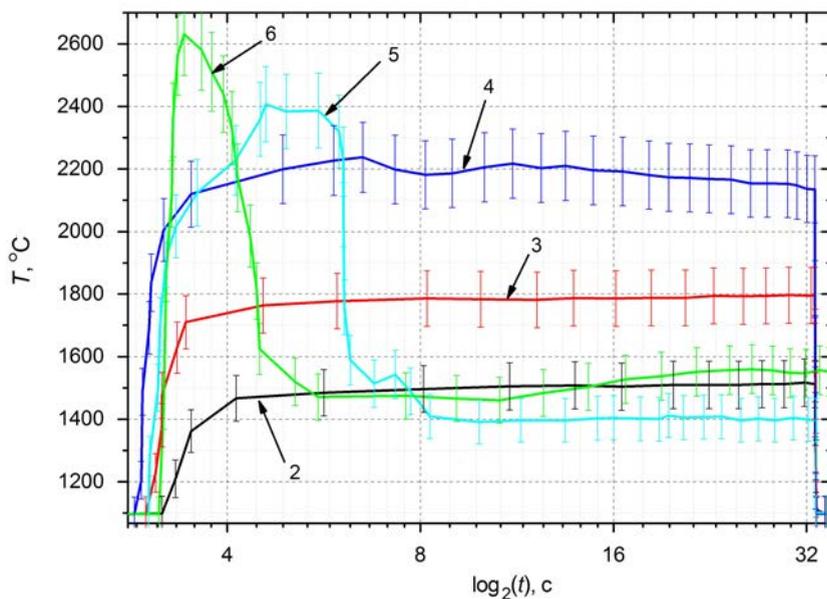


Рис. 2. Экспериментальные зависимости яркостной температуры от времени частиц графита на кварцевой подложке при воздействии ЛИ в среде азота (а) и аргона (б): 1 – $q = 0,35 \text{ кВт/см}^2$, 2 – $q = 0,5 \text{ кВт/см}^2$, 3 – $q = 0,75 \text{ кВт/см}^2$, 4 – $q = 1,5 \text{ кВт/см}^2$, 5 – $q = 1,75 \text{ кВт/см}^2$, 6 – $q = 2,5 \text{ кВт/см}^2$, 7 – $q = 3,4 \text{ кВт/см}^2$.

Окончание рисунка на с. 90



б

Рис. 2. Окончание

При увеличении интенсивности воздействующего ЛИ свыше $1,5 \text{ кВт/см}^2$ как в азоте, так и в аргоне ход временных зависимостей яркостной температуры частицы изменялся. Вначале температура за 1–2 с резко повышалась до максимальной, а затем быстро уменьшалась в 2–2,5 раза до стационарной. Визуальные наблюдения после опыта показывали, что частица исчезала, а на кварцевой подложке по всему сечению лазерного пучка возникала зона заметных повреждений в виде кратера и оплавления поверхности, как это видно из рис. 3, 4. При повторном воздействии по этому месту ЛИ такой же интенсивности температура зоны монотонно возрастала до стационарной и не менялась в течение всего времени воздействия.

Отметим результаты опыта с частицей графита в азоте при облучении ЛИ плотностью мощности $1,5 \text{ кВт/см}^2$, когда температура частицы, достигнув $\sim 2400 \text{ }^\circ\text{C}$, только через ~ 20 с после начала воздействия уменьшилась до своего стационарного значения $\sim 1450 \text{ }^\circ\text{C}$. Очевидно, это вызвано резким изменением оптических и других свойств материала в зоне воздействия вследствие химической реакции между углеродом и кварцем.

На рис. 3 и 4 представлены фото одной из кварцевых подложек после серии опытов и схема зоны воздействия ЛИ на частицу углерода, расположенную на кварцевой подложке в увеличенном масштабе. Из рис. 3 видно, что при интенсивности ЛИ $\sim 0,5 \text{ кВт/см}^2$ заметные повреждения поверхности кварцевого элемента отсутствуют. При дальнейшем увеличении интенсивности ЛИ до $1,75 \text{ кВт/см}^2$ и выше эти повреждения принимают характерный вид с концентрическими зонами повреждения.

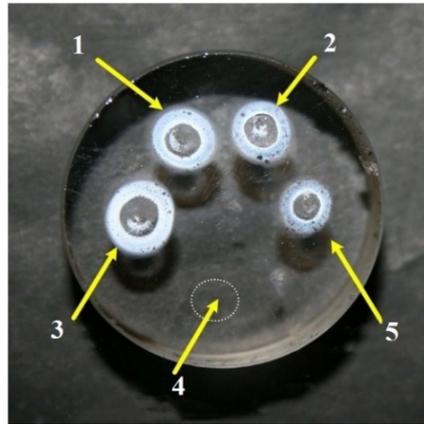


Рис. 3. Кварцевая подложка после серии опытов с частицами графита: 1 – $q_{\max} = 2,5 \text{ кВт/см}^2$, 2 – $q_{\max} = 2 \text{ кВт/см}^2$, 3 – $q_{\max} = 2,5 \text{ кВт/см}^2$, 4 – $q_{\max} = 0,5 \text{ кВт/см}^2$ (нет видимых повреждений), 5 – $q_{\max} = 1,75 \text{ кВт/см}^2$

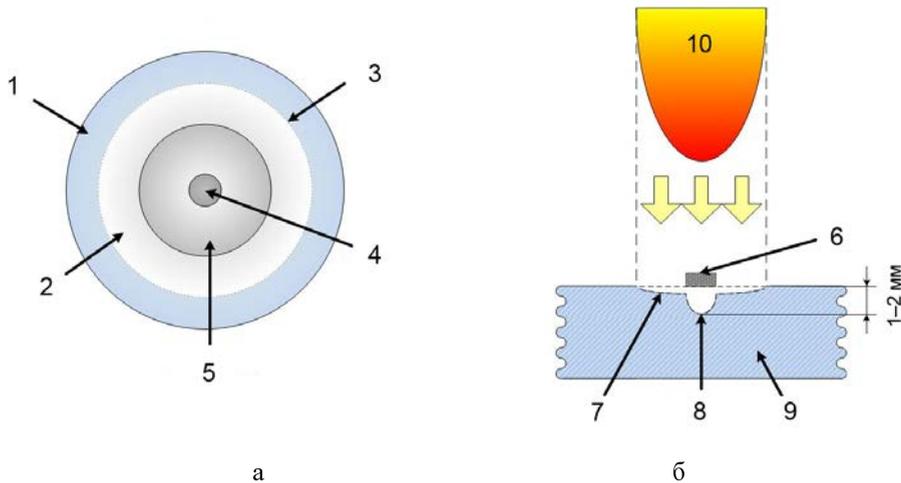


Рис. 4. Схема зоны воздействия ЛИ на частицу углерода, расположенную на кварцевой подложке: а – вид сверху, б – вид сбоку в разрезе (увеличено); 1, 9 – кварц; 2 – зона образования белого налета; 3 – граница повреждения; 4, 8 – кратер; 5, 7 – зона плава кварца; 6 – частица; 10 – ЛИ

Из рис. 3, 4 видно, что при нагревании частицы углерода ЛИ интенсивностью свыше $1,75 \text{ кВт/см}^2$ на поверхности образца в области под частицей образуется кратер, размер которого соизмерим с исходными размерами частицы. Размеры зоны химического травления и оплавления кварца вокруг частицы практически на порядок больше и близки к диаметру воздействующего лазерного пучка.

На рис. 5 сопоставляются максимальные T_{\max} и стационарные T_{stac} яркостные температуры при лазерном нагреве частиц графита на кварцевой подложке, помещенных в азот и аргон. При обработке результатов опытов в азоте с интенсивностью ЛИ менее $1,5 \text{ кВт/см}^2$ и в аргоне менее $1,75 \text{ кВт/см}^2$ принималось, что максимальная T_{\max} и стационарная T_{stac} температуры равны, так как при таких параметрах ЛИ, как это видно из рис. 2, температура частицы нарастает монотонно без локальных экстремумов до своего стационарного значения.

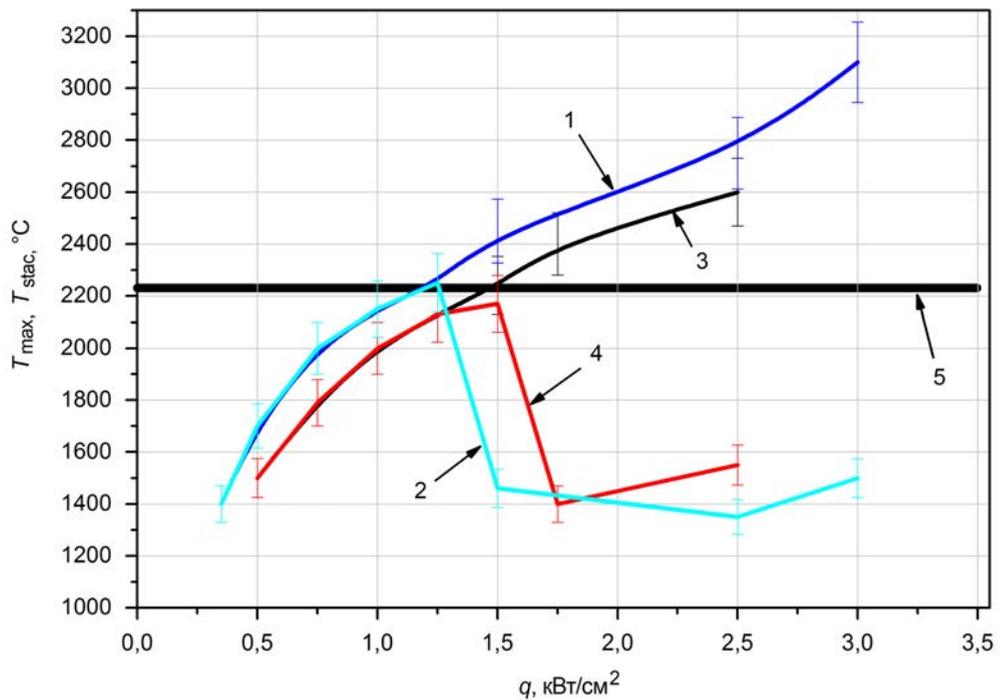


Рис. 5. Зависимости от интенсивности ЛИ максимальной T_{\max} и стационарной T_{stac} яркостных температур частиц графита на кварце в инертной газовой среде: 1 – T_{\max} (азот), 2 – T_{stac} (азот), 3 – T_{\max} (аргон), 4 – T_{stac} (аргон), 5 – T_{xp}

Из рис. 5 видно, что в бескислородных газовых средах частицы графита на кварцевой подложке нагреваются до температуры $T = 2200 \pm 50$ °C, как инертные частицы без какого-либо взаимодействия с подложкой. При нагреве частицы до 2400 °C и выше ее максимальная температура спустя 1–2 с уменьшалась в 2 с лишним раза до своего стационарного значения вследствие резкого изменения теплофизических и оптических свойств среды. Сама частица исчезала, а на подложке образовывался кратер. Это является свидетельством протекания химической реакции с образованием нового вещества. Укажем, что граничная температура (2400–2500 °C), при которой меняется динамика лазерного нагрева, совпадает с температурой синтеза промышленного карбида кремния (карборунда) по методу Ачесона [12].

Таким образом, из сопоставления временной зависимости температур, фактов исчезновения частицы, образования кратера и зоны повреждения, граничной температуры начала реакции и учета химического состава исходных веществ (углерод и оксид кремния) можно прийти к выводу, что при лазерном нагреве частиц углерода, находящихся на кварцевой подложке при температуре свыше 2400–2500 °C, протекает химическая реакция образования карбида кремния [13]



1.2.2. Спектры фотолюминесценции

Уточнение химической природы соединения, синтезированного после лазерного нагрева частицы графита на кварцевой подложке, было проведено по спектрам фотолюминесценции (ФЛ). На рис. 6 приведены ФЛ-спектры в центре кратера, где первоначально находилась частица графита, самой кварцевой подложки, исходной частицы графита и промышленного карборунда. Из рисунка видно, что в диапазоне длин волн от 385 до 550 нм, соответствующих политипам SiC [14], наблюдаются три интенсивных пика на длинах волн $\lambda_1 = 441$ нм, $\lambda_2 = 472$ нм и $\lambda_3 = 504$ нм.

В целом, спектры ФЛ синтезированного продукта и промышленного карборунда, состоящего из смеси политипов SiC, практически идентичны между собой, тогда как спектры ФЛ исходных продуктов значительно различаются.

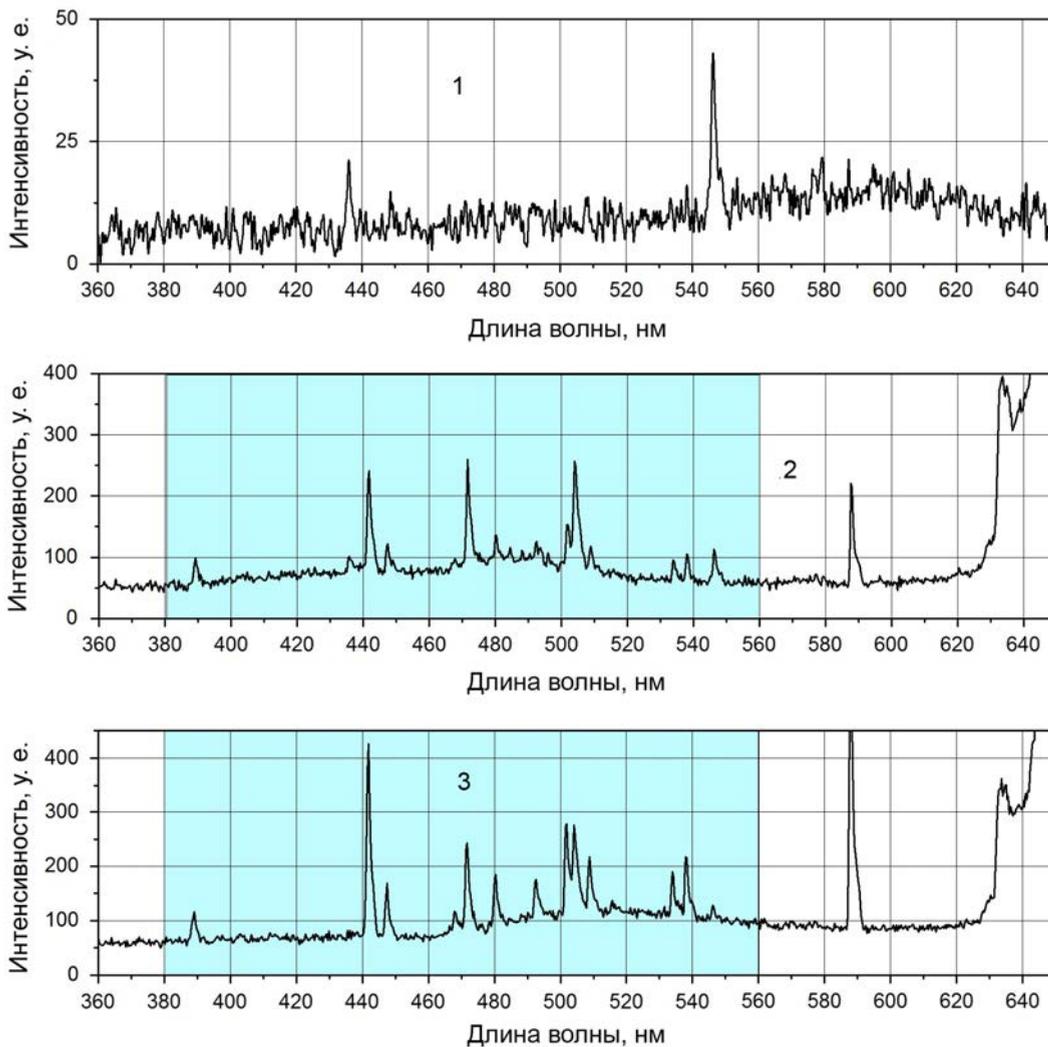


Рис. 6. Спектры фотолюминесценции кварца, карборунда и продукта синтеза графита с кварцем: 1 – кварц, 2 – центр пятна, 3 – белый карборунд

Таким образом, проведенные измерения температуры и спектров ФЛ показывают, что при лазерном нагреве частиц углерода (графита), размещенных на кварцевой подложке в инертной газовой среде, возможно образование карбида кремния. Образование карбида кремния обусловлено реакцией нагретого до высокой температуры углерода (графита) с оксидом кремния [13].

2. Численное моделирование

2.1. Постановка задачи и расчетная модель

По условиям эксперимента, подложка с частицей углерода, через которую проходило непрерывное лазерное излучение, представляла собой диск с плоскопараллельными торцами, изготовленный из кварца с малым коэффициентом поглощения. На рис. 7 представлены геометрия задачи и фрагмент расчетной сетки.

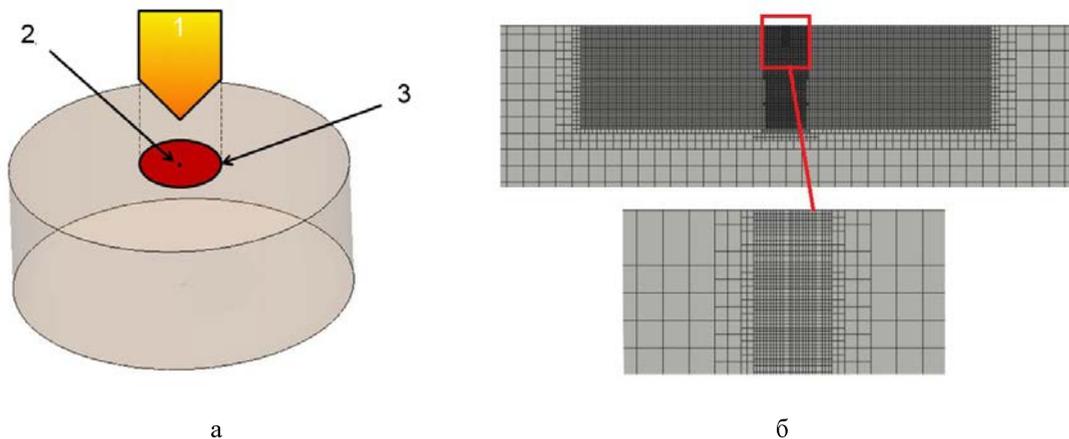


Рис. 7. Геометрическая модель исследуемого образца (а) и фрагмент расчетной сетки (б):
1 – ЛИ, 2 – частица, 3 – область падения ЛИ

Кварцевая подложка имела радиус $R = 1,25$ см и толщину $L = 1$ см. В расчетах использовались теплофизические характеристики кварца, графита и карбида кремния, приведенные в работе [15]. Частица моделировалась диском заданного радиуса. Такая постановка была принята для упрощения построения расчетной модели и соответствующей ей сетки. Частица располагалась в центре кварцевой подложки. Расчетный радиус частицы выбирался из условия равенства площадей частицы из эксперимента и моделируемой частицы в виде круга или эллипса. Так как реальная частица моделировалась диском бесконечно малой толщины, то в расчетах учитывалось только поверхностное поглощение, тогда как в действительности присутствует объемное поглощение из-за конечной толщины реальной частицы. В силу этого приближения результаты расчетов и экспериментов могут различаться при малых значениях плотности мощности ЛИ. При больших плотностях мощности данный факт играет меньшую роль, так как из-за высоких градиентов температура быстрее выравнивается по объему.

Плотность теплового источника объемного энерговыделения, обусловленного поглощением ЛИ в кварцевой подложке, задавалась в виде объемного источника энерговыделения Q

$$Q = q \delta, \quad (3)$$

где q (Вт/см²) – плотность падающего потока ЛИ, $\delta = 10^{-5}$ см⁻¹ – коэффициент поглощения лазерного излучения в стекле. Конвективный теплообмен частицы боковой и торцевых поверхностей подложки с окружающей средой не учитывался.

Для получения температурных полей в расчетах моделировались различные варианты расчетных схем, выбранных с учетом особенностей проводимых экспериментов. В силу существенного различия размеров кварцевой подложки и моделируемых частиц выбиралась соответствующая расчетная сетка. В области частицы она была более подробной для повышения точности расчета.

При верификации расчетной модели лазерного нагрева частицы на прозрачной подложке была выбрана сетка, состоящая из четырех областей:

– цилиндрическая область с радиусом, соответствующим размеру частицы и высотой $h = 10^{-3}$ м, с размером ячейки $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-5}$ м;

– цилиндрическая область с радиусом $r = 10^{-3}$ м и высотой $h = 10^{-3}$ м, с размером ячейки $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-5}$ м;

– цилиндрическая область с радиусом $r = 2 \cdot 10^{-3}$ м и высотой $h = 3 \cdot 10^{-3}$ м, с размером ячейки $\varepsilon = 10^{-4}$ м;

– оставшаяся часть образца с размером ячейки $\varepsilon = 8 \cdot 10^{-4}$ м.

2.2. Расчет лазерного нагрева частицы на прозрачной подложке без учета фазового перехода

С помощью пакета программ ЛОГОС (версия 5. Свидетельство № 2017612306 от 20.02.2017) были рассчитаны два варианта лазерного нагрева одиночной инертной частицы, находящейся на прозрачной подложке, без учета фазовых переходов и протекания химической реакции между частицей и подложкой.

Для моделирования были выбраны опыты с графитовой частицей, находящейся в аргоне при плотностях мощности ЛИ, равные $q = 500, 1000$ и 1500 Вт/см². Во всех расчетах коэффициент поверхностного поглощения принимался постоянным и равным $\xi_f = 0,9$. Эквивалентный радиус частицы $r_{\text{ekv}} = 240$ мкм. В первом варианте расчетов принимался идеальный тепловой контакт между частицей и кварцевой подложкой с коэффициентом термического сопротивления, равным нулю. В соответствии с данными работы [16] под коэффициентом термического сопротивления понимается величина, обратная коэффициенту теплоотдачи газового зазора между частицей и кварцевой подложкой, т. е.

$$\alpha = \frac{\lambda}{h}, \quad R = \frac{1}{\alpha}, \quad (4)$$

где h – усредненная толщина зазора между частицей и кварцевой подложкой, м; λ – коэффициент теплопроводности среды в зазоре, Вт/м·К; R – коэффициент термического сопротивления, К·м²/Вт.

В пакете программ ЛОГОС термическое сопротивление учитывается скачком температур между контактирующими средами, а зазор в явном виде не моделируется. Данный феноменологический подход позволяет получить хорошее согласие расчета с экспериментом.

Результаты проведенных расчетов и их сравнение с экспериментами для условий без учета протекания химической реакции образования SiC приведены на рис. 8.

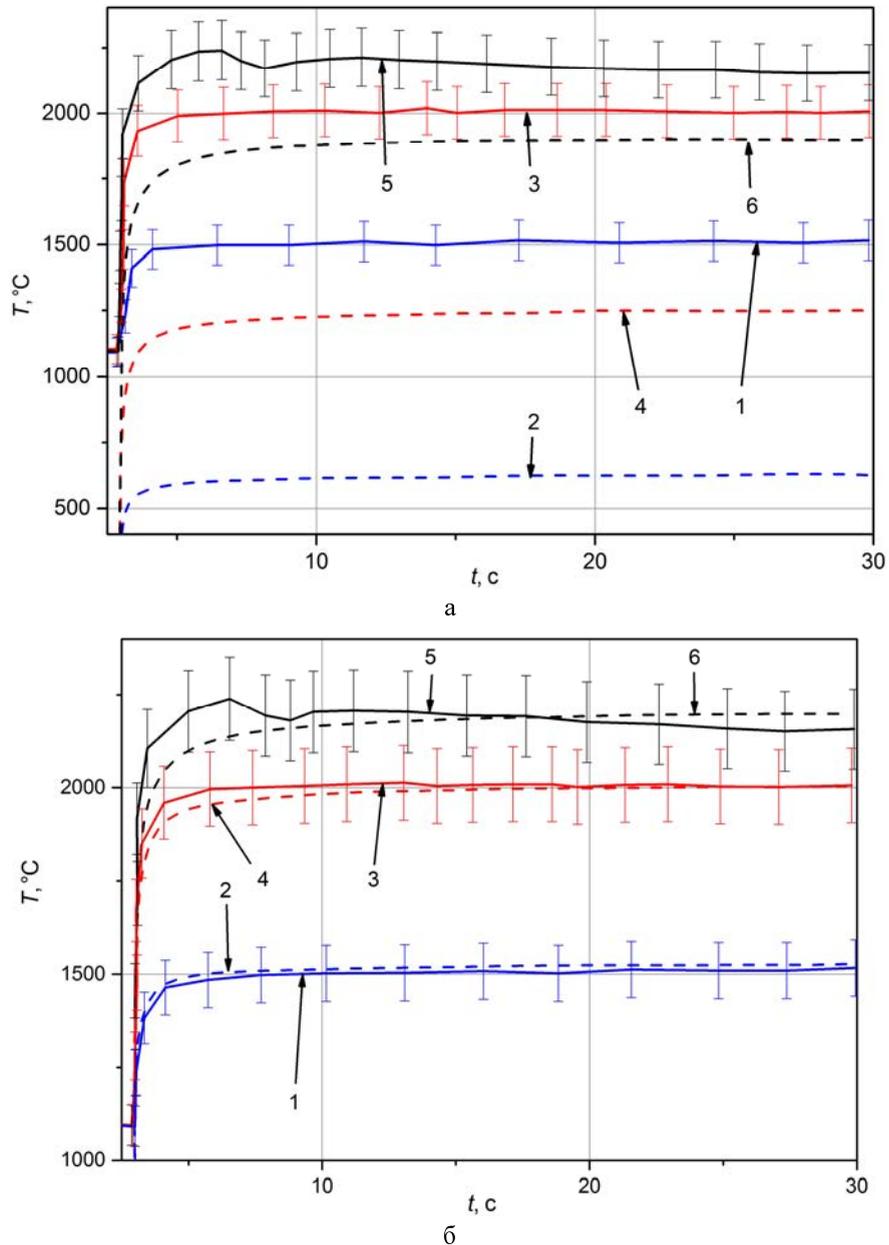


Рис. 8. Зависимости температуры частицы от времени в экспериментах и расчетах при идеальном тепловом контакте частицы с подложкой (а) и с учетом термического сопротивления (б): 1 – $q = 0,5 \text{ кВт/см}^2$ (эксперимент), 2 – $q = 0,5 \text{ кВт/см}^2$ (расчет), 3 – $q = 1 \text{ кВт/см}^2$ (эксперимент), 4 – $q = 1 \text{ кВт/см}^2$ (расчет), 5 – $q = 1,5 \text{ кВт/см}^2$ (эксперимент), 6 – $q = 1,5 \text{ кВт/см}^2$ (расчет)

Из рис. 8, *а* видно, что общий характер экспериментальных и расчетных зависимостей температуры от времени согласуется между собой: температура быстро выходит на стационарный уровень, когда приход лазерной энергии в частицу компенсируется кондуктивным, конвективным и лучистым отводом тепла. Однако, значения стационарных экспериментальных и расчетных температур при большом времени лазерного облучения различались в 2 с лишним раза при одной и той же интенсивности ЛИ. Это различие было максимальным при малых интенсивностях ЛИ. Такая разница связана с неидеальностью теплового контакта между частицей и подложкой в выбранной нами расчетной модели. В реальных условиях эксперимента, когда частица графита с произвольной шероховатостью поверхности находилась на поверхности кварцевой подложки, идеальный тепловой контакт между ними, конечно же, отсутствовал. Из рис. 8, *б* видно, что учет термического сопротивления между областями расчетной сетки, моделирующей частицу и подложку, позволил согласовать результаты расчетов и экспериментов по значениям температур в центре частицы. Отметим, что в этом варианте тепловые потоки на границе между частицей и кварцем различались примерно на 10 %.

Таким образом, проведенные с помощью пакета программ ЛОГОС численные расчеты лазерного нагрева одиночной инертной частицы на кварцевой подложке с учетом неидеальности теплового контакта между ними и отсутствия фазовых переходов и химических реакций показали неплохое согласие с результатами экспериментов в диапазоне исследованных интенсивностей ЛИ до $1,5 \text{ кВт/см}^2$.

2.3. Расчет лазерного нагрева углеродной частицы на кварцевой подложке с учетом химической реакции

Для расчетного описания результатов экспериментов по лазерному нагреву частицы углерода на кварцевой подложке при плотностях мощности ЛИ выше $1,5 \text{ кВт/см}^2$, представленных в разделе 1, было принято, что при температуре $T \sim 2300\text{--}2500 \text{ }^\circ\text{C}$ между углеродом и кварцем происходит реакция образования карбида кремния по реакции (2). В результате этой реакции на поверхности кварцевой подложки возможно образуется слой карбида кремния, который, будучи политипическим полупроводником с шириной запрещенной зоны в диапазоне от 2,2 до 3,3 эВ [17, 18], имеет коэффициент поглощения, сильно отличающийся от коэффициента поглощения исходной частицы графита. Толщина этого слоя в условиях проводимых экспериментов может достигать нескольких микрометров.

При моделировании принималось, что на первой стадии поглощение ЛИ в области частицы графита происходит с коэффициентом поглощения $\xi_f = 0,9$. При нагреве частицы до $2300\text{--}2500 \text{ }^\circ\text{C}$ протекает химическая реакция образования карбида кремния и коэффициент поглощения в области частицы значительно уменьшается. Кроме того, экспериментальные исследования показали, что во всем сечении лазерного пучка, проходящего через кварцевую подложку, возникает область с коэффициентом поглощения, отличным от поглощения кварцевой подложки. Поэтому при численном моделировании лазерного нагрева графитовой частицы в инертной газовой среде варьировались размеры областей поглощения и коэффициенты поверхностного поглощения. Эквивалентный радиус частицы принимался равным $r_{\text{ekv}} = 259 \text{ мкм}$. Коэффициент поверхностного поглощения для исходной частицы графита составлял так же, как и ранее: $\xi_f = 0,9$. В данном варианте модели термическое сопротивление не учитывалось, так как предполагалось, что карбид кремния с подложкой имел идеальный тепловой контакт.

В расчетах было рассмотрено два варианта размеров областей поглощения ЛИ, образующихся в ходе реакции:

– область поглощения SiC соответствует размерам частицы $r = r_{\text{ЭКВ}}$, и дополнительная область радиусом $r = 1$ мм;

– область поглощения SiC радиусом $r = 500$ мкм, и дополнительная область поглощения радиусом $r = 3$ мм.

При моделировании второй стадии лазерного нагрева осуществлялась расчетная подгонка коэффициента поглощения SiC, так как он не был известен. Коэффициент поглощения варьировался в диапазоне от 0,1 до 0,45. В результате наилучшее согласие было получено при следующих параметрах:

– вариант 1: область, где образуется SiC, соответствует размерам частицы, т. е. $r_{\text{ЭКВ}}$ и $\xi_f = 0,45$ при $q = 2,5$ кВт/см², $\xi_f = 0,60$ при $q = 1,75$ кВт/см², область радиусом $r = 1$ мм $\xi_f = 0,02$ для всех вариантов расчета;

– вариант 2: область, где образуется SiC, радиусом $r = 500$ мкм и $\xi_f = 0,15$ при $q = 2,5$ кВт/см², $\xi_f = 0,21$ при $q = 1,75$ кВт/см², и дополнительная область поглощения радиусом $r = 3$ мкм и $\xi_f = 0,02$ для всех вариантов расчета.

Характерное время протекания реакции выбиралось по результатам экспериментов в пределах 0,7–2,5 с. В частности, для значения плотности мощности ЛИ $q = 1,75$ кВт/см² время реакции $t_p \approx 2,7$ с, а для $q = 2,5$ кВт/см² и больше время реакции составляло $t_p \approx 0,7$ с.

На рис. 9 сравниваются результаты расчетов с экспериментальными данными.

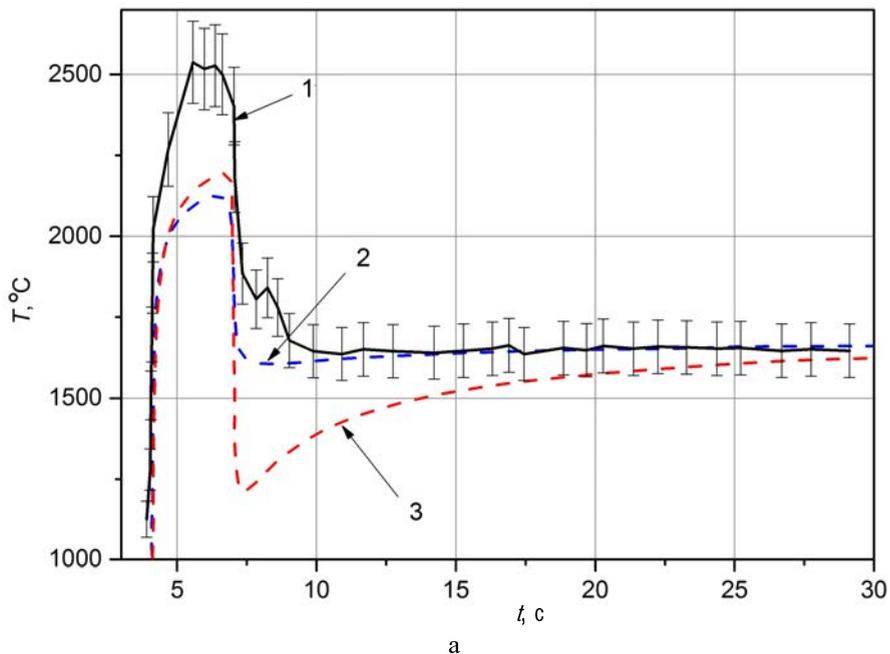
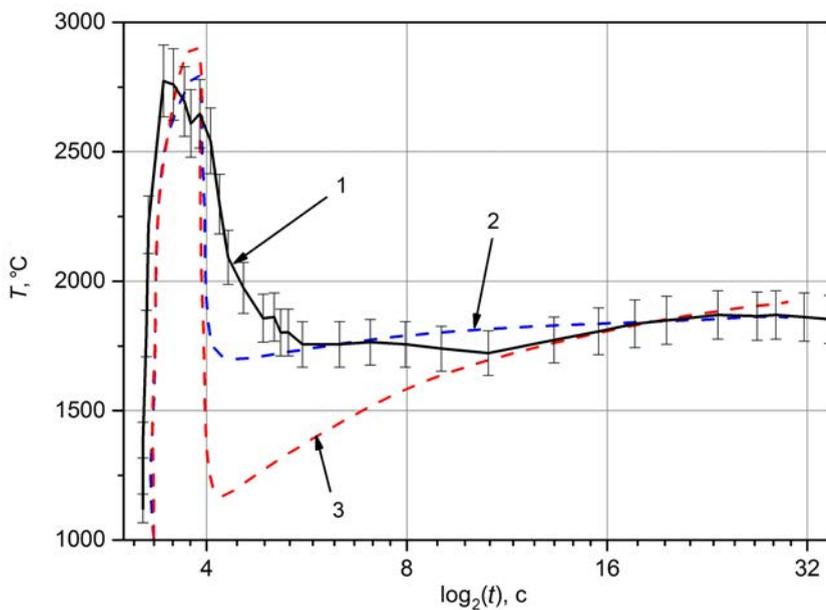


Рис. 9. Зависимость температуры частицы от времени при $q = 1,75$ кВт/см² (а) и $q = 2,5$ кВт/см² (б): 1 –эксперимент, 2 – расчет (первый вариант области), 3 – q = расчет (второй вариант области). Окончание рисунка на с. 99



б

Рис. 9. Окончание

Из сравнения результатов, приведенных на рис. 9, видно, что как характер зависимости, так и значения температур, полученные в ходе расчетов и эксперимента, находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом для первого варианта расчетной области. При использовании второго варианта расчетной области расчетные данные отличаются от эксперимента на стадии химической реакции. Это может быть связано с учетом всех особенностей протекания химической реакции.

Было проведено расчетное моделирование эксперимента, в котором идентичное ЛИ повторно воздействует на облученную в предыдущем опыте поверхность образца. В этом случае с самого начала ЛИ воздействует на SiC, образованный при первом облучении частицы графита. Результаты таких расчетов приведены на рис. 10.

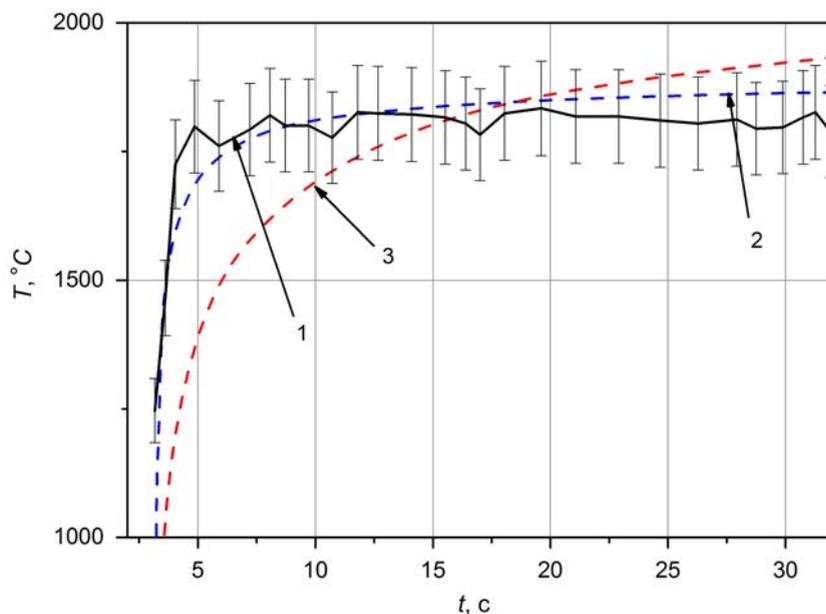


Рис. 10. Зависимость температуры частицы от времени при повторном облучении образца при $q = 2,5$ кВт/см²: 1 – эксперимент, 2 – расчет (первый вариант области), 3 – q = расчет (второй вариант области)

Как видно из рис. 10, эксперимент и расчет хорошо согласуются при использовании первого варианта расчетной области, что дополнительно подтверждает факт образования карбида кремния в ходе химической реакции при лазерном воздействии.

3. Обсуждение результатов

На рис. 11 и 12 приведены пространственные распределения температуры в кварцевой подложке для вариантов расчета с использованием разных размеров областей поглощения. Распределения температур приведены на момент времени 30 с после начала лазерного воздействия.

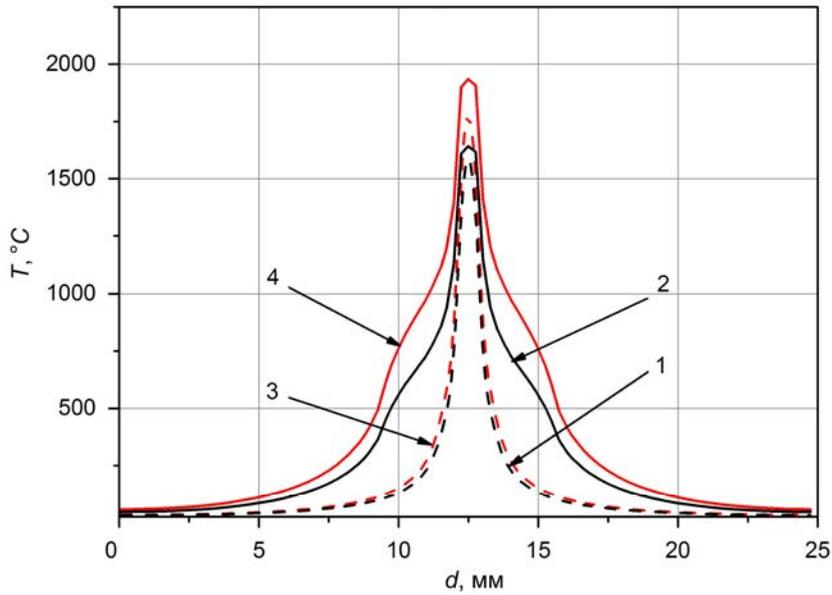


Рис. 11. Распределение температуры по диаметру кварцевой подложки в плоскости падения ЛИ $Z = 0$ на момент времени $t = 30$ с: 1 – $q = 1,75$ кВт/см² (первый вариант области), 2 – $q = 1,75$ кВт/см² (второй вариант области), 3 – $q = 2,5$ кВт/см² (первый вариант области), 4 – $q = 2,5$ кВт/см² (второй вариант области)

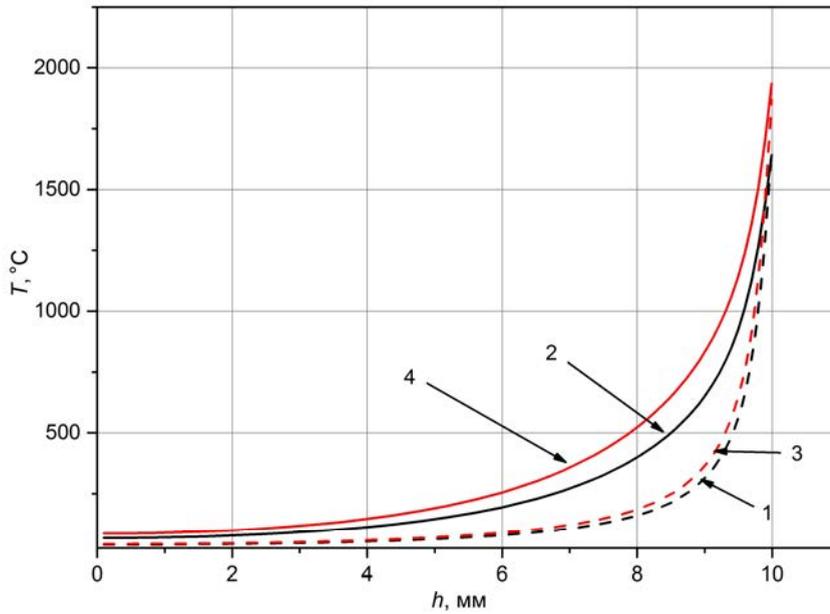


Рис. 12. Распределение температуры по толщине кварцевой подложки вдоль оси OZ на момент времени $t = 30$ с (начало отсчета от необлучаемой поверхности): 1 – $q = 1,75$ кВт/см² (первый вариант области), 2 – $q = 1,75$ кВт/см² (второй вариант области), 3 – $q = 2,5$ кВт/см² (первый вариант области), 4 – $q = 2,5$ кВт/см² (второй вариант области)

Из рис. 11 и 12 следует, что первый вариант задания расчетной области дает лучшее согласие с температурой в центре частицы, зарегистрированной экспериментально, тогда как при втором варианте задания расчетной области температурное поле распространяется на большее расстояние, что обусловлено большей площадью поглощающей области. Отсюда следует, что из-за образования карбида кремния на прозрачной кварцевой подложке образуется область поглощения, по размерам в несколько раз превосходящая размер исходной частицы.

Было рассчитано остаточное температурное поле в образце после выравнивания температурных градиентов по объему подложки спустя длительное время после выключения ЛИ. В эксперименте измеренная остаточная температура подложки составила $105\text{ }^{\circ}\text{C}$ через ~ 3 мин после лазерного облучения образца плотностью мощности $q = 3,4\text{ кВт/см}^2$. На рис. 13 приведена экспериментальная зависимость температуры цилиндрической поверхности кварцевой подложки от времени, измеренная с помощью термопары, установленной на полувывоте подложки. Место расположения термопары на рисунке отмечено крестиком.

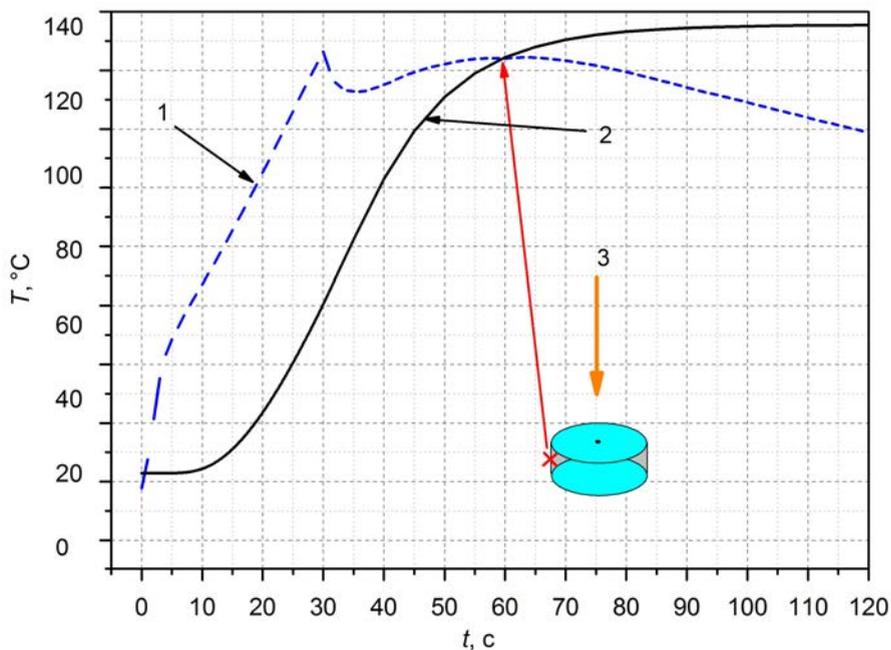


Рис. 13. Зависимость температуры $T_{\text{мн}}$ цилиндрической поверхности кварцевой подложки, $q = 3,4\text{ кВт/см}^2$:
1 – $T_{\text{мн}}$, 2 – $T_{\text{расч}}$, 3 – ЛИ

Из рис. 13 видно, что в эксперименте термопара начинает нагреваться с момента включения лазерного облучения, хотя тепловая волна теплопроводности дойти до термопары еще не могла. Рост температуры термопары продолжался до момента выключения ЛИ. По-видимому, это связано с лучистым нагревом рабочего спая термопары тепловым излучением самой частицы и зоны подложки вокруг нее, нагретых до высокой температуры, и ЛИ, рассеянным от этой зоны. После выключения ЛИ в момент времени, равный 30 с, термопара начинает методически верно измерять

температуру в точке контакта. В эксперименте с плотностью мощности ЛИ, равного $3,4 \text{ кВт/см}^2$, максимальный нагрев кварцевой подложки $\Delta T_{\text{max}} = 115^\circ\text{C}$, достигается через ~ 60 с после начала лазерного облучения. Это близко к расчетному значению этой величины.

Таким образом, из результатов экспериментов и проведенных расчетов следует, что прохождение непрерывного ЛИ через прозрачную кварцевую подложку с малым коэффициентом поглощения при наличии на ее поверхности частицы углерода приводит к сильному локальному нагреву, протеканию химических реакций между частицей и подложкой и в конечном итоге – к необратимым повреждениям самой подложки.

Заключение

Проведено расчетно-экспериментальное исследование теплофизических, оптических и химических процессов, происходящих с углеродными частицами, находящимися на поверхности кварцевой подложки в инертной газовой среде и облучаемых непрерывным ЛИ интенсивностью в диапазоне от $0,35$ до $3,5 \text{ кВт/см}^2$.

При лазерном облучении плотностью мощности менее $1,5\text{--}1,75 \text{ кВт/см}^2$ частицы углерода на кварце монотонно нагреваются до стационарной температуры как химически инертные объекты. Повреждения поверхности кварцевой подложки при этом не происходит. При плотности мощности в исследованном диапазоне от $1,75$ до $3,5 \text{ кВт/см}^2$ наблюдалось двустадийное изменение температуры углеродной частицы. На начальной стадии процесса температура частицы за $1\text{--}3$ с достигала $2200\text{--}3000^\circ\text{C}$, затем резко уменьшалась до стационарного уровня $\sim 1400\text{--}1600^\circ\text{C}$ и держалась такой в течение всего оставшегося времени облучения. Сама частица исчезала, а на подложке образовывалась зона повреждения практически по всей зоне лазерного пятна с образованием кратера, центр которого совпадал с центром частицы.

Обнаруженный эффект резкого уменьшения температуры частицы углерода после ее лазерного нагрева свыше $2200\text{--}2400^\circ\text{C}$ может объясняться образованием на кварцевой подложке карбида кремния SiC. Карбид кремния, являясь полупроводником, обладает существенно меньшим коэффициентом поглощения и нагревается в поле ЛИ до меньшей температуры. Синтез карбида кремния при лазерном нагреве углерода на кремниевой подложке подтверждается совпадением спектров ФЛ образовавшегося продукта (карбида кремния) и промышленного карборунда.

С использованием программного модуля комплекса ЛОГОС–ЛОГОС-Тепло проведено численное моделирование процесса взаимодействия ЛИ с частицей углерода, находящейся на прозрачной подложке из кварца. Разработанная расчетная модель учитывает изменение теплофизических и оптических параметров среды вследствие химической реакции между углеродом и кварцем посредством изменения размеров областей поглощения, коэффициентов поверхностного поглощения и времени реакции образования карбида кремния. Получено удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных результатов.

Полученные результаты могут быть полезны для понимания механизма повреждения запяленных оптических элементов в поле мощного ЛИ.

Список литературы

1. Букатый В. И., Суторихин И. А., Шайдук А. М. Исследование динамики горения углеродной частицы в поле излучения CO₂ лазера // ФГВ. 1983. Т. 19. С. 73–78.
2. Букатый В. И., Сагалаков А. М., Тельнихин А. А. Горение углеродных частиц в мощном оптическом поле // Там же. 1979. Т. 15. С. 46–50.
3. Букатый В. И., Суторихин И. А., Шайдук А. М. Температура поверхности углеродных частиц в поле мощного лазерного излучения // ТВТ. 1986. Т. 24, № 5. С. 1004–1007.
4. Букатый В. И., Жданов Е. П., Шайдук А. М. О горении аэрозольных частиц в поле электромагнитного излучения // ФГВ. 1982. Т. 18, № 3. С. 56–59.
5. Калинин В. В., Орловская С. Г., Гулеватая О. Н. Высокотемпературный тепломассообмен нагреваемой лазерным излучением углеродной частицы с учетом стефановского течения на ее поверхности // Сб. «Физика аэродисперсных систем». Одесса: Астропринт, 2001. С. 158–168.
6. Brown A., Oglosa A., Taylor L. Continuous-wave laser damage and conditioning of particle contaminated optics // Appl. Opt. 2015. Vol. 54, N 16. P. 5216–5222.
7. Brown A., Oglosa A., Olson K. Continuous-wave laser particle conditioning: thresholds and time scales // Optics & Laser Technology. 2017. Vol. 89. P. 27–30.
8. Мазанов В. А., Макейкин Е. Н., Русин С. А. и др. Многоканальная спектрально-пирометрическая методика определения яркостной температуры поверхности тел // Сб. тр. V Всероссийской школы для студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов по лазерной физике и лазерным технологиям. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 211–218.
9. Мазанов В. А., Макейкин Е. Н., Маркин С. В. и др. Взаимодействие излучения ХКИЛ с углеродными материалами // Там же. С. 218–226.
10. Свет Д. Я. Объективные методы высокотемпературной пирометрии при непрерывном спектре излучения. М.: Наука, 1968.
11. Брамсон М. А. Инфракрасное излучение нагретых тел. М.: Наука, 1964.
12. Klinger N., Strauss E. L., Komarek K. L. Reactions between silica and graphite // J. Amer. Ceram. Soc. 1966. Vol. 49. P. 369–374.
13. Глинка Р. Л. Общая химия. М.: Химия, 1976.
14. Зайдель А. Н., Прокофьев В. К., Майский С. М. и др. Таблицы спектральных линий. М.: Наука, 1977.
15. Григорьева И. С., Мейлихова Е. З. Физические величины: Справочник. М.: Энергоиздат, 1991.
16. Кутателадзе С. С., Боришанский В. М. Справочник по теплопередаче. М.: Государственное энергетическое изд-во, 1958. С. 320–340.
17. Kahar S. M., Voon C. H., Lee C. C. Synthesis of SiC nanowhiskers from graphite and silica by microwave heating // Materials Science-Poland. 2016. 34(4). P. 770–779.

18. Vix-Guterl C., Alix I., Ehrburger P. Synthesis of tubular silicon carbide (SiC) from a carbon-silica material by using a reactive replica technique mechanism of formation of SiC // Acta Materialia. 2004. Vol. 52. P. 1639–1651.

Dynamics of Transformation of the Carbon Particle on the Quartz Substrate in the Laser Field

**D. S. Timaev, Y. A. Adamenkov, S. A. Buyko, E. A. Kudryashov, V. A. Mazanov,
E. N. Makeykin, S. V. Markin, A. S. Melechin, V. G. Rogachev, A. V. Sirenko**

Results of settlement pilot studies of laser heating of particles of carbon (graphite) by the size ~500 microns located on a quartz substrate in inert environments of nitrogen and argon in the range of intensivity of laser radiation from 0,35 kW/cm² to 3,5 kW/cm² are given. Temperature of particles in the field of influence of laser radiation is experimentally taken. It is shown that heating of particles of carbon leads to damage of a surface of a quartz substrate practically on all zone of a laser spot with formation of a crater which center coincides with the center of a particle. With use, the program LOGOS complex developed in Federal State Unitary Enterprise RFYaTs-VNIIEF numerical modeling of process of interaction of laser radiation with the particle of carbon (graphite) which is on a substrate from quartz is carried out. The received results indicate existence of chemical reaction between carbon and quartz with possible formation of a layer of carbide of silicon (SiC) on a substrate surface.

УДК 536.49+519.673

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_106

Повреждение запыленных оптических элементов в поле непрерывного лазерного излучения

И. Н. Деркач, Е. А. Кудряшов,
Г. Н. Качалин, Н. А. Кирдяев,
В. В. Ладейщикова, Д. С. Тимаев

Приведены результаты экспериментов и численного моделирования по воздействию непрерывного лазерного излучения высокой интенсивности на оптические элементы, при котором наблюдалось повреждение образца. С использованием разработанного в РФЯЦ-ВНИИЭФ программного комплекса ЛОГОС проведено численное моделирование процессов по воздействию непрерывного лазерного излучения высокой интенсивности на запыленные оптические элементы, при котором наблюдалось повреждение образца.

Введение

Поведение частиц пыли в поле мощного лазерного излучения представляет большой научный и практический интерес, так как при нагреве частиц до высокой температуры (сотни и тысячи градусов) появляется возможность для интенсивного протекания различных физико-химических процессов.

В работах [1, 2] исследовался лазерный нагрев частиц различной химической природы, нанесенных на зеркальную подложку из слоев оксидов кремния и оксидов металлов, находящихся в воздушной среде. В этих работах описаны физические процессы, протекающие при взаимодействии непрерывного лазерного излучения с частицами, абсорбированными на мало поглощающей оптической поверхности.

В данной работе проведено исследование влияния наличия частиц пыли на поверхности оптического элемента в поле непрерывного лазерного излучения. Такой экспериментальный подход показал, что в этих условиях высокотемпературный нагрев частицы, находящейся в контакте

с поверхностью кварца, приводит к повреждению поверхности образца с образованием глубокого кратера, центр которого совпадает с центром частицы.

1. Эксперимент

1.1. Экспериментальная установка

Экспериментальные исследования по воздействию непрерывного лазерного излучения ближнего ИК диапазона на оптические элементы были проведены на экспериментальном стенде, принципиальная схема которого представлена на рис. 1.

Стенд (см. рис. 1) включал в себя: кювету лазера с источником накачки, систему формирования излучения генерации (резонатор), систему измерения параметров лазерного излучения, оптическую систему формирования пространственных и угловых характеристик лазерного излучения на исследуемом оптическом элементе.

Для поддержания требуемой выходной мощности лазерного излучения на постоянном уровне торцевое зеркало резонатора устанавливалось в оправу корректора наклонов заднего зеркала резонатора, управляемый по заданному алгоритму для поддержания максимума мощности [3, 4].

На систему измерения выходных параметров генерации лазерного излучения часть излучения отводилась кварцевым клином. Для компенсации углового увода луча в оптическую схему устанавливался дополнительный клин, с разворотом на угол 180° относительно оси лазерного излучения. Обе грани второго клина были просветлены на длину волны лазерного излучения. По результатам измерений отражение от просветленной поверхности не превышало 0,2 %.

Измерение мощности генерации проводилось с помощью термоэлектрического измерителя мощности OPHIRFL500A с воздушным охлаждением и точностью измерения $\pm 3\%$.

В эксперименте в качестве оптического элемента была выбрана пластина из кварца КУ (ГОСТ 15130-86) диаметром 50 мм и толщиной 16 мм.

Зависимость интенсивности излучения на оптическом элементе от времени представлена на рис. 2. Время облучения t составляло ≈ 100 с.

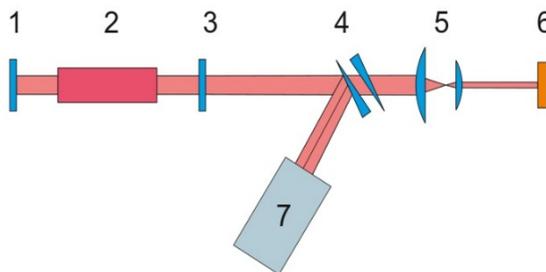


Рис. 1. Принципиальная схема экспериментального стенда по исследованиям воздействия лазерного излучения на оптические элементы: 1, 3 – торцевое и выходное зеркала резонатора, 2 – активная среда лазера с источником накачки, 4 – два клина, установленные в положении компенсации углового увода оптической оси лазерного излучения, 5 – перестраивающая оптическая система, 6 – исследуемый оптический элемент, 7 – система измерения параметров лазерного излучения

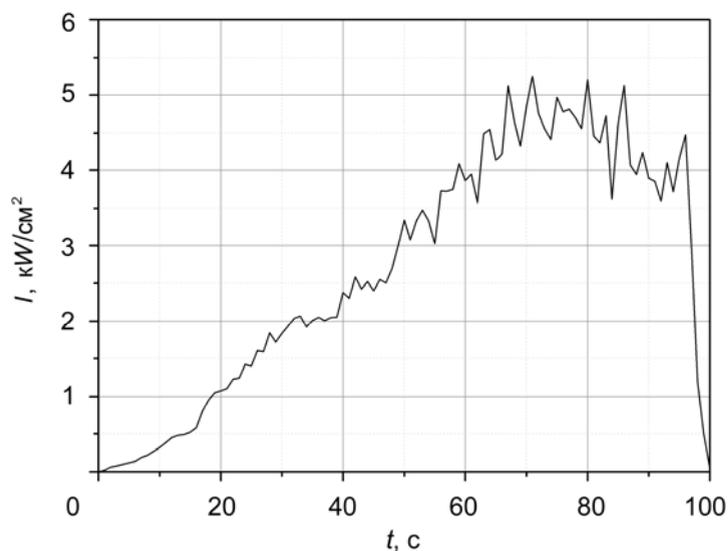


Рис. 2. Зависимость интенсивности лазерного излучения на образце от времени

1.2. Результаты эксперимента

В результате проведения экспериментов были получены следующие результаты, представленные на рис. 3–5. На рис. 3, 4 приведены изображения, полученные на профилометре Nano Cam Sq с областью захвата $S=1 \times 1$ мм. На рис. 5 приведена фотография области повреждения образца.

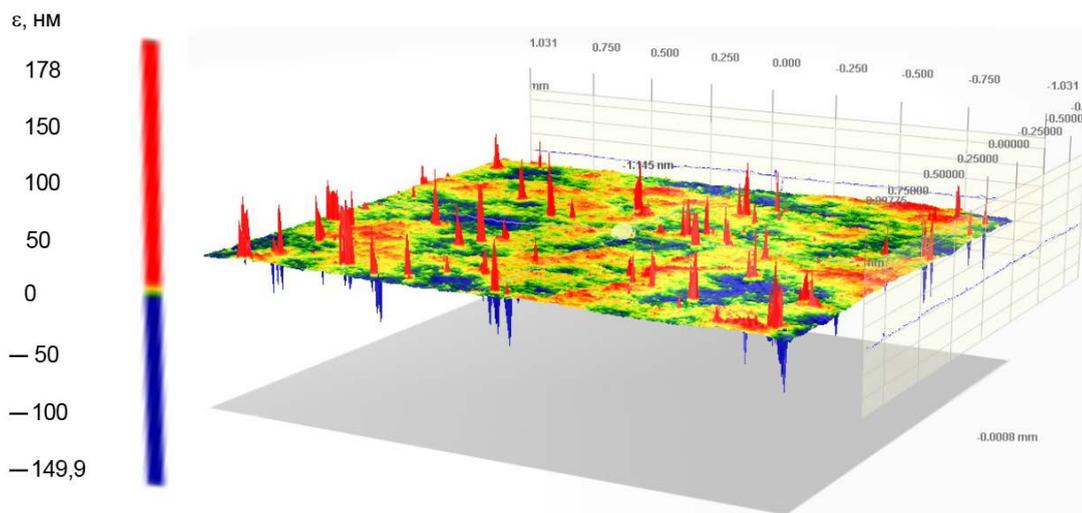
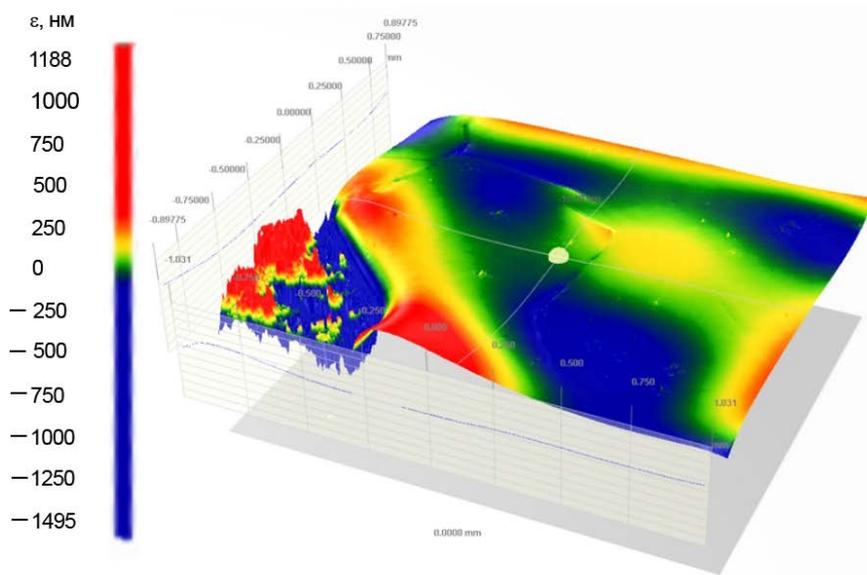
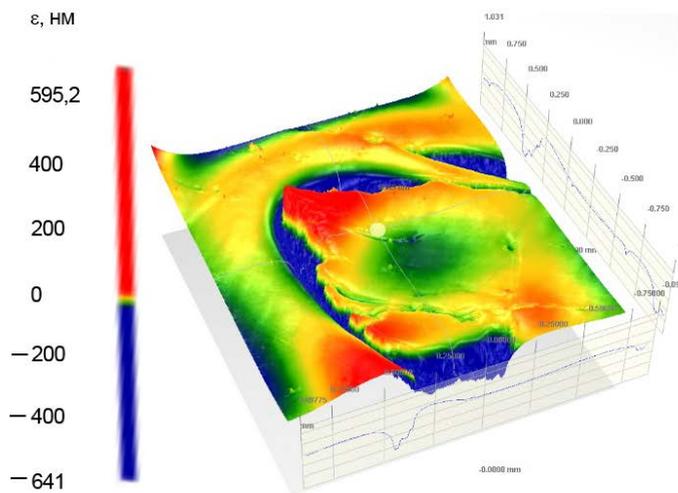


Рис. 3. Профиль участка поверхности оптического элемента до воздействия



а



б

Рис. 4. Профиль участка поверхности оптического элемента после воздействия: а – минимальные повреждения, б – максимальные повреждения



Рис. 5. Характер повреждения оптического элемента

Из рис. 4 видны характерные размеры повреждений и их форма. Из рис. 5 следует, что форма повреждения ОЭ представляет собой усеченный конус. Было выдвинуто предположение, что такой характер повреждения мог быть получен из-за попадания пыли на поверхность оптического элемента с возможным размером $d \approx 10 - 200$ мкм. Для проверки предположения была использована расчетная модель, позволяющая описывать взаимодействие лазерного излучения с поверхностью ОЭ.

2. Численное моделирование

2.1. Постановка задачи и расчетная модель

Исходя из условий эксперимента, модельный запыленный оптический элемент, через который проходило непрерывное лазерное излучение, представлял собой диск с плоскопараллельными торцами, изготовленный из кварца с малым коэффициентом поглощения. На рис. 6 представлены геометрия задачи и фрагмент расчетной сетки.

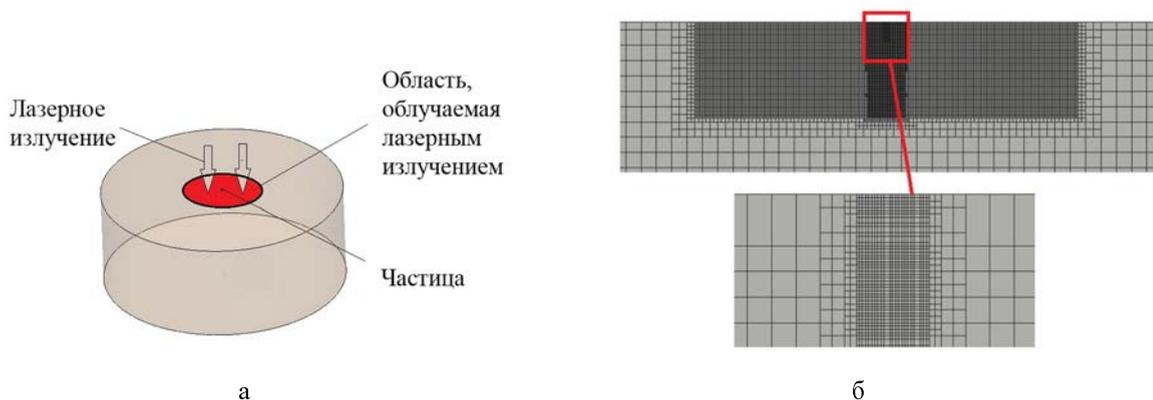


Рис. 6. Геометрическая модель исследуемого образца (а) и фрагмент расчетной сетки (б)

Кварцевая подложка имела радиус $R = 25$ мм и толщину $L = 16$ мм. В расчетах использовались теплофизические характеристики плавленого кварца, приведенные в работе [5]. Частица моделировалась диском заданного радиуса. Такая постановка была принята для упрощения построения расчетной модели и соответствующей ей сетки. Частица располагалась в центре кварцевой подложки. Возможные размеры частиц, остающихся после очистки или попавших случайным образом, составляют порядка от 10 до 200 мкм. Величину q в рамках расчета варьировали в пределах от 1 до 10 кВт/см². Считалось, что частица полностью поглощает падающий на нее тепловой поток. Время воздействия составляло: $t = 100$ с.

2.2. Расчет для отдельной микрочастицы

Как говорилось ранее, частица моделировалась в виде бесконечно тонкого диска с известным радиусом. Для моделирования были выбраны радиусы $r_{\text{part}} = 50, 75, 100, 150$ и 200 мкм. В рамках задачи считалось, что коэффициент поглощения такой микрочастицы равен 1. Соответственно, на область частицы накладывалось граничное условие «тепловой поток». Были смоделированы значения плотности мощности лазерного излучения от 1 до 10 кВт/см^2 . Когда значение температуры на границе частицы достигает значения температуры плавления (критический поток для данного размера частицы), область, где коэффициент поглощения равен единице, начинает расширяться, т. е. площадь падения теплового потока увеличивается. Чтобы учесть данный факт в рамках нашего расчета, на область за вычетом частицы нашего образца было задано граничное условие «тепловой поток» в виде следующей формулы:

$$\text{If } (T > T_{\text{pl}}), \text{ then } q_f = q, \text{ else } q_f = 0, \quad (1)$$

где T_{pl} – температура плавления кварца, q – плотность теплового потока. Данная формула представляет собой условную конструкцию *if*, т. е. если $(T > T_{\text{pl}})$ величина теплового потока равна q , а иначе 0.

Данное условие на каждом расчетном шаге проверяет значение температуры в центре ячейки. И как только значение больше указанного, тепловой поток будет падать на область $r_{\text{part}} + 1$ ячейка, и т. д. Необходимо заметить, что в расчете также учитывалось объемное поглощение лазерного излучения, так как стекло не может полностью пропускать излучение. Данное условие накладывалось на область падения потока при $r_{\text{part}} < r < 2$ см при помощи формулы

$$\text{If } (r_{\text{part}} < r < 0,02), \text{ then } Q_v = Q, \text{ else } Q_v = 0, \quad (2)$$

где Q – объемный источник энерговыделения. Данная формула представляет собой условную конструкцию *if*, т. е. если $(0,00005 < r < 0,02)$ величина объемного источника равна Q , а иначе 0.

Область частицы исключалась в силу того, что учитывалось условие объемного поглощения. Все расчеты проводились с использованием программного комплекса ЛОГОС (версия 5. Свидетельство № 2017612306 от 20.02.2017).

В случае когда на частицу падает критический для текущего размера поток, площадь области с коэффициентом поверхностного поглощения больше 0 начинает постепенно увеличиваться. Вследствие этого растет температура и значение достигает порядка T_{pl} , а затем и T_{sat} . Тогда оптический элемент начинает разрушаться. На данный момент в программе реализован лишь один последовательный фазовый переход, поэтому был реализован процесс сублимации кварцевого стекла. Но можно смоделировать процесс плавления искусственным образом, задав свойства кварца в зависимости от температуры в следующем виде:

$$\text{If } (T \Leftarrow T_{\text{pl}}), \text{ then } C(\lambda) = C_{\text{s.ph}}(\lambda_{\text{liq.ph}}), \text{ else } C(\lambda) = C_{\text{liq.ph}}(\lambda_{\text{liq.ph}}), \quad (3)$$

где T_{pl} – температура плавления кварца, $C_{\text{s.ph}}(\lambda_{\text{s.ph}})$ – теплофизические свойства кристаллической фазы, $C_{\text{liq.ph}}(\lambda_{\text{liq.ph}})$ – теплофизические свойства жидкой фазы. Данная формула представ-

ляет собой условную конструкцию if, т. е. если ($T \leftarrow T_{pl}$) используются теплофизические свойства твердой фазы кварца, а иначе жидкой.

Чтобы смоделировать тот факт, что при фазовом переходе часть сетки как бы улетучивается в виде газа, в параметрах фазового перехода задавался коэффициент теплопроводности стремящимся к бесконечности, а коэффициент теплоемкости – стремящимся к нулю. Температура фазового перехода $T_{t,ph} = 4500$ К, удельная теплота фазового перехода $\mu = 1750$ кДж/кг. Были рассмотрены различные варианты размера частицы и значений плотности мощности теплового потока. Были получены следующие результаты, представленные на рис. 7–9.

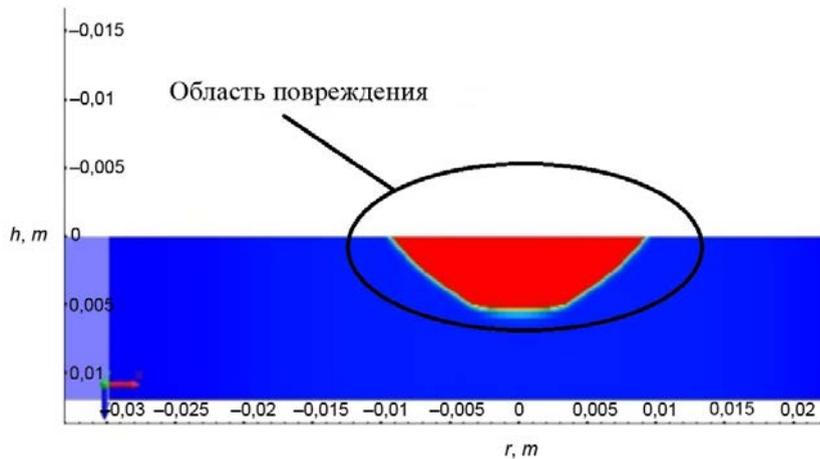


Рис. 7. Характер повреждения оптического элемента в сечении плоскостью XZ при $r_M = 50$ мкм, $q = 8$ кВт/см² на момент времени 24,7 с

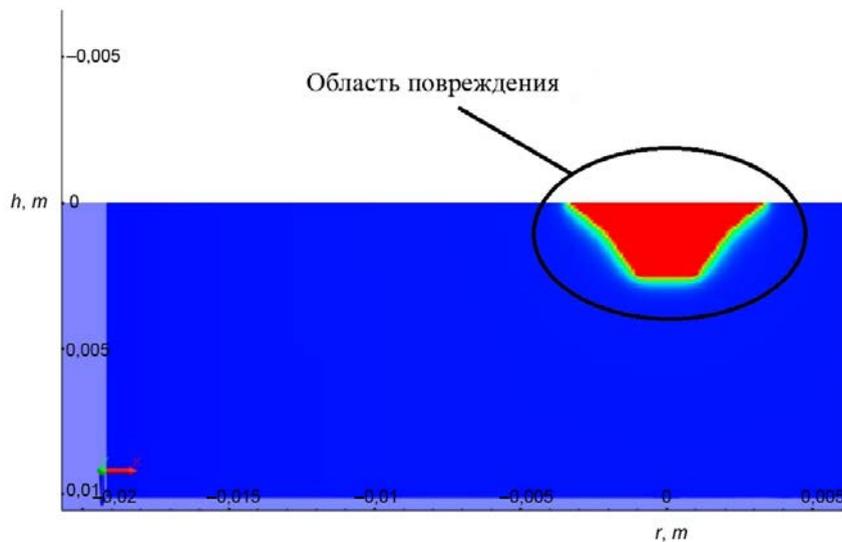


Рис. 8. Характер повреждения оптического элемента в сечении плоскостью XZ при $r_M = 75$ мкм, $q = 5$ кВт/см² на момент времени 27,6 с

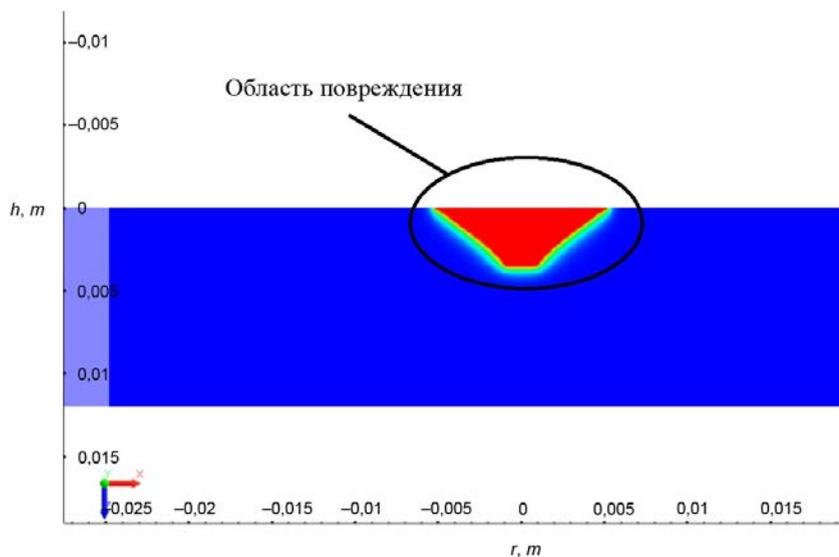


Рис. 9. Характер повреждения оптического элемента в сечении плоскостью XZ при $r_M = 150$ мкм, $q = 3$ кВт/см² на момент времени 2,5 с

Из рис. 7–9 видно, что происходит повреждение исследуемого образца, а именно – проплавление. Для различных входных параметров r_{part} , q характер проплавленной области схож и представляет собой усеченный конус, что хорошо согласуется с картиной, наблюдаемой в эксперименте. Данный расчет показал, что даже небольшого размера частица способна привести к необратимым повреждениям оптического элемента при прохождении через него лазерного излучения.

Заключение

С использованием программного комплекса ЛОГОС рассчитаны поля температур для различных размеров частиц и значений плотности мощности лазерного излучения.

Характер повреждения оптического элемента в эксперименте хорошо согласуется с расчетным и представляет собой усеченный конус, что указывает на разумную точность расчетов.

Полученные результаты могут служить дополнением при разработке нормативных документов, устанавливающих допустимую величину и концентрацию пыли на поверхностях оптических элементов, работающих в системах непрерывных лазеров.

Список литературы

1. Brown A., Oglosa A., Taylor L. Continuous-wave laser damage and conditioning of particle contaminated optics // *Appl. Opt.* 2015. Vol. 54, N 16. P. 5216–5222.
2. Brown A., Oglosa A., Olson K. Continuous-wave laser particle conditioning: thresholds and time scales // *Optics & Laser Technology*. 2017. Vol. 89. P. 27–30.
3. Garanin S., Khokhlov S., Manachinsky A., Starikov F. Adaptive optical systems in Russian Federal Nuclear Center-VNIIEF with different control principles // *Advances in Science and Technology*. 2013. Vol. 82. P. 75–84.
4. Гаранин С. Г., Маначинский А. Н., Стариков Ф. А., Хохлов С. В. Фазовая коррекция лазерного излучения с помощью адаптивных оптических систем в РФЯЦ-ВНИИЭФ // *Автометрия*. 2012. 48, № 2. С. 30–37.
5. Михеев М. А., Михеева И. М. Основы теплопередачи. М.: Энергия, 1967.

Damage of Dusty Optical Elements in the Field of Continuous Laser Radiation

**I. N. Derkach, E. A. Kudryashov, G. N. Kachalin, N. A. Kirdyayev,
V. V. Ladeyshikova, D. S. Timaev**

Results of experiments and numerical modeling on impact of continuous laser radiation of high intensity on optical elements at which it was observed damage of a sample are given. With use, the program complex LOGOS developed in Federal State Unitary Enterprise RFYaTs-VNIEF numerical modeling of processes on impact of continuous laser radiation of high intensity on dusty optical elements at which it was observed damage of a sample is carried out.

УДК 517.9, 519.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_116

Фазовый метод решения задачи на собственные значения для уравнения Дирака

М. А. Вронский, В. М. Повышев,
С. Ю. Полякова, Е. С. Столмакова

Представлен новый вариант фазового метода решения задачи на собственные значения для радиального уравнения Дирака. Потенциал предполагается имеющим кулоновскую особенность в нуле. Метод применим как для полубесконечного, так и для конечного интервала. Для нахождения решения вблизи нуля используется его представление как решения интегрального уравнения Вольтерра. Алгоритм нахождения собственных значений строится на основе доказанной теоремы сравнения. Указана связь между квантовыми числами состояния и значениями фазовой функции на правой границе интервала. Отмечены проблемы построения собственных функций, описаны два способа их решения. Приведены результаты тестовых расчетов.

Введение

Задача на собственные значения для уравнения второго порядка – предмет большого количества как теоретических, так и прикладных исследований (см., например, работы [1, 2]). В учебной литературе содержится целый ряд способов ее численного решения (см., например, [3]). Задача на собственные значения для одномерного уравнения Шрёдингера возникает при нахождении стационарных состояний нерелятивистского электрона в центральном потенциале. Классические подходы к ее решению представлены в работе [4], однако из-за плохой обусловленности задачи в нуле и на бесконечности эти подходы являются довольно затратными. В работе [5] был разработан достаточно удобный вариант так называемого фазового метода решения задачи на собственные значения для радиального уравнения Шрёдингера (см. также его некоторую модернизацию в работе [6]).

В тяжелых ядрах одноэлектронные состояния лучше описываются релятивистским уравнением Дирака. Однако, даже для алюминия (с зарядом ядра $Z = 13$) отличие энергий $1s$ -состояния по уравнениям Шрёдингера и Дирака с кулоновским потенциалом составляет ~ 5 эВ, что заметно больше ошибок определения положений спектральных линий в современных экспериментах. В работе [7] (см. также [8]) предложено решать задачу на собственные значения для уравнения

Дирака с помощью его преобразования к уравнению типа Шрёдингера для одной из компонент волновой функции с последующим применением для его решения фазового метода. Вместе с тем такое преобразование приводит к нелинейной зависимости эффективного потенциала от энергии, что усложняет поиск собственных значений. Кроме того, получаемый эффективный потенциал зависит от первой и второй производных исходного потенциала, а также, как отмечено в работе [9], он не имеет отчетливого физического смысла (впрочем, см. [10, 11]).

В настоящей статье предлагается альтернативный вариант фазового метода решения задачи на собственные значения для радиального уравнения Дирака, получаемого при разделении переменных в уравнении Дирака для трехмерной сферической атомной ячейки радиусом x_j и центрально-симметричного потенциала (см., например, [12, формулы (2.122), (2.123), с. 56])

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} f(x) \\ g(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\kappa/x & -2\alpha^{-1} - \alpha(\varepsilon + V(x)) \\ \alpha(\varepsilon + V(x)) & \kappa/x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(x) \\ g(x) \end{pmatrix}, \quad x \in (0, x_j), \quad (1)$$

где $f(x)$, $g(x)$ – большая и малая компоненты волновой функции; $\varepsilon \geq -\alpha^{-2}$ – энергия, отсчитываемая от энергии покоя электрона α^{-2} . В уравнении (1) и далее используем атомные единицы $\hbar = m = e = 1$; $\alpha = 1/137,036$. Считаем заданными квантовое число Дирака $\kappa \in Z \setminus \{0\}$ и потенциал $V(x)$ для $x \in (0, x_j)$, удовлетворяющий ограничениям:

$$\begin{aligned} xV(x) &\rightarrow Z \text{ при } x \rightarrow 0; & V(x) &\rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow x_j; \\ \exists M > 0: & \int_0^M |W(x)| dx < \infty, & \text{ где } W(x) &= V(x) - \frac{Z}{x}. \end{aligned} \quad (2)$$

Допускается как $x_j < \infty$, так и $x_j = \infty$ (свободный атом). Для первого случая требуется явное задание граничного условия при $x = x_j$.

Перечислим основные отличия настоящей работы от других работ по данной тематике.

1. Используемое определение фазы приводит к уравнению, свободному от неоднозначно определяемых функций (например, функции a в работах [5, 6]).

2. Получаемое фазовое уравнение, в отличие от предлагаемого в работах [7, 8], не содержит производных от исходного потенциала. Для этого уравнения доказывается теорема сравнения, которая далее используется для нахождения собственных значений и построения собственных функций.

3. Для предлагаемого выбора фазы проясняется суть граничных условий, также устанавливается их важная связь с квантовыми числами состояний. Нахождение регулярного решения (1) в окрестности нуля сводится к решению уравнения Вольтерра.

4. Фазовое уравнение решается с автоматическим выбором шага.

5. Собственные значения ищутся простым и надежным методом дихотомии.

Предлагаемый подход идеологически близок методу фазовых функций в задаче рассеяния (т. е., по сути, задаче нахождения состояний непрерывного спектра для уравнений Шрёдингера и Дирака, см. [9, 13]). Другие варианты фазового метода решения этой задачи рассматривались в работах [14, 15]. При этом в последней работе в качестве основного рассматривалось нелинейное уравнение второго порядка для амплитуды. По мнению авторов, это менее удобно.

1. Постановка задачи на собственные значения для уравнения Дирака

Для постановки задачи на собственные значения необходимо задать граничные условия (см., например, [1, 16]).

Обычный для учебников по квантовой механике (см., например, [12]) способ задания граничных условий для свободного атома ($x_{\text{я}} = \infty$) вытекает из требуемой по физическим соображениям квадратичной интегрируемости решения

$$\int_0^{\infty} (f(x)^2 + g(x)^2) dx < \infty.$$

Для нуля, оставляя в правой части (1) только главные члены асимптотики при $x \rightarrow 0$, не сложно показать, что два линейно независимых решения полученного уравнения пропорциональны $x^{\pm\gamma}$, т. е.

$$C_{\pm} x^{\pm\gamma} \begin{pmatrix} -\alpha Z \\ \kappa \pm \gamma \end{pmatrix}, \quad \gamma = \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2 Z^2}, \quad (3)$$

где C_{\pm} – произвольные константы. При $Z < \alpha^{-1} \sqrt{3/2} \approx 118,7^1$ решение, ведущее себя в нуле как $x^{\pm\gamma}$, не является квадратично интегрируемым. Отсюда ясно, что регулярному решению в нуле соответствует формула из (3) со знаком «+».

Для получения граничных условий на бесконечности, оставив в правой части (1) только главные члены асимптотики при $x \rightarrow \infty$, найдем, что два линейно независимых решения полученного уравнения с постоянными коэффициентами имеют вид

$$C_{\pm} e^{\pm kz} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \alpha \varepsilon / k \end{pmatrix}, \quad k = \sqrt{-\varepsilon(2 + \alpha^2 \varepsilon)}, \quad (4)$$

при этом квадратичная интегрируемость решения означает, что $\varepsilon < 0$ и решение пропорционально ε^{-kz} .

Получение граничного условия в нуле для (1) допускает более аккуратное обоснование, аналогичное представленному в работах [6, 13] для уравнения Шрёдингера, а именно: регулярное в нуле решение уравнения (1) дается соотношениями $f(x) = x^{\gamma} u(x)$, $g(x) = x^{\gamma} v(x)$, где $(u(x), v(x))^T$ – решение уравнения типа Вольтерра

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha Z \\ \gamma + \kappa \end{pmatrix} + \int_0^x K(s, x) \begin{pmatrix} u(s) \\ v(s) \end{pmatrix} ds, \quad (5)$$

¹ В данной работе рассматриваются только такие ядра: они охватывают подавляющую часть потребностей при моделировании астрофизической и лабораторной плазмы. Иногда такие ядра называют субкритическими. Для ядер с $Z > 118,7$ требуются дополнительные соображения по постановке граничных условий в нуле. В работе [17] фазовый метод применен для нахождения спектров водородоподобных атомов с надкритическими ($Z > 137$) ядрами.

$$K(s, x) = \frac{1}{2\alpha Z \gamma} \begin{pmatrix} -\alpha Z & \alpha Z \\ \gamma + \kappa & \gamma + \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (s/x)^{2\gamma} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa - \gamma & \alpha Z \\ \kappa + \gamma & \alpha Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -2\alpha^{-1} - \alpha(\varepsilon + W(s)) \\ \alpha(\varepsilon + W(s)) & 0 \end{pmatrix}$$

(вывод этого уравнения приведен в Приложении 1). Видно, что такое преобразование уменьшает степень сингулярности в нуле.

Решение (5) можно получить с помощью ряда Лиувилля–Неймана. Его равномерную сходимость легко обосновать стандартным способом при ограниченности ядра $K(s, x)$ на $[0, M] \times [0, M]$. При расчете использовалось несколько членов ряда Лиувилля–Неймана для получения приближенных значений $u(x), v(x)$, умножение которых на x^γ давало $f(x), g(x)$ для регулярного в нуле решения (1).

Если $x_{\text{я}} < \infty$, то граничные условия при $x = x_{\text{я}}$ будем считать заданными в виде

$$f(x_{\text{я}}) \cos p + g(x_{\text{я}}) \sin p = 0 \quad (6)$$

для некоторого p . Например, в таком виде можно записать часто используемое условие $f(x_{\text{я}}) = 0$ ($p = 0$) либо условие «MIT bag model»

$$f(x_{\text{я}}) = g(x_{\text{я}}) \Leftrightarrow p = -\frac{\pi}{4}, \quad (7)$$

предложенное для устранения проблем, связанных с парадоксом О. Клейна (см. [12, с. 208]).

Еще один распространенный способ постановки граничного условия вытекает из условия зануления тока электрона на границе сферической атомной ячейки. Однако, для такого условия получаются (Приложение 2) два набора состояний: $f(x_{\text{я}}) = 0$ ($p = 0$) и $g(x_{\text{я}}) = 0$ ($p = \pi/2$), и состояния из разных наборов не являются ортогональными.

Условием вида (6) легко аппроксимировать и регулярное поведение для случая задачи на $(0, \infty)$. Действительно, экспоненциально убывающее решение из (4) удовлетворяет соотношению

$$\frac{f(x)}{g(x)} = -\frac{k}{\alpha \varepsilon} \Rightarrow f(x) + \frac{k}{\alpha \varepsilon} g(x) = 0 \quad (8)$$

Выбирая конечное, достаточно большое $\bar{x}_{\text{я}}$ (например, $10k^{-1}$) и задавая граничное условие (8) при $x = \bar{x}_{\text{я}}$, получаем решение задачи на полубесконечном интервале.

2. Переход к уравнениям для фазы и амплитуды

Для произвольной линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\begin{pmatrix} f' \\ g' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$$

и заданного числа q введем фазовую функцию φ такую, что $\operatorname{ctg} \varphi = qf/g$. Она, как легко проверить, удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\varphi' = \frac{\sin(2\varphi)}{2} (d - a) + \frac{c}{q} \cos^2 \varphi - qb \sin^2 \varphi.$$

В дополнение к полученному уравнению запишем уравнение для амплитуды $A = (q^2 f^2 + g^2)^{1/2}$

$$\begin{aligned} (\ln A)' &= \frac{q^2 f f' + g g'}{q^2 f^2 + g^2} = \frac{q^2 (af^2 + bfg) + c f g + d g^2}{q^2 f^2 + g^2} = \frac{a \operatorname{ctg}^2 \varphi + bq \operatorname{ctg} \varphi + c/q \operatorname{ctg} \varphi + d}{\operatorname{ctg}^2 \varphi + 1} = \\ &= a \cos^2 \varphi + bq \cos \varphi \sin \varphi + \frac{c}{q \sin \varphi \cos \varphi} + d \sin^2 \varphi = \frac{a+d}{2} + \frac{a-d}{2} \cos(2\varphi) + \frac{bq + c/q}{2} \sin(2\varphi). \end{aligned}$$

Применив полученные для φ и A выражения к уравнению Дирака (1) и взяв функцию φ с $q = \alpha Z$, получим²

$$\varphi'(x) = \frac{\kappa}{x} \sin(2\varphi(x)) + Z^{-1} (\varepsilon + V(x)) \cos^2 \varphi(x) + [2Z + \alpha^2 Z (\varepsilon + V(x))] \sin^2 \varphi(x); \quad (9)$$

$$(\ln A(x))' = -\frac{\kappa}{x} \cos(2\varphi(x)) - \frac{1}{2} [2Z + \alpha^2 Z^2 (\varepsilon + V(x)) - Z^{-1} (\varepsilon + V(x))] \sin(2\varphi(x)). \quad (10)$$

Исходные большая и малая компоненты волновой функции выражаются через фазовую и амплитудную функции по формулам

$$f(x) = \frac{A(x)}{\alpha Z} \cos \varphi(x); \quad g(x) = A(x) \sin \varphi(x). \quad (11)$$

3. Граничные условия для фазовой функции

Регулярное решение уравнения Дирака (1) связано с решением уравнения Вольтерра (5), поэтому

$$\operatorname{ctg} \varphi(x, \varepsilon) = \frac{\alpha Z f(x)}{g(x)} = \frac{\alpha Z u(x)}{v(x)} \rightarrow \gamma - \kappa \text{ при } x \rightarrow 0.$$

² Функции φ и A также зависят от параметра ε . Всюду, где это не существенно, ε опускается.

Таким образом, в качестве граничного условия в нуле для фазового уравнения можно взять

$$\varphi(0, \varepsilon) = \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa).$$

Для начала интегрирования нужно выйти из особой точки $x = 0$, для чего можно найти $u(x_1)$, $v(x_1)$ из (5) для некоторого $x_1 > 0$, и взять $\varphi(x_1, \varepsilon) = \operatorname{arccctg} \frac{\alpha Z u(x_1)}{v(x_1)}$.

Граничное условие справа имеет вид (7). Оно преобразуется в выражение

$$\operatorname{ctg} \varphi(x_\pi) = -\alpha Z \operatorname{tg} p, \quad \text{или} \quad \varphi(x_\pi) = \operatorname{arccctg}(-\alpha Z \operatorname{tg} p) + \pi m, \quad m \in Z.$$

Важной особенностью перехода от исходной задачи к фазовому уравнению является возможность связать граничное условие справа с радиальным квантовым числом состояния n_r (числом нулей большой компоненты волновой функции внутри интервала $(0, x_\pi)$, отсутствующая напрямую для исходной задачи. Чтобы это показать, заметим, что каждый нуль f соответствует значению $\varphi = \pi/2 + \pi k$, $k \in Z$. В таких точках $\varphi'(x) = 2Z + \alpha^2 Z(\varepsilon + V(x)) > 0$ (рассматривается только электронная часть спектра), т. е. каждое значение $\pi/2 + \pi m$ функция φ принимает не более одного раза. Из непрерывности функции φ вытекает, что n_r равно числу точек вида $\pi/2 + \pi m$, $m \in Z$, в интервале $(\varphi(0), \varphi(x_\pi))$, или

$$n_r = \left[\frac{\operatorname{arccctg}(-\alpha Z \operatorname{tg} p)}{\pi} - \frac{1}{2} + m \right] - \left[\frac{\operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa)}{\pi} - \frac{1}{2} \right] + 1,$$

где $[a] = \min\{k \geq a, k \in Z\}$, $[b] = \max\{k \leq b, k \in Z\}$. Поскольку

$$\gamma - \kappa = \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2 Z^2} - \kappa \in \begin{cases} (0, 2|\kappa|), & \text{если } \kappa < 0; \\ (-|\kappa|, 0), & \text{если } \kappa > 0, \end{cases}$$

то

$$\operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa) \in \begin{cases} (0, \pi/2), & \text{если } \kappa < 0; \\ (\pi/2, \pi), & \text{если } \kappa > 0. \end{cases}$$

Значит, $\left[\frac{\operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa)}{\pi} - \frac{1}{2} \right] = \theta(\kappa)$, где θ – ступенька Хевисайда:

$$\theta(y) = \begin{cases} 1, & \text{если } y > 0; \\ 0, & \text{если } y < 0. \end{cases}$$

Итак,

$$n_r = \left[\frac{\operatorname{arccctg}(-\alpha Z \operatorname{tg} p)}{\pi} - \frac{1}{2} \right] + m - \theta(\kappa) + 1. \quad (12)$$

Для граничного условия (7) с учетом того, что $0 < \alpha Z < 1$ (для параметров, представляющих интерес), для первого слагаемого (12) получим

$$\operatorname{arccctg}(\alpha Z) \in (\pi/4, \pi/2) \Rightarrow \frac{\operatorname{arccctg}(\alpha Z)}{\pi} - \frac{1}{2} \in (-1/4, 0) \Rightarrow \left[\frac{\operatorname{arccctg}(\alpha Z)}{\pi} - \frac{1}{2} \right] = -1.$$

Таким образом, при $p = -\pi/4$ условие (12) запишется как: $n_r = m - \theta(\kappa)$, откуда найдем

$$\varphi(x_r) = \operatorname{arccctg}(\alpha Z) + \pi(n_r + \theta(\kappa)). \quad (13)$$

Интересно отметить, что для задачи на $(0, \infty)$ полученное граничное значение фазовой функции будет соответствовать выбору p с $\operatorname{tg} p = k/(\alpha\varepsilon) < 0$. Действительно, при таком значении p

$$\left[\frac{\operatorname{arccctg}(-\alpha Z \operatorname{tg} p)}{\pi} - \frac{1}{2} \right] = \left[\frac{\operatorname{arccctg}(-Z k/\varepsilon)}{\pi} - \frac{1}{2} \right] = -1,$$

откуда получим аналогичное предыдущему случаю условие $n_r = m - \theta(\kappa)$ и аналогичное (13) выражение

$$\varphi(+\infty) = \operatorname{arccctg}\left(\frac{-Zk}{\varepsilon}\right) + \pi(n_r + \theta(\kappa)).$$

В ряде учебников (см., например, [12], [18]) через n_r обозначается величина, которая в принятых здесь обозначениях равна $n_r + \theta(\kappa)$ и при $\kappa > 0$ не равна числу нулей большой компоненты дираковской водородоподобной орбитали.

4. Теорема сравнения и поиск собственных значений

Второе важное преимущество³ перехода от уравнения Дирака (1) к фазовому уравнению (9) дается следующим результатом для фазовой функции:

Теорема. Пусть $\Phi(x, x_0, \xi, \varepsilon)$ – решение $\varphi(x)$ задачи Коши для фазового уравнения (9) (x_0 считаем фиксированным) с начальным условием $\varphi(x_0) = \xi$. Тогда при $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ и $x \geq x_0 > 0$ выполняется неравенство

$$\Phi(x, x_0, \varphi_2, \varepsilon_2) - \Phi(x, x_0, \varphi_1, \varepsilon_1) \geq \varphi_2 - \varphi_1.$$

Доказательство (в целом, аналогичное приведенному в работе [19, § 25, п. 3] для уравнения Шрёдингера) дано в Приложении 3. Отметим, что теорема родственна классической осцилляционной теореме Штурма.

³ Первое преимущество – «прозрачная» постановка граничных условий в зависимости от квантовых чисел (см. разд. 3).

Следствие. Для $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ и $x_0 > 0$

$$\Phi(x_0; 0, \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa), \varepsilon_2) - \Phi(x_0; 0, \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa), \varepsilon_1) \geq 0.$$

Поскольку $\Phi(x_0; x, \Phi(x; x_0, \varphi_i, \varepsilon_i) \varepsilon_i) = \varphi_i$ ($i=1, 2$), из теоремы вытекает, что при $0 < x \leq x_0$ и $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$

$$\Phi(x; x_0, \varphi_2, \varepsilon_2) - \Phi(x; x_0, \varphi_1, \varepsilon_1) \leq \varphi_2 - \varphi_1.$$

Далее, подставив $\varphi_i = \Phi(x_0; 0, \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa), \varepsilon_i)$, $i=1, 2$ и перейдя к пределу при $x \rightarrow 0$, с использованием непрерывности Φ получим

$$0 = \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa) - \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa) \leq \Phi(x_0; 0, \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa), \varepsilon_2) - \Phi(x_0; 0, \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa), \varepsilon_1)$$

для $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ и $x_0 > 0$.

Переформулируем задачу нахождения собственных значений для уравнения (1): будем искать такие ε , для которых существует решение (9), удовлетворяющее выбранным граничным условиям.

Пусть $0 < x_1 < x^* < x_\gamma$. Полученное следствие эквивалентно тому, что

$$\varphi_1(\varepsilon) = \Phi(x_1; 0, \operatorname{arccctg}(\gamma - \kappa), \varepsilon) \nearrow \text{ по } \varepsilon,$$

откуда по теореме найдем, что $\Phi(x^*; x_1, \varphi_1(\varepsilon), \varepsilon) \nearrow$ по ε . Также из теоремы вытекает, что для заданного $\varphi_\gamma = \varphi_\gamma(n_\gamma, \kappa)$ функция $\Phi(x^*; x_\gamma, \varphi_\gamma, \varepsilon) \searrow$ по ε , и, следовательно,

$$Q(\varepsilon) = \Phi(x^*; x_1, \varphi_1, \varepsilon) - \Phi(x^*; x_\gamma, \varphi_\gamma, \varepsilon) \nearrow \text{ по } \varepsilon.$$

Численно решая уравнение $Q(\varepsilon) = 0$ (например, методом дихотомии), находим искомое ε .

5. Численное интегрирование методами Рунге–Кутты и Розенброка

Здесь и далее будем обозначать через $\widehat{\Phi}(x; x_0, \varphi_0, \varepsilon)$ численное решение задачи Коши для уравнения (9) с начальным условием $\varphi(x_0) = \varphi_0$, а $\widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon)$ – численное решение за один шаг. При нахождении собственных значений численное интегрирование уравнения (9) проводилось двумя способами: стандартным методом Рунге–Кутты четвертого порядка и на основе схемы Розенброка для (1).

Схема Рунге–Кутты для уравнения $\varphi' = F(x, \varphi)$ дает формулу решения на одном шаге:

$$\begin{aligned} \widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) &= \varphi_0 + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad k_1 = hF(x_0, \varphi_0), \quad k_2 = hF\left(x_0 + \frac{h}{2}, \varphi_0 + \frac{k_1}{2}\right), \quad k_3 = \\ &= hF\left(x_0 + \frac{h}{2}, \varphi_0 + \frac{k_2}{2}\right), \quad k_4 = hF(x_0 + h, \varphi_0 + k_3). \end{aligned}$$

Выпишем неявную схему Розенброка [20] для исходного уравнения (1), записанного в виде:

$$\begin{pmatrix} f'(x) \\ g'(x) \end{pmatrix} = D(x) \begin{pmatrix} f(x) \\ g(x) \end{pmatrix}.$$

Численное решение за один шаг определяется по формуле

$$\begin{pmatrix} \widehat{f}(x_0 + h; x_0, f_0, g_0) \\ \widehat{g}(x_0 + h; x_0, f_0, g_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ g_0 \end{pmatrix} + hB(x_0, h) \begin{pmatrix} f_0 \\ g_0 \end{pmatrix},$$

где $B(x_0, h) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = (E - ahD(x_0))^{-1} D(x_0 + ah) [E + ah(E - ahD(x_0))^{-1} D(x_0)]$; E – единичная матрица; $a = 1 - 2^{-1/2}$. Отсюда, пользуясь тем, что

$$\text{ctg} t - \text{ctg} w = -\frac{\text{tg}(t - w)}{\sin^2 w + \sin w \cos w \text{tg}(t - w)},$$

и предположением о малости $\widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) - \varphi_0$, можно получить схему шага для фазовой функции:

$$\widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) = \varphi_0 + \text{arccctg} \frac{h \left[\frac{b_{21}}{\alpha Z} \cos^2 \varphi_0 - \alpha Z b_{12} \sin^2 \varphi_0 + (b_{22} - b_{11}) \cos \varphi_0 \sin \varphi_0 \right]}{1 + h \left[\left(\frac{b_{21}}{\alpha Z} + \alpha Z b_{12} \right) \cos \varphi_0 \sin \varphi_0 + b_{22} \sin^2 \varphi_0 + b_{11} \cos^2 \varphi_0 \right]}. \quad (14)$$

Данная схема будет обладать вторым порядком точности.

6. Автоматический выбор шага

Вид правой части (9) позволяет предположить, что производная фазовой функции в процессе решения может изменяться на несколько порядков. Действительно, тестовые расчеты показали, что типичное решение фазового уравнения имеет почти ступенчатый характер. В связи с этим целесообразно при решении изменять шаг интегрирования, контролируя погрешность на шаге, для чего используется достаточно стандартный метод (см., например, [21, гл. 8, § 3]). Опишем детали его применения.

Погрешность численного интегрирования за один шаг h имеет вид

$$\widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) - \Phi(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) = Ch^{s+1}, \quad (15)$$

где $C = C(x_0, h)$; $s = 4$ для схемы Рунге–Кутты, $s = 2$ для схемы (14). Погрешность за два шага $h/2$ будет равна

$$\widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0 + h/2, \widehat{\Phi}_1(x_0 + h/2, x_0, \varphi_0, \varepsilon), \varepsilon) - \Phi(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) \sim 2C(h/2)^{s+1} + o(h^{s+1}); \quad (16)$$

здесь C – та же, что в погрешности за один шаг. Подстановкой выражения для $\Phi_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon)$ из (16) в (15) получаем, что погрешность интегрирования за один шаг можно приближенно выразить как

$$Ch^{s+1} \approx \Delta = \frac{\widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0, \varphi_0, \varepsilon) - \widehat{\Phi}_1(x_0 + h; x_0 + h/2, \widehat{\Phi}_1(x_0 + h/2; x_0, \varphi_0, \varepsilon), \varepsilon)}{1 - 2^{-s}}.$$

Для решения (9) с автоматическим выбором шага задается малое значение δ_0 (в данном случае взято $\delta_0 = 10^{-3}$), $\delta_1 = \delta_0/2^{s+1}$. Если полученное значение погрешности за один шаг: $|\Delta| < \delta_0 \max(|\varphi_0|, \pi)$, то шаг слишком велик и уменьшается вдвое до тех пор, пока это неравенство выполняется. Если $|\Delta| > \delta_1 \max(|\varphi_0|, \pi)$, то шаг вдвое увеличивается. Если $\delta_1 \max(|\varphi_0|, \pi) \leq |\Delta| \leq \delta_0 \max(|\varphi_0|, \pi)$, то шаг не меняется.

7. Нахождение волновых функций

Если $x_{\text{я}} \sqrt{-\varepsilon(2 + \alpha^2 \varepsilon)} \gg 1$, то при решении уравнения (9) с $\varepsilon < 0$ интегрированием вперед значение фазовой функции будет, в основном, лежать вблизи устойчивых особых точек уравнения

$$\varphi' = Z^{-1} \varepsilon \cos^2 \varphi + (2Z + \alpha^2 Z \varepsilon) \sin^2 \varphi \quad (17)$$

«асимптотика» уравнения (9)), т. е. вблизи точек $\varphi^* = -\frac{1}{2} \arccos \frac{2Z^2 + \alpha^2 Z^2 \varepsilon + \varepsilon}{2Z^2 + \alpha^2 Z^2 \varepsilon - \varepsilon} + \pi k, \quad k \in Z$.

Эти значения соответствуют экспоненциально растущим (пропорциональным e^{kz}) решениям (4) уравнения Дирака на бесконечности; тригонометрическом круге (рис. 1) этим значениям соответствуют точки $\varphi^*, \varphi^* + \pi$. Значения $-\varphi^* + \pi k$, изображенные на рис. 1 точками $-\varphi^*, -\varphi^* + \pi$, соответствуют неустойчивым особым точкам уравнения (17). Такое расположение особых точек может повлечь невозможность удовлетворить граничному условию справа при решении уравнения (9) интегрированием вперед. В связи с этим для получения волновых функций, удовлетворяющих нужному граничному условию при $x = x_{\text{я}}$, использовалось два способа. Первый – решение уравнения (9) для фазы от правой границы назад и от левой границы вперед со сшивкой в промежуточной точке. Второй способ – решение уравнения Дирака (1) вариационным методом с использованием функций Штурма (энергии считаются уже найденными).

Сшивка решений вперед и назад. Сначала определяем ε методом дихотомии (см. разд. 4), полагая: $x^* = x_{я}/2$. Затем, если $n_r = 0$ или $n_r = 1$, в качестве точки сшивки берем $x^* = \min \left\{ x_{я}/2, 2(n_r + |\kappa|^2)/Z \right\}$ (второе число – классический радиус орбиты в водородоподобном приближении). Если $n_r > 1$, то в качестве точки сшивки x^* берем второй справа локальный минимум $\frac{d\Phi}{dx}(x, x_1, \varphi_2, \varepsilon)$ при $x \in [0, x_{я}]$. Искомую фазовую функцию находим как

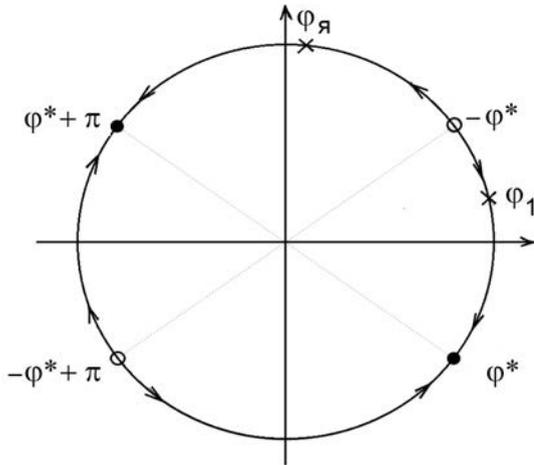


Рис. 1. Схематичное расположение особых точек уравнения (17)

$$\widehat{\varphi}(x) = \begin{cases} \widehat{\Phi}(x, x_1, \varphi_1, \varepsilon) & \text{при } x \leq x^* ; \\ \widehat{\Phi}(x, x_{я}, \varphi_{я}, \varepsilon) & \text{при } x > x^* . \end{cases}$$

Также был реализован другой способ. Предположим, что методом дихотомии найден отрезок $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$ такой, что $\Phi(x_{я}; x_1, \varphi_1, \varepsilon_1) \leq \varphi_{я} < \Phi(x_{я}; x_1, \varphi_1, \varepsilon_2)$. По найденным значениям можно построить $\Phi(x; x_1, \varphi_1, \varepsilon_i)$ и $\Phi(x; x_{я}, \varphi_{я}, \varepsilon_i)$, $i = 1, 2$, $x \in [x_1, x_{я}]$. Численно интегрируя уравнение (9) с соответствующими начальными условиями (для начального условия в $x_{я}$ интегрируем назад), находим сеточные приближения для этих функций и точку сшивки x^* такую, что при $x < x^*$: $\widehat{\Phi}(x; x_1, \varphi_1, \varepsilon_2) \leq \widehat{\Phi}(x; x_{я}, \varphi_{я}, \varepsilon_1)$, а при $x > x^*$ $\widehat{\Phi}(x; x_1, \varphi_1, \varepsilon_2) > \widehat{\Phi}(x; x_{я}, \varphi_{я}, \varepsilon_1)$. Существование такой точки вытекает из теоремы (см. разд. 4). Далее находим искомую фазовую функцию как

$$\widehat{\varphi}(x) = \begin{cases} \widehat{\Phi}(x, x_1, \varphi_1, \varepsilon_2) & \text{при } x \leq x^* ; \\ \widehat{\Phi}(x, x_{я}, \varphi_{я}, \varepsilon_1) & \text{при } x > x^* . \end{cases}$$

Определив значение фазовой функции $\widehat{\varphi}$, найдем амплитуду. Для этого перепишем (10) в виде

$$\ln \widehat{A}(x) = \ln \sqrt{(\gamma - \kappa)^2 + 1} + 2\gamma \ln x_1 +$$

$$+ \int_{x_1}^x \left\{ -\frac{\kappa}{y} \cos(2\widehat{\varphi}(y)) - \frac{1}{2} \left[2Z + \alpha^2 Z^2 (\varepsilon + V(y)) - Z^{-1} (\varepsilon + V(y)) \right] \sin(2\widehat{\varphi}(y)) \right\} dy$$

(интеграл берем методом трапеций, значение при $x = x_1$ выбрано в соответствии с асимптотикой (3)). После нахождения $\widehat{\varphi}$, \widehat{A} находим компоненты волновой функции по формулам (11) и нормируем их.

Вариационный метод с использованием функций Штурма. Для нахождения собственных функций, соответствующих собственным значениям $\varepsilon < 0$, можно также воспользоваться вариационным методом. Перейдем в постановке задачи от $(0, x_\alpha)$ к $(0, \infty)$ (при этом, конечно, задача несколько изменится).

Для определения волновых функций используем разложение по ортонормированному базису, состоящему из функций Штурма [22]:

$$\Psi_n^\gamma(u) = \frac{\sqrt{\Gamma(n+1)}}{\sqrt{\Gamma(n+2\gamma+1)}} u^\gamma L_n^{2\gamma}(u) e^{-u/2},$$

где $u \in (0, \infty)$; $\Gamma(\cdot)$ – гамма-функция; $L_n^{2\gamma}(u)$ – полиномы Лагерра. В системе уравнений (1) сделаем замену переменных: $x = u/(2k)$ и $\bar{f}(u) = f(u/(2k))$, $\bar{g}(u) = g(u/(2k))$, где k – то же, что в (4). Будем искать решения в виде

$$\bar{f}(u) = \sum_{n=0}^N a_n \Psi_n^\gamma(y); \quad \bar{g}(u) = \sum_{n=0}^N b_n \Psi_n^\gamma(y). \quad (18)$$

Для определения неизвестных коэффициентов разложений применим проекционный метод Рунца–Галёркина [23]. Потребуем ортогональности невязок уравнений для \bar{f} и \bar{g} базисным функциям Ψ_m^γ $m = 0, \dots, N$. Получим систему вида: $(A + \varepsilon G)\bar{X} = 0$, $\bar{X} = (a_0, \dots, a_N, b_0, \dots, b_N)^T \in \mathbf{R}^{2N+2}$; A, G – матрицы $(2N+2) \times (2N+2)$ с элементами, которые выражаются через интегралы от функций Штурма, их производных и потенциала. Вообще говоря, это нелинейная обобщенная задача на собственные значения [24, 25] (так как элементы матриц зависят от $k = k(\varepsilon)$, ε – искомые энергии). В качестве приближения к собственной энергии данной задачи возьмем значения энергии ε , полученные фазовым методом (см. разд. 4). Собственный вектор, соответствующий ближайшему к ε собственному значению, можно найти методом обратных итераций [24, 25]. А именно, выбирая произвольно $\bar{X}^0 \in \mathbf{R}^{2N+2}$, $\bar{X}^0 \neq 0$ (например, $(\text{например } \bar{X}^0 = (1, 0, \dots, 0)^T)$), определяем

$$(A + \varepsilon G)\bar{X}^{n+1} = \frac{G\bar{X}^n}{\|\bar{X}^n\|}.$$

Итерации продолжаются, пока выполняется условие

$$\left\| \frac{\bar{X}^{n+1}}{\|\bar{X}^{n+1}\|} - \frac{\bar{X}^n}{\|\bar{X}^n\|} \right\| > \delta$$

(в расчетах $\delta = 10^{-5}$). Полученное значение \bar{X} определяет коэффициенты разложений (18) искомым собственным функциям, соответствующих заданному собственному значению. Точность приближения зависит от выбранного числа базисных функций N .

8. Результаты расчетов

Приведем результаты расчетов для $Z = 13$ (алюминий), $x_{\text{я}} = 3a_0$ и $x_{\text{я}} = 30a_0$ (a_0 – борковский радиус, который примерно соответствует нормальной плотности). В качестве потенциалов были рассмотрены потенциал типа кулоновского

$$V(x) = \frac{Z}{x} - \frac{Z}{x_{\text{я}}} \quad (19)$$

в ограниченной ячейке и два потенциала, построенных по электронной плотности (в соответствии с Приложением 4):

$$\rho(x) = \frac{3Z}{4\pi x_{\text{я}}^3}; \quad (20)$$

$$\rho(x) = \frac{5Z}{16\pi x_{\text{я}}^{5/2} x^{1/2}} + \frac{3Z}{8\pi x_{\text{я}}^3}. \quad (21)$$

Для электронной плотности (21) были также проведены вычисления с учетом обменного потенциала (см. Приложение 4). При $x = x_{\text{я}}$ использовалось граничное условие (13), соответствующее условию (7) для исходного уравнения Дирака (1).

В таблице приведены значения энергий некоторых состояний для рассмотренных потенциалов, а также соответствующие энергии в водородоподобном приближении (см., например, [12]).

На рис. 2 приведены f и g для состояний $1s_{1/2}$ ($n_r = 0$; $\kappa = -1$) и $11h_{9/2}$ ($n_r = 5$; $\kappa = 5$), полученные при указанных способах задания потенциалов для $x_{\text{я}} = 3a_0$ и $x_{\text{я}} = 30a_0$, а также соответствующие водородоподобные волновые функции (см., например, [12]). Для состояния $11h_{9/2}$ при $x_{\text{я}} = 3a_0$ отличие волновых функций от кулоновских достаточно велико, что иллюстрирует влияние ограниченности ячейки (и различия в граничных условиях). Отличие волновых функций для потенциала (19) и электронных плотностей (20), (21) между собой оказывается незначительным. При этом различие энергий довольно заметно: для нижних состояний – от нескольких единиц до нескольких десятков электрон-вольт. Интересно отметить, что энергия состояния $11h_{9/2}$ для всех потенциалов при $x_{\text{я}} = 3a_0$ оказывается положительной. Для $x_{\text{я}} = 30a_0$ волновые функции хорошо согласуются с кулоновскими.

Собственные функции, полученные сшивкой решений вперед и назад и вариационным методом, хорошо согласуются между собой. На рис. 3 приведены большие компоненты f волновой функции, полученные этими способами, для состояния $11h_{9/2}$ для потенциала с $\rho(x)$ из (20) и $x_{\text{я}} = 30a_0$, а также водородоподобная f . Для остальных рассмотренных состояний различие еще меньше.

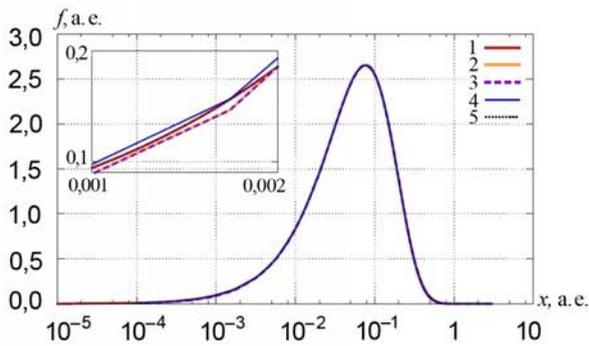
Результаты расчетов по схемам Рунге–Кутты и (14) оказываются очень близкими. Расчет по схеме Рунге–Кутты в рассмотренных случаях оказывается приблизительно в два раза более затратным (шагов делается меньше, но объем вычислений на шаге – больше).

Зная собственные значения, можно построить спектральную функцию (число состояний с энергиями, не превышающими аргумента)

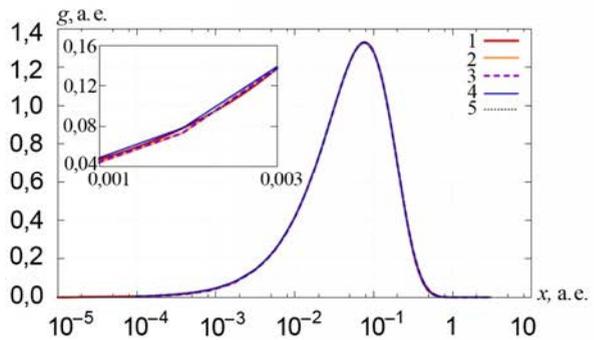
$$N_{\varepsilon} = \sum_{\kappa, n_r : \varepsilon_{n_r, \kappa} \leq \varepsilon} (2|\kappa|).$$

Энергии (в эВ) некоторых состояний для модельных потенциалов

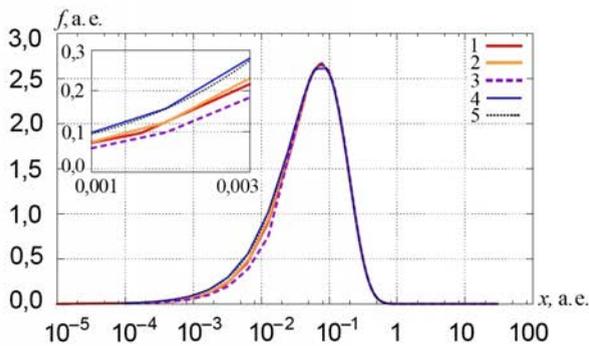
| Состояние | n_r | κ | Водородо-подобная | Способ задания потенциала | | | | | | | |
|-------------|-------|----------|-------------------|---------------------------|----------|-------------------|----------|-------------------|----------|-----------------------------|----------|
| | | | | (19) | | $\rho(x)$ из (20) | | $\rho(x)$ из (21) | | $\rho(x)$ из (21) с обменом | |
| | | | | $3a_0$ | $30a_0$ | $3a_0$ | $30a_0$ | $3a_0$ | $30a_0$ | $3a_0$ | $30a_0$ |
| $1s_{1/2}$ | 0 | -1 | -2304,44 | -2195,00 | -2303,84 | -2127,69 | -2286,76 | -2118,14 | -2285,77 | -2124,02 | -2287,42 |
| $2s_{1/2}$ | 1 | -1 | -576,44 | -467,44 | -576,29 | -401,19 | -558,59 | -393,08 | -557,71 | -395,79 | -561,60 |
| $2p_{1/2}$ | 0 | 1 | -576,44 | -467,45 | -576,30 | -400,73 | -558,75 | -392,26 | -557,78 | -395,26 | -564,34 |
| $2p_{3/2}$ | 0 | -2 | -575,13 | -466,14 | -574,98 | -399,43 | -557,45 | -390,97 | -556,47 | -393,99 | -557,35 |
| $3s_{1/2}$ | 2 | -1 | -256,05 | -143,71 | -255,98 | -87,38 | -238,30 | -82,11 | -237,32 | -83,49 | -239,26 |
| $3p_{1/2}$ | 1 | 1 | -256,05 | -144,83 | -255,98 | -86,32 | -238,35 | -80,69 | -237,39 | -82,19 | -239,86 |
| $3p_{3/2}$ | 1 | -2 | -255,66 | -147,15 | -255,60 | -85,95 | -237,96 | -80,34 | -236,99 | -81,84 | -237,63 |
| $3d_{3/2}$ | 0 | 2 | -255,66 | -146,52 | -255,60 | -83,80 | -237,98 | -77,42 | -237,01 | -79,10 | -238,13 |
| $3d_{5/2}$ | 0 | -3 | -255,54 | -146,63 | -255,47 | -83,68 | -237,85 | -77,31 | -236,89 | -78,98 | -237,53 |
| $11h_{9/2}$ | 5 | 5 | -19,00 | 863,71 | -18,98 | 908,28 | -2,60 | 911,61 | -2,21 | 911,00 | -2,32 |



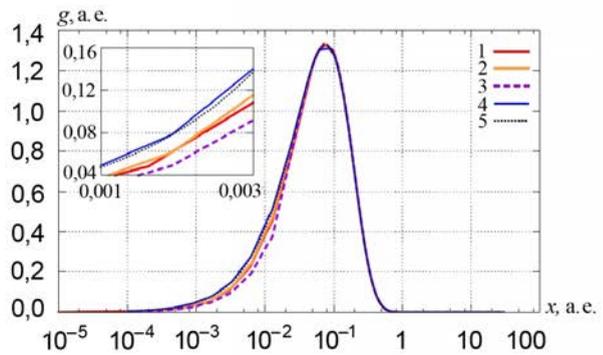
а



б



в



г

Рис. 2. Волновые функции для разных потенциалов: а - $f_{1s_{1/2}}(x_{я} = 3a_0)$; б - $(\alpha Z)^{-1} g_{1s_{1/2}}(x_{я} = 3a_0)$; в - $f_{1s_{1/2}}(x_{я} = 30a_0)$; г - $(\alpha Z)^{-1} g_{1s_{1/2}}(x_{я} = 30a_0)$; д - $f_{11h_{9/2}}(x_{я} = 3a_0)$; е - $(\alpha Z)^{-1} g_{11h_{9/2}}(x_{я} = 3a_0)$; ж - $f_{11h_{9/2}}(x_{я} = 30a_0)$; з - $(\alpha Z)^{-1} g_{11h_{9/2}}(x_{я} = 30a_0)$; 1 - потенциал (19); 2 - ρ из (20); 3 - ρ из (21); 4 - ρ из (21) с обменом; 5 - водородоподобные. Окончание рисунка на с. 130

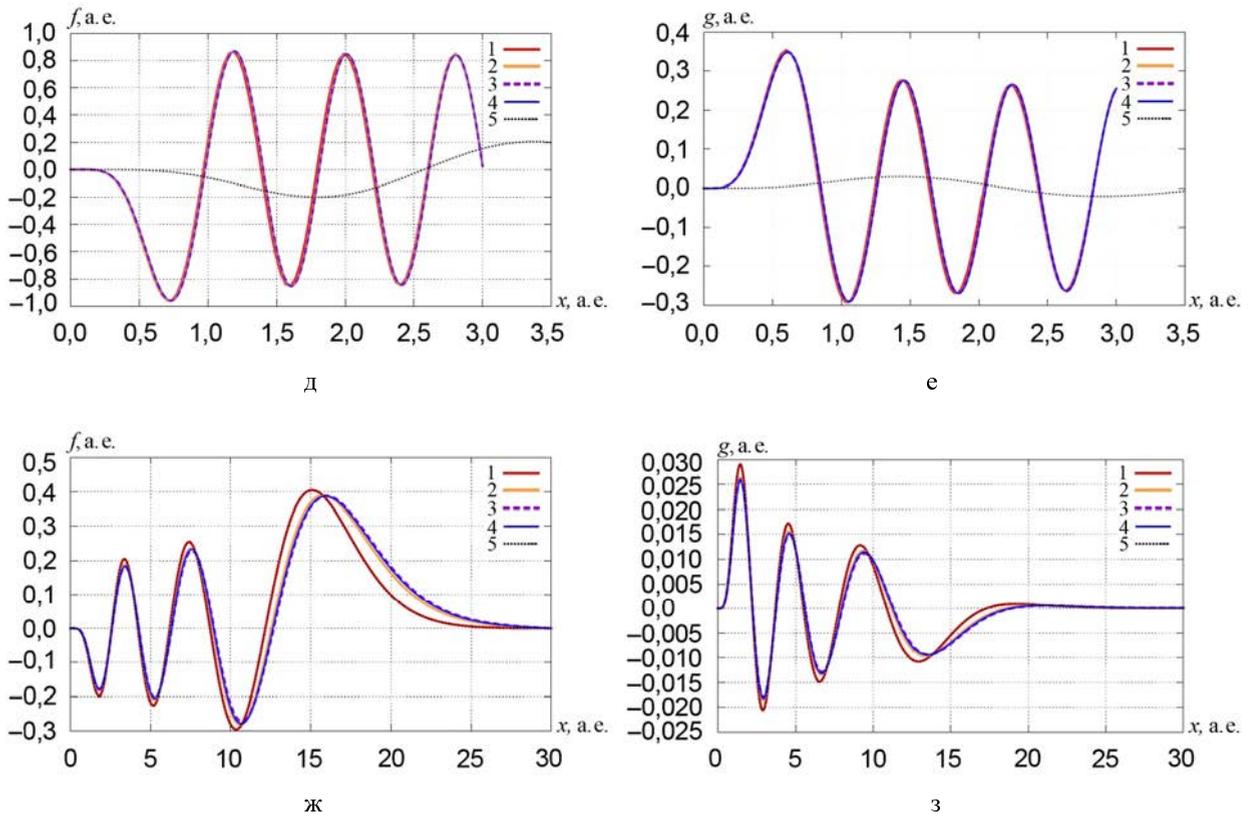


Рис. 2. Окончание

На рис. 4 изображены спектральные функции для рассмотренных потенциалов и их сравнение с кулоновской спектральной функцией для $x_{я} = 3a_0$ и $x_{я} = 30a_0$. Из рисунка виден масштаб влияния потенциала на спектр.

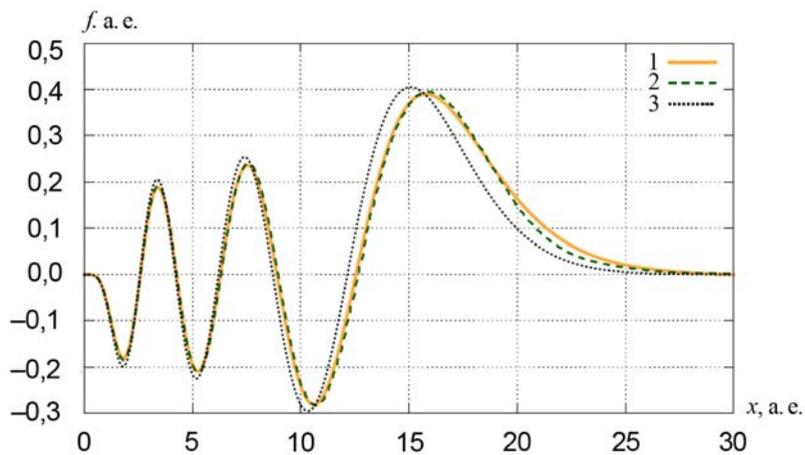


Рис. 3. Большие компоненты f волновых функций состояния $11h_{9/2}$ для $x_{я} = 30a_0$ и потенциала с $\rho(x)$ из (20): 1 – метод шивки; 2 – вариационный метод; 3 – водородоподобная f

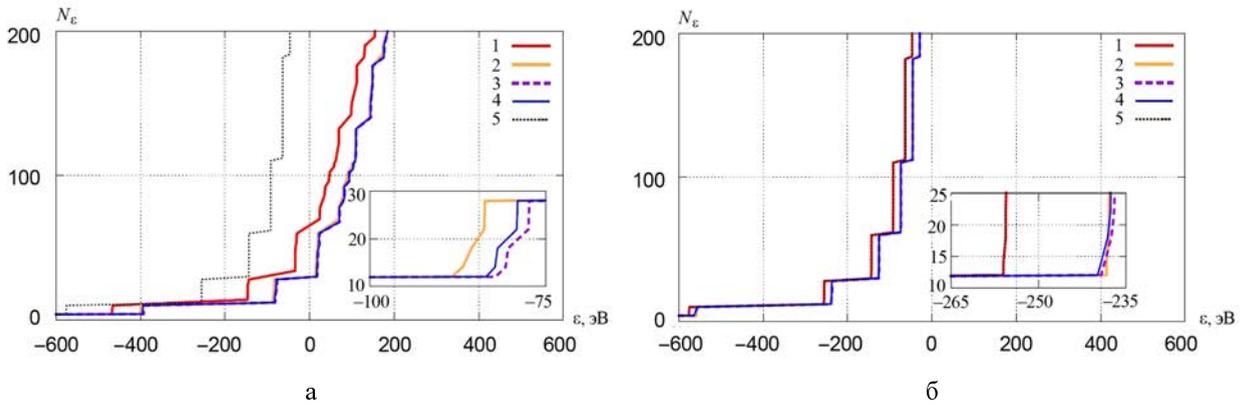


Рис. 4. Спектральные функции для $x_я = 3a_0$ (а) и $x_я = 30a_0$ (б) и потенциалов: 1 – (19); 2 – (20); 3 – (21); 4 – (21) с обменом; 5 – водородоподобная $N_ε$

Выводы

Таким образом, разработан новый вариант фазового метода решения задачи на собственные значения для радиального уравнения Дирака. При этом:

- вывод регулярного решения из особой точки осуществлен на основе уравнения Вольтерра;
- доказана теорема сравнения для фазовой функции, на основе которой построен алгоритм поиска собственных значений;
- получена связь между квантовыми числами состояния и условиями на правой границе интервала;
- развиты способы преодоления проблемы экспоненциального роста решений, соответствующих энергиям, меньшим энергии покоя электрона.

Благодарности

Авторы благодарны Ю. В. Корякиной за ценные замечания, М. В. Горбатенко, Б. П. Косякову, В. П. Незнамову и Е. Ю. Попову за обсуждения, в ходе которых были поставлены вопросы, нашедшие отражение в данной работе.

Уравнение Вольтерра для регулярного в нуле решения уравнения Дирака

Введем обозначения: $A_0(x) = \frac{1}{x} \begin{pmatrix} -\kappa & -\alpha Z \\ \alpha Z & \kappa \end{pmatrix}$; $A_1(x) = \begin{pmatrix} 0 & -2\alpha^{-1} - \alpha(\varepsilon + W(x)) \\ \alpha(\varepsilon + W(x)) & 0 \end{pmatrix}$,

т. е. $\begin{pmatrix} -\kappa/x & -2\alpha^{-1} - \alpha(\varepsilon + V(x)) \\ \alpha(\varepsilon + V(x)) & -\kappa/x \end{pmatrix} = A_0(x) + A_1(x)$, и $B(x) = \begin{pmatrix} -\alpha Z & \alpha Z \\ \gamma + \kappa & \gamma - \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^\gamma & 0 \\ 0 & x^{-\gamma} \end{pmatrix}$.

Легко проверить, что $\det B(x) = -2\alpha Z \gamma$; $\frac{d}{dx} B(x) = A_0(x) B(x)$; $B^{-1}(x) = \frac{1}{2\alpha Z \gamma} \begin{pmatrix} x^{-\gamma} & 0 \\ 0 & x^\gamma \end{pmatrix} \times$
 $\times \begin{pmatrix} \kappa - \gamma & \alpha Z \\ \kappa + \gamma & \alpha Z \end{pmatrix}$.

Рассмотрим представление решения (1) в виде

$$\begin{pmatrix} f(x) \\ g(x) \end{pmatrix} = B(x) \begin{pmatrix} f_1(x_0) \\ g_1(x_0) \end{pmatrix}.$$

Подставляя правую часть в уравнение (1), несложно получить

$$\begin{pmatrix} f(x) \\ g(x) \end{pmatrix} = B(x) \begin{pmatrix} f_1(x_0) \\ g_1(x_0) \end{pmatrix} + \int_{x_0}^x B(x) B^{-1}(s) A_1(s) \begin{pmatrix} f(s) \\ g(s) \end{pmatrix} ds.$$

Перейдя к новым неизвестным функциям: $u(x) = x^{-\gamma} f(x)$, $v(x) = x^{-\gamma} g(x)$, найдем для них уравнение

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = x^{-\gamma} B(x) \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} + \int_{x_0}^x K(s, x) \begin{pmatrix} u(s) \\ v(s) \end{pmatrix} ds, \quad K(s, x) = \frac{s^\gamma}{x^\gamma} B(x) B^{-1}(s) A_1(s).$$

Ядро интегрального оператора $K(s, x)$ – ограниченная матричная функция в $L^1[0, M] \times [0, M]$ (M – из (2)). Примем без доказательства, что квадратичная интегрируемость решения уравнения (1) влечет ограниченность функций u, v вблизи нуля⁴. Отсюда, в свою очередь, получаем, что можно выбрать $x_0 = 0$ и $d = 0$, т. е. регулярное решение (1) определяется по u, v удовлетворяющим уравнению:

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha Z \\ \gamma + \kappa \end{pmatrix} + \int_0^x K(s, x) \begin{pmatrix} u(s) \\ v(s) \end{pmatrix} ds.$$

⁴ Это можно строго обосновать, например, при дополнительном предположении, что $|W(s)|s^{2/3}$ ограничено на $[0, M]$, а это условие выполнено для всех представляющих интерес потенциалов.

Если $W(x) = \sum_{l=1}^L w_l x^{R_l}$, то частичные суммы ряда Лиувилля–Неймана будут представлять собой квазимногочлены (конечные линейные комбинации степеней x с действительными показателями), вычисление которых может быть легко реализовано.

Приложение 2

Условие зануления потока дираковского электрона на границе сферической ячейки

Напомним (см. [17], [18, формула (21.11), с. 101]), что плотность тока электрона в состоянии ψ дается величиной $\mathbf{j} = c\psi^* \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \psi$. Для рассматриваемых орбиталей в центральном поле ([12, формула (2.121), с. 55]): $\psi = \frac{1}{x} \begin{pmatrix} if(x)\Omega_{\kappa,\mu} \\ g(x)\Omega_{\kappa,\mu} \end{pmatrix}$, $\Omega_{\kappa,\mu}$ – шаровые спиноры, откуда: $\mathbf{j} = -\frac{ic}{x^2} \times f(x)g(x) \left(\Omega_{\kappa,\mu}^* \sigma \Omega_{-\kappa,\mu} - \Omega_{-\kappa,\mu}^* \sigma \Omega_{\kappa,\mu} \right)$. Видно, что зануление потока через границу ячейки будет обеспечено для $f(x_{\text{я}}) = 0$ ($p = 0$ в условии (6)) либо $g(x_{\text{я}}) = 0$ ($p = \pi/2$).

Приложение 3

Доказательство теоремы сравнения

$$\text{Обозначим: } \phi(x, \varepsilon) = \Phi \left(x, x_0, \frac{\Phi_2(\varepsilon - \varepsilon_1) + \Phi_1(\varepsilon_2 - \varepsilon)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}, \varepsilon \right), \quad y(x) = \frac{\partial \phi(x, \varepsilon)}{\partial \varepsilon}.$$

Функция y удовлетворяет задаче Коши

$$y' = a(x)y + b(x), \quad y(x_0) = \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}, \tag{П. 1}$$

где

$$a(x) = \frac{2\kappa}{x} \cos(2\phi(x, \varepsilon)) + Z \left[2 + \alpha^2(\varepsilon + V(x)) \right] \sin(2\phi(x, \varepsilon)) - Z^{-1}(\varepsilon + V(x)) \sin(2\phi(x, \varepsilon));$$

$$b(x) = Z^{-1} \cos^2 \phi(x, \varepsilon) + \alpha^2 Z \sin^2 \phi(x, \varepsilon) > 0$$

(для сокращения выражений зависимости y, a и b от ε опускаются). Задача (П. 1) получается дифференцированием уравнения (9) и начального условия по ε . Решая уравнение для y методом

вариации постоянной, находим для этой функции выражение: $y(x) = \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} + \int_{x_0}^x b(t) e^{-\int_0^x a(x) ds} dt$.

Второе слагаемое в правой части выражения положительно для всех $\varepsilon \in [\varepsilon_1, \varepsilon_2]$. Отсюда легко

выводим: $\Phi(x; x_0, \Phi_2, \varepsilon_2) - \Phi(x; x_0, \Phi_1, \varepsilon_1) = \phi(x, \varepsilon_2) - \phi(x, \varepsilon_1) = \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} y(x) d\varepsilon = \Phi_2 - \Phi_1 + \int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_1} \int_{x_0}^x b(t) e^{-\int_0^x a(s) ds} \times$
 $\times dt d\varepsilon \geq \Phi_2 - \Phi_1$, что и требовалось доказать.

Приложение 4

Задание потенциала по электронной плотности

Рассмотрим подробнее особенности задания потенциала в виде суммы электростатической и обменной частей $V = V_{э.с} + V_{обм}$, каждая из которых определяется по электронной плотности ρ . Такое задание очень часто используется в квантово-статистических моделях. Электростатический потенциал определяется по уравнению Пуассона: $(xV_{э.с}(x))^n = 4\pi x \rho(x)$, $xV_{э.с}(x)|_{x=0} = Z$, $V_{э.с}(x_{я}) = 0$, решение которого дается формулой

$$xV_{э.с}(x) = Z - 4\pi \left(\int_0^x u^2 \rho(u) du + x \int_x^{x_{я}} u \rho(u) du \right). \quad (\text{П. 2})$$

Для обменной поправки нужно использовать некоторое приближение локальной плотности

$$V_{обм} = V_{обм}(\rho(x)), \text{ например, Кона-Шэма (см. [7]): } V_{обм} = \left(\frac{3\rho(x)}{\pi} \right)^{1/3} - \left(\frac{3\rho(x_{я})}{\pi} \right)^{1/3}.$$

На практике плотность часто бывает задана на некоторой сетке $0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N = x_{я}$. При этом важно учесть возможные особенности поведения ρ , а следовательно V , в нуле. Напомним, что:

- для модели Томаса-Ферми $\rho(x) \sim x^{-3/2}$;
- в квазиклассическом приближении плотность свободных электронов $\rho_f(x) \sim x^{-1/2}$;
- плотность связанных s -электронов, описываемых дираковскими орбиталями, $\rho_b(x) \sim x^{2\sqrt{1-\alpha^2 Z^2 - 2}}$.

Будем предполагать, что плотность определяется как

$$\rho(x) \begin{cases} \sum_{k=1}^K Q_k x^{R_k}, & 0 < x \leq x_1; \\ \rho_i \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} + \rho_{i+1} \frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}, & x_i \leq x \leq x_{i+1}, \quad i=1, \dots, N-1, \end{cases} \quad (\text{П. 3})$$

где $-2 < R_1 < R_2 < \dots < R_K$; $\rho_i (i=1, \dots, N)$ – плотность в узле x_i .

Для плотности (П. 3) при $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i=1, \dots, N-1$, используем приближение

$$V(x) = \frac{Z}{x} + W(x), \quad (\text{П. 4})$$

где

$$W(x) = \left(\varsigma_i + V_{\text{обм}}(\rho_i) \right) \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} + \left(\varsigma_{i+1} + V_{\text{обм}}(\rho_{i+1}) \right) \frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}, \quad \varsigma_i = -\frac{4\pi}{x_i} \left\{ \sum_{k=1}^K \frac{Q_k x_1^{3+R_k}}{3+R_k} + \right. \\ \left. + \frac{x_i}{6} \sum_{j=i+1}^N (x_j - x_{j-1}) \left[\rho_{j-1} (2x_{j-1} + x_j) + \rho_j (x_{j-1} + 2x_j) \right] + \frac{1}{12} \sum_{j=2}^i (x_j - x_{j-1}) \left[\rho_{j-1} (3x_{j-1}^2 + 2x_{j-1}x_j + x_j^2) + \right. \right. \\ \left. \left. + \rho_j (x_{j-1}^2 + 2x_{j-1}x_j + 3x_j^2) \right] \right\},$$

$i=1, \dots, N$ (сумму по пустому множеству индексов считаем нулевой).

При $x \in (0, x_1]$ удобно пользоваться упрощенным приближением Кона–Шэма:

$$V_{\text{обм}}(\rho(x)) \approx \left(\frac{3\rho(x)}{\pi} \right)^{1/3} \approx \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left(Q_1^{1/3} x^{R_1/3} + \frac{Q_2}{3Q_1^{2/3}} x^{R_2-2R_1/3} \right), \quad \text{что вместе с интегрированием (П. 2)}$$

дает для потенциала выражение (П. 4) с $W(x) = \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left(Q_1^{1/3} x^{R_1/3} + \frac{Q_2}{3Q_1^{2/3}} x^{R_2-2R_1/3} \right) +$

$$+ 4\pi \sum_{k=1}^K Q_k \frac{x^{2+R_k}}{(3+R_k)(2+R_k)} - 4\pi \left\{ \sum_{k=1}^K Q_k \frac{x_1^{2+R_k}}{2+R_k} + \frac{1}{16} \sum_{j=2}^N (x_j - x_{j-1}) \left[\rho_{j-1} (2x_{j-1} + x_j) + \rho_j (x_{j-1} + 2x_j) \right] \right\}.$$

Список литературы

1. Левитан Б. М., Саргсян И. С. Операторы Штурма–Лиувилля и Дирака. М.: Наука, 1988.
2. Титчмарш Э. Ч. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. М.: Изд-во иностранной лит-ры, 1960.
3. Калиткин Н. Н. Численные методы. С.-Пб.: БХВ-Петербург, 2014.
4. Хартри Д. Расчеты атомных структур. М.: Изд-во иностранной лит-ры, 1960.
5. Уваров В. Б., Алдонясов В. И. Фазовый метод определения собственных значений для уравнений Шрёдингера // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1967. Т. 7. Вып. 2. С. 436–439.
6. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г. Применение фазового метода для определения собственных значений энергии // Мат. моделирование. 1998. Т. 10, № 10. С. 64–78.
7. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. Методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000.
8. Орлов Н. Ю. Фазовый метод определения собственных значений для уравнения Дирака // Дифференциальные уравнения. 1984. Т. 20. Вып. 7. С. 1253–1258.
9. Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. М.: Мир, 1972.
10. Kosyakov V. P., Popov E. Yu., Vronskiy M. A. The bag and the string: are they opposed? // Phys. Let. B. 2015. Vol. 744. P. 38–43.
11. Kosyakov V. P., Popov E. Yu., Vronskiy M. A. Could the static properties of nuclei be deduced from the dynamics of a single quark? // Europ. Phys. J. A. 2017. Vol. 53, N 82. P. 1–8.
12. Johnson W. Atomic Structure Theory. Lectures on Atomic Physics. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2007.
13. Де Альфаро В., Редже Т. Потенциальное рассеяние. М.: Мир, 1966.
14. Романихин В. П. Расчет дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов малых и средних энергий на атомах и молекулах вещества // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 1. С. 29–33.
15. Bar-Shalom A., Klapisch M., Oreg J. Phase-amplitude algorithms for atomic continuum orbitals and radial integrals // Comp. Phys. Com. 1996. Vol. 93. P. 21–32.
16. Наймарк М. А. Линейные дифференциальные операторы. М.: ГИТТЛ, 1954.
17. Незнамов В. П., Сафронов И. И. Новый метод решения проблемы « $Z > 137$ » и определения уровней энергии водородоподобных атомов // УФН. 2014. Т. 184, № 2. С. 200–205.
18. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. М.: Физматлит, 2001.
19. Никифоров А. Ф., Уваров В. Б. Специальные функции математической физики. Долгосрочный: «Интеллект», 2007.

20. Rosenbrock H. H. Some general implicit processes for the numerical solution // Comp. J. 1963. N 5. P. 329–330.

21. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Физматлит, 2001.

22. Голубев А. И., Повышев В. М., Садовой А. А., Сараева М. К. О двух методах решения проблемы собственных значений системы дифференциальных уравнений метода МУКФ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1987. Вып. 2. С. 57–63.

23. Гавурин М. К. Лекции по методам вычислений. М.: Наука, 1971.

24. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.

25. Парлетт Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. М.: Мир, 1983.

The Phase Method to Solve the Eigenvalue Problem for the Dirac Equation

M. A. Vronskii, V. M. Povyshev, S. Yu. Polyakova, E. S. Stolmakova

A new version is presented the phase method for the solution of the eigenvalue problem for the radial Dirac equation. The potential with Coulomb behavior at the origin is considered. Our method is applicable to both finite and infinite interval. The regular solution at the origin is obtained as a solution of the derived Volterra equation. We prove the comparison theorem for the solutions of the phase equation. This theorem underlies the effective algorithm to find the eigenvalues. We determine the correspondence between the quantum numbers and the right-boundary values of the phase function for the eigenstates. We highlight the eigenfunction calculation problems and describe ways to solve them. Several test calculations are presented.

УДК 519.245:621.039.58

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_138

Использование PL-оценок потока в точке для расчета поглощенной дозы, создаваемой радионуклидами в воздухе

Е. Н. Донской

Важнейшей задачей обоснования радиационной безопасности является оценка радиационной обстановки на местности при поступлении и распространении радионуклидов в атмосфере. Для этого требуется решить задачу переноса гамма-излучения в однородной воздушной среде с источником, размеры которого, как и размеры области детектирования, на несколько порядков больше области влияния точечного источника гамма-квантов (размеры источника составляют примерно 100 км, размеры влияния точечного источника гамма-квантов с энергией менее 10 МэВ не превышают сотен метров.). Это обстоятельство затрудняет решение указанной задачи традиционными методами с использованием локальных оценок потока в точке. В то же время такая ситуация благоприятна для применения PL-оценок потока в точке.

Введение

PL-оценки потока в точке были построены в работе [2]. Для их построения использовалось свойство инвариантности относительно сдвигов по пространству функции Грина уравнения переноса, а также свойство инвариантности относительно сдвигов по пространству траекторий скачкообразного марковского процесса, построенного для решения этого уравнения.

PL-оценки являются несмещенными оценками и обладают:

- 1) конечностью дисперсии оценки при довольно слабых ограничениях на рассчитываемый функционал;
- 2) непрерывностью оценки как функции точки детектирования для почти всех траекторий связанного с уравнением переноса марковского процесса.

Непрерывность оценки позволяет избежать статистических флуктуаций в соседних точках при ее вычислении. Последнее обстоятельство благоприятно сказывается на проведении расчетов потока одновременно в нескольких точках: получаемая при этом зависимость потока от пространственной координаты – гладкая кривая. Заметим, что свойства конечности дисперсии и непрерывности оценки как функции точки детектирования обычно не выполняются для локальных оценок потока в точке [1].

Модель источника радионуклидов – гауссова модель рассеяния примеси в атмосфере

Для расчета рассеяния примеси в атмосфере часто используются гауссова диффузионная модель и классификация погодных условий по Пасквиллу. Такой подход рекомендован в методическом руководстве МАГАТЭ [3] и широко применяется как в России, так и за рубежом [4, 5]. Получаемые результаты имеют удовлетворительную точность на расстоянии до нескольких десятков километров от источника выброса. В схеме классификации погодных условий Пасквилла [6] используется шесть категорий устойчивости, распределенных по возрастанию степени устойчивости атмосферы: от А до F.

Для более детального рассмотрения модели источника введем систему координат. Пусть ось OX совпадает с направлением ветра (его считаем горизонтальным), ось OZ направлена перпендикулярно поверхности земли и перпендикулярна оси OX , а ось OY перпендикулярна плоскости, образованной осями OX и OZ . При условии, что погодные условия не меняются за время выброса, распределение приземной концентрации $Q(x, y, z)$ радионуклида в воздухе при кратковременном единичном точечном выбросе имеет вид

$$Q(x, y, z) = q(x)Q_1(x, y, z), \quad (1)$$

где $q(x)$ – безразмерная функция истощения облака, позволяющая учесть изменение концентрации радионуклида в струе выброса за счет процессов осаждения и радиоактивных превращений в цепочках распада:

$$Q_1(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}. \quad (2)$$

Функции $Q_1(x, y, z)$ и $Q(x, y, z)$ имеют размерность $[c/m^3]$. Здесь x, y, z – пространственные координаты [м]; u – скорость ветра на высоте струи выброса [м/с]; h – эффективная высота облака над землей на расстоянии x [м]; σ_y и σ_z [м] – стандартные отклонения распределения примеси в облаке выброса в направлении соответствующих координатных осей. Функции σ_y и σ_z являются монотонно возрастающими функциями расстояния, которые для шести типов погодных условий [6] могут быть определены по эмпирическим формулам Смита–Хоскера [5] (если не указана размерность, переменные в этих и последующих формулах считаются безразмерными):

$$\sigma_y(x) = \frac{c_3 x}{\sqrt{1+0,0001x}}, \quad \sigma_z(x) = \max\left\{\sigma_z^{\max}, \sigma_z^1(z_0, x), \sigma_z^2(x)\right\}, \quad \text{где } \sigma_z^{\max} \text{ – предельное значение } \sigma_z$$

для данного типа погодных условий, z_0 – высота шероховатости подстилающей поверхности (в см). Функции $\sigma_z^1(z_0, x)$ и $\sigma_z^2(x)$ рассчитываются по формулам

$$\sigma_z^1(z_0, x) = \begin{cases} \ln\left[c_1 x^{d_1} (1 + c_2 x^{d_2})\right], & z_0 > 10, \\ \ln\left[c_1 x^{d_1} / (1 + c_2 x^{d_2})\right], & z_0 \leq 10, \end{cases}$$

$$\sigma_z^2(x) = a_1 x^{b_1} / (1 + a_2 x^{b_2}).$$

Значения z_0 для различных типов поверхности приведены в табл. 1, значения σ_z^{\max} – в табл. 2, остальные параметры для различных категорий устойчивости по Пасквиллу – в табл. 3–5.

Таблица 1

Высота шероховатости z_0 для различных типов микрорельефа поверхности

| Микрорельеф | z_0 , см |
|---|------------|
| Снег, газон высотой 1 см | 0,1 |
| Скошенная и низкая трава до 15 см | 0,6–2 |
| Высокая трава до 60 см | 4–9 |
| Неоднородная поверхность с чередующимися участками травы, кустарниками, и т. п. | 10–20 |
| Парк, лес высотой до 10 м | 20–100 |
| Городские постройки | 100 |

Таблица 2

Значения σ_z^{\max} для различных категорий устойчивости по Пасквиллу

| Категория устойчивости | A | B | C | D | E | F |
|------------------------|------|-----|-----|-----|-----|-----|
| σ_z^{\max} , м | 1600 | 920 | 640 | 400 | 220 | 100 |

Таблица 3

Коэффициенты, используемые для расчета поперечной дисперсии струи σ_y

| Категория устойчивости | A | B | C | D | E | F |
|------------------------|------|------|------|------|------|------|
| c_3 | 0,22 | 0,16 | 0,11 | 0,08 | 0,06 | 0,04 |

Таблица 4

Коэффициенты функции $\sigma_z^1(z_0, x)$, модифицирующие σ_z для различной высоты шероховатости

| z_0 , см | c_1 | d_1 | c_2 | d_2 |
|------------|-------|----------|----------------------|-------|
| 1 | 1,56 | 0,0480 | $6,25 \cdot 10^{-4}$ | 0,45 |
| 4 | 2,02 | 0,0269 | $7,76 \cdot 10^{-4}$ | 0,37 |
| 10 | 2,73 | 0 | 0 | 0 |
| 40 | 5,16 | -0,098 | $5,38 \cdot 10^{-2}$ | 0,225 |
| 100 | 7,37 | -0,00957 | $2,33 \cdot 10^{-4}$ | 0,60 |
| 400 | 11,7 | -0,128 | $2,18 \cdot 10^{-5}$ | 0,78 |

Таблица 5

Коэффициенты функции $\sigma_z^2(x)$, используемой для расчета вертикальной дисперсии струи

| Категория устойчивости | a_1 | b_1 | a_2 | b_2 |
|------------------------|--------|-------|----------------------|-------|
| A | 0,112 | 1,06 | $5,38 \cdot 10^{-4}$ | 0,815 |
| B | 0,130 | 0,950 | $6,52 \cdot 10^{-4}$ | 0,750 |
| C | 0,112 | 0,920 | $9,05 \cdot 10^{-4}$ | 0,718 |
| D | 0,098 | 0,889 | $1,35 \cdot 10^{-3}$ | 0,688 |
| E | 0,0609 | 0,895 | $1,96 \cdot 10^{-3}$ | 0,684 |
| F | 0,0638 | 0,783 | $1,36 \cdot 10^{-3}$ | 0,672 |

Из сказанного выше следует, что функция $Q_1(x, y, z)$ (2) определена при $x \geq 0, z \geq 0$. Действительно, значения $x < 0$ могут реализовываться только тогда, когда струя выброса радионуклидов движется против направления движения ветра, чего быть не может. Если $z < 0$, то это означает, что струя находится под землей, что также невозможно.

В качестве радионуклидов мы будем рассматривать только инертные газы и не будем учитывать выпадение их на землю за счет процессов сухого оседания и вымывания осадками. Таким образом, функция $q(x)$ будет учитывать только процесс радиоактивного распада. С учетом этого (1) можно переписать в следующем виде:

$$Q(x, y, z) = \sum_i \alpha_i \exp\left[-\frac{\lambda_i x}{u}\right] Q_1(x, y, z), \quad (3)$$

где $\lambda_i [c^{-1}]$ – постоянная радиоактивного распада, α_i – концентрация i -го радионуклида в облаке. Заметим, что λ связана с периодом полураспада $T_{1/2}$ соотношением: $\lambda = \ln 2/T_{1/2}$.

Из формулы (3) нетрудно получить источник гамма-квантов

$$g(\vec{r}, \vec{E}) = \sum_{i,j} g_{ij}(\vec{r}, \vec{E}) = \sum_{i,j} g_{ij}(x, y, z, E, \vec{\omega}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \beta_{ij} \delta(E - E_j) \alpha_i \lambda_i \exp\left[-\frac{\lambda_i x}{u}\right] Q_1(x, y, z), \quad (4)$$

где β_{ij} – количество квантов с энергией E_j , излучаемых при распаде i -го радионуклида, $\vec{r} = (x, y, z)$, $\vec{E} = (E, \vec{\omega})$. Из выражения (4) видно, что угловое распределение гамма-квантов источника – изотропное. Как и функция $Q(x, y, z)$, функция $g(\vec{r}, \vec{E})$ определена при $x \geq 0, z \geq 0$, поэтому при $x < 0$ или $z < 0$ доопределим ее нулем.

Методика расчета поглощенной дозы для стационарного уравнения переноса

Рассмотрим сначала стационарное уравнение переноса гамма-излучения [2]

$$\vec{\omega} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{E})}{\partial \vec{r}} + \Sigma(\vec{r}, E) f(\vec{r}, \vec{E}) - \int f(\vec{r}, \vec{E}') \Sigma(\vec{r}, E') K(\vec{r}; \vec{E}' \rightarrow \vec{E}) d\vec{E}' = \tilde{g}(\vec{r}, \vec{E}), \quad (5)$$

где \vec{r} – пространственная координата; $\vec{E} = E\vec{\omega}$, где E – энергия гамма-кванта, $\vec{\omega}$ – единичный вектор направления движения гамма-кванта; $\Sigma(\vec{r}, E)$ – полное макроскопическое сечение взаимодействия гамма-кванта с веществом; $K(\vec{r}; \vec{E}' \rightarrow \vec{E})$ – ядро перехода при взаимодействии; $f(\vec{r}, \vec{E})$ – плотность гамма-квантов – решение стационарного уравнения переноса (5) с источником $\tilde{g}(\vec{r}, \vec{E})$.

Задача вычисления функционала $\langle f, \psi \rangle$ от решения $f(x)$ уравнения (5) является прямой задачей для оператора H : найти значение функционала $\langle f, \psi \rangle$ от решения $f(x)$ уравнения

$$fH(x) = -\tilde{g}(x), \quad (6)$$

где $fH(x)$ – левая часть уравнения (5) [7].

Наряду с прямой задачей для оператора H будем рассматривать сопряженную задачу: найти решение уравнения

$$H\varphi(x) = -\psi(x). \quad (7)$$

В этом случае: $\langle f, \psi \rangle = \langle \tilde{g}, \varphi \rangle$.

Решение методом Монте-Карло прямой и обратной задач для оператора H из (6), (7) основано на его вероятностной интерпретации как генератора кинетического процесса (x_t, w_t) (марковского процесса с весом) [7]:

$H\varphi(x) = H\varphi(\vec{r}, \vec{E}) = \vec{\omega} \frac{\partial \varphi(\vec{r}, \vec{E})}{\partial \vec{r}} - \Sigma(\vec{r}, E)\varphi(\vec{r}, \vec{E}) + \Sigma(\vec{r}, E) \int K(\vec{r}; \vec{E} \rightarrow \vec{E}')\varphi(\vec{r}, \vec{E}')d\vec{E}'$. Напомним, как строится этот процесс (см. работу [7]). Марковский процесс x_t зададим генератором:

$A\varphi(x) = A\varphi(\vec{r}, \vec{E}) = \vec{\omega} \frac{\partial \varphi(\vec{r}, \vec{E})}{\partial \vec{r}} - \Sigma(\vec{r}, E)\varphi(\vec{r}, \vec{E}) + \Sigma(\vec{r}, E) \int \pi(\vec{r}; \vec{E} \rightarrow \vec{E}')\varphi(\vec{r}, \vec{E}')d\vec{E}'$, где ядро $\pi(x \rightarrow x') \geq 0$, $\int \pi(x \rightarrow x')dx' \leq 1$. При таком выборе x_t вес w_t набирается на скачках процесса x_t по формуле

$$w_t = \begin{cases} 1, & \tau_1 > t, \\ w(x_{\tau_1-0}, x_{\tau_1}) \cdot \dots \cdot w(x_{\tau_n-0}, x_{\tau_n}), & \tau_n \leq t < \tau_{n+1}, \end{cases}$$

с функцией $w(x, x') = w(\vec{r}; \vec{E}, \vec{E}')$, удовлетворяющей соотношению: $w(\vec{r}; \vec{E}, \vec{E}')\pi(\vec{r}; \vec{E} \rightarrow \vec{E}') = K(\vec{r}; \vec{E} \rightarrow \vec{E}')$. Здесь τ_n – последовательность марковских моментов столкновений процесса x_t , определяемая соотношением: $\tau_0(\omega) = 0$, $\tau_{n+1}(\omega) = \tau_n(\omega) + \tau(\omega_{\tau_n}^+)$, где τ – марковский момент процесса x_t , равный времени первого столкновения. Таким образом, мы установили связь между уравнением переноса и скачкообразным марковским процессом.

PL-оценка потока в точке для уравнения (5) имеет вид [2]

$$\eta_D = p(\vec{E}_0) \sum_{n=0}^{\infty} w_{\tau_n} \psi(\vec{E}_{\tau_n}) \int_{c_n} h(\vec{r}_D - \vec{r}_{\tau_n} - \vec{\omega}_{\tau_n} l) dl. \quad (8)$$

При записи оценки (8) предполагается, что источник $g_{ij}(\vec{r}, \vec{E})$ представлен в виде: $g_{ij}(\vec{r}, \vec{E}) = h_i(\vec{r}) p_{ij}(\vec{E})$, где $h_i(\vec{r})$ и $p_{ij}(\vec{E})$ – начальные пространственное, энергетическое и угловое распределения. Кроме того, предполагается (см. работу [2]), что сумма по n – это сумма по звеньям траектории скачкообразного марковского процесса x_i , c_n – отрезок траектории между двумя последовательными моментами столкновений τ_n и τ_{n+1} , w_{τ_n} – вес на траектории, $\psi(\vec{E}_{\tau_n})$ – рассчитываемый функционал. Рассчитываемый функционал – поглощенная доза – определяется как отношение средней энергии, переданной ионизирующим излучением веществу в элементарном объеме, к массе вещества в этом объеме: $(\psi(\vec{E}_{\tau_n}) = \vec{E}_{\tau_n} \Sigma^a(E_{\tau_n}) / m_{\tau_n}, \Sigma^a(E_{\tau_n}))$ – сечение поглощенной энергии [8]).

В нашем случае для источника $g_{ij}(\vec{r}, \vec{E})$

$$h_i(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{\alpha_i \lambda_i}{2\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp\left[-\frac{\lambda_i x}{u}\right] Q_1(x, y, z), & \text{при } x \geq 0, z \geq 0, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (9)$$

$$p_{ij}(\vec{E}) = \frac{1}{4\pi} \beta_{ij} \delta(E - E_j).$$

Учитывая вид источника (см. формулы (3) и (4)), PL-оценка (5) запишется в виде

$$\eta_D = \sum_{ij} \beta_{ij} \sum_{n=0}^{\infty} w_{\tau_n} \frac{E_{\tau_n} \Sigma^a(E_{\tau_n})}{m_{\tau_n}} \int_{c_n} h_i(\vec{r}_D - \vec{r}_{\tau_n} - \vec{\omega}_{\tau_n} l_n) dl_n. \quad (10)$$

Основная трудность использования PL-оценок потока в точке состоит в необходимости вычисления на каждом отрезке траектории интеграла

$$I = \int_{c_n} h_i(\vec{r}_D - \vec{r}_{\tau_n} - \vec{\omega}_{\tau_n} l_n) dl_n. \quad (11)$$

В первых расчетах интеграл (11) рассчитывался по формуле Симпсона, однако на это уходило достаточно много времени. Поэтому, учитывая то обстоятельство, что для большей части детекторных точек функция $h_i(\vec{r})$ слабо меняется на отрезке c_n , было решено оценивать ее по одному случайному узлу. Это позволило более чем в 10 раз сократить время счета. При этом дисперсия оценки η_D значительно возрастает только при вычислении вклада в детекторы, расположенные вблизи источника выброса радионуклидов.

Методика расчета поглощенной дозы для нестационарного уравнения переноса

Будем понимать под нестационарным уравнением переноса любое уравнение, в котором источник имеет вид

$$g(\vec{r}, \vec{E}, t) = g_1(\vec{r}, \vec{E})g_2(t), \quad (12)$$

$$g_2(t) = \begin{cases} 1/T_0, & t \in [0, T_0], \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

где T_0 – длительность выброса, а время t отсчитывается от момента прихода ветра в точку вылета гамма-кванта, т. е. от нуля.

С учетом (12) $\tilde{h}_i(\vec{r})$ – аналог $h_i(\vec{r})$ для стационарного случая из (9) – запишется в виде: $\tilde{h}_i(\vec{r}, t) = h_i(\vec{r})g_2(t)$, а оценка η_D (10) – в виде:

$$\tilde{\eta}_D = \sum_{ij} \beta_{ij} \sum_{n=0}^{\infty} w_{\tau_n} \frac{E_{\tau_n} \Sigma^a(E_{\tau_n})}{m_{\tau_n} c_n} \int \tilde{h}_i(\vec{r}_D - \vec{r}_{\tau_n} - \vec{\omega}_{\tau_n} l_n, \tilde{t}_D - \tau_n - l_n/v_{\tau_n}) dl_n, \quad (13)$$

где c – скорость света; t_D – момент прихода ветра в точку вылета гамма-кванта ($t_D = 0$). Если $t_D - \tau_n - l_n/c \leq 0$ или $t_D - \tau_n - l_n/c \geq T_0$, то функция $g_2 = 0$.

При вычислении вклада в детектор (\vec{r}_D, t_D) интеграл в (13) также оценивается по одному случайному узлу.

Заметим, что оценка $\tilde{\eta}_D$ (13) обладает теми же свойствами, что и оценка η_D (10): несмещенность, конечность дисперсии, непрерывность для почти всех траекторий.

Таким образом, взяв в качестве источника разрывную функцию по времени, получим, используя РЛ-оценки потока в точке [2], в качестве решения непрерывную функцию.

Заключение

Рассмотрена модель источника гамма-излучения для задачи оценки радиационной обстановки на местности при поступлении и распространении радионуклидов в атмосфере. Разработана методика расчета создаваемой в воздухе радионуклидами дозы с использованием РЛ-оценок потока в точке, как для стационарного, так и для нестационарного уравнения переноса гамма-излучения.

Отметим, что изложенная здесь методика расчета поглощенной дозы позволяет использовать в качестве источника гамма-квантов (точек распада радионуклидов) в атмосфере. Это, например, может быть решение диффузионного уравнения переноса примеси, данные аэрофото-съемки облака радионуклидов на различные моменты времени, и т. д. Можно также учитывать при задании источника цепочки превращения радионуклидов.

Список литературы

1. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
2. Донской Е. Н. PL-оценки с конечной дисперсией потока в точке // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1997. Вып. 3. С. 48–58.
3. Учет дисперсионных параметров атмосферы при выборе площадок для атомных электростанций: Руководство по безопасности // Серия изданий по безопасности № 50-SG-S3. Вена: МАГАТЭ, 1982.
4. Гусев Н. Г., Беляев В. А. Радиационные выбросы в биосфере: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1986.
5. Stubna M. Calculation of the Annual Effective Dose Equivalents from the Radioactive Cloud in the Vicinity of Nuclear Power Plant under Various Dispersion Conditions // Kernenergie. 1987. Vol. 30, N 3. P. 125–130.
6. Pasquill F. The estimation of the dispersion of windborne material // Meteorol. Mag. 1961. Vol. 9. P. 33.
7. Кочубей Ю. К. Статистическое моделирование кинетических процессов. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004.
8. Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П. и др. Методика С-007 решения методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.

PL-Estimates of Flow at Point to Calculate the Absorbed Dose Generated by Radionuclides in Air

E. N. Donskoy

The local assessment of the radiological situation caused by radionuclides distributed in atmosphere is the task of a higher importance for the radiation safety analysis. If a radionuclide emits gamma photons, it is required to solve the problem of gamma-radiation transport in a homogeneous air medium with a source of radionuclides, which size (as well as the size of detecting area) is several orders higher than the range of influence of a point source of gammas. (The radionuclide source size is about 100 km, the range of influence of a point source of gammas with energy below 10 MeV doesn't exceed several hundred meters.) Such situation causes difficulties in solving the problem with traditional methods using local flow estimates at a point. At the same time, this situation is favorable to apply PL-estimates of flow at a point.

УДК 519.245+539.12

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_146

Геометрические вопросы моделирования траекторий частиц в методике С-007

В. И. Рослов, А. Г. Малькин, А. В. Горбунов

Описаны принципы задания геометрических объектов в методике С-007, предназначенной для решения методом Монте-Карло линейных задач переноса, а также способ построения геометрии задачи. Указаны типы используемых геометрических блоков. На примере осесимметричного блока приведены правила, по которым выведены формулы расчета расстояния до поверхностей. Особое внимание уделено выводу формул для расчета расстояния до тора.

Введение

Методика С-007 [1] предназначена для решения различных задач переноса нейтронов, гамма-квантов и заряженных частиц. Спектр таких задач очень широк. Среди них можно упомянуть расчеты: полей излучений и защиты от излучений; критических параметров систем (в частности, параметров критических сборок); различных задач физики реакторов; задач ядерной безопасности; характеристик ускорителей электронов; тока, заряда и поглощенной энергии в детекторах ионизирующих излучений при их облучении и многие другие. Современная практика расчетов показывает, что большинство этих задач обладают весьма сложной геометрией.

Решение задач переноса частиц методом Монте-Карло, который используется в С-007, осуществляется посредством моделирования процесса прохождения этих частиц через совокупности областей, составляющих геометрию задачи. Область обычно представляет собой замкнутую часть пространства с границей, состоящей из ряда фрагментов поверхностей. Процесс моделирования траектории частицы состоит, главным образом, из расчета свободного пробега моделируемой частицы и поиска расстояния до границы области вдоль направления полета частицы. Алгоритм расчета расстояния до границы области сводится к вычислению расстояния до каждого из фрагментов ограничивающих поверхностей и последующего выбора минимального из этих расстояний. Поскольку граница области состоит в среднем из 5–10 фрагментов, а иногда это число достигает

нескольких десятков, расчет расстояния до границы области составляет значительную долю процесса моделирования траекторий.

Большинство упомянутых выше задач требует детального описания довольно сложных трехмерных геометрических систем, поэтому способ описания геометрии, а также структура формируемых в памяти геометрических данных играют существенную роль для построения эффективного алгоритма моделирования траекторий частиц.

Приведенные в статье средства формирования геометрии задач не являются оригинальными. Похожие методы используются и в других программах ([2, 3]).

Построение геометрической модели

Основным объектом в задании геометрических данных является геометрический блок. Для иллюстрации этого понятия приведем следующий пример. Рассмотрим задачу, геометрия которой представляет собой контейнер, содержащий некоторое количество объектов. Пусть, для определенности, контейнер – это комната, а объекты – стулья. Описать данную геометрию можно двумя способами. В первом подходе комната и ее содержимое рассматриваются как единое целое – используется один блок. Во втором случае комната и стул описываются как отдельные объекты, а вся геометрия получается размещением внутри комнаты нужного количества стульев. Здесь используются два блока. Таким образом, блок – это такой фрагмент геометрии, который имеет самостоятельное значение, например, описывает какой-то предмет. Как видно из примера, блоком может быть и вся геометрия задачи (тогда это единственный блок). Однако второй подход, состоящий в выделении части геометрии (стула) в виде отдельного блока, очевидно, рациональнее, так как, в отличие от первого способа, использует только одно описание стула для задания всего содержимого комнаты.

Таким образом, процесс описания геометрии можно разделить на два этапа. Сначала геометрия задачи разбивается на части, которые описываются как блоки, а затем производится обратная операция – из блоков формируется исходная геометрия. Блоки рассматриваются как независимые «строительные» элементы. Правильно размещенные друг относительно друга, они и составляют требуемую геометрию. В качестве исходного местоположения рассматривается пустое пространство, обладающее лишь системой координат (его можно рассматривать как всегда существующий блок 0-го уровня вложенности). В нем размещаются блоки (1-й уровень вложенности), которые, в свою очередь, могут содержать в себе другие блоки (2-й уровень), и т. д.

На рис. 1 схематично изображена геометрия, полученная из трех различных блоков (1, а): квадрат изображает блок 1 (внутренняя структура блоков для данного примера не важна), круг – блок 2 и треугольник – блок 3. На 1, б представлен результат вложения трех экземпляров блока 3 в блок 2, причем каждое вложение имеет свою ориентацию. Наконец, фрагмент 1с показывает, что представляет собой геометрия в окончательном виде после двухкратного вложения блока 2 в блок 1. Отметим, что оба экземпляра блока 2 содержат все, что в него было вложено.

Теперь обратимся к видам используемых блоков. Если фрагмент геометрии обладает определенной симметрией (например, осевой, сферической и т. п.), то для его описания используется соответствующий тип блока. Различаются блоки следующих типов:

– плоский (поверхности – набор параллельных плоскостей, области – слои между ними);

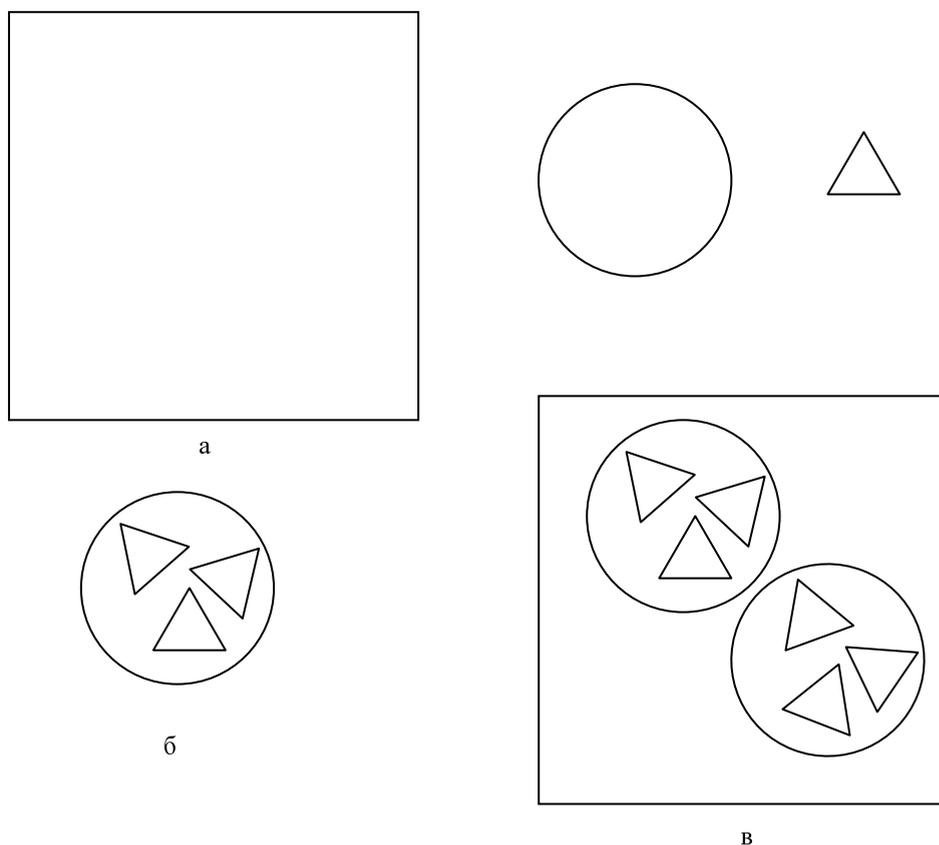


Рис. 1. Иллюстрация возможностей построения геометрии посредством вложений: а – исходные блоки; б – геометрия 1-го уровня вложенности; в – окончательная геометрия

– сферический (поверхности – концентрические сферы, области – сферические слои между ними);

– осесимметричный (поверхности и области – соответственно, поверхности вращения и тела вращения вокруг некоторой оси);

– цилиндрический (поверхности являются прямыми цилиндрами и иногда такой блок называют телом вытяжения).

Есть еще один тип блока, который называется трехмерным и который не обладает никаким видом пространственной симметрии, из чего и произошло название типа.

Как трехмерный можно описать любой блок, однако, если блок обладает какой-либо из указанных выше симметрий, его рациональнее задать как блок с данной симметрией. Это позволяет при его описании использовать меньше символов, что облегчает задание геометрических данных задачи на входном языке. Кроме того, моделирование траекторий частиц производится с использованием более простых формул, что сокращает затраты времени ЭВМ на моделирование каждой траектории процесса блуждания частицы.

Есть еще тип блока, который используется, в основном, для разметки пространства. Подробно о нем – в следующем разделе.

Ячеистые структуры

Среди задач, решаемых с использованием методики С-007, можно выделить расчеты критических параметров активных зон импульсных исследовательских и промышленных реакторов. Особенностью этих задач является их геометрия.

Расположение тепловыделяющих элементов (ТВЭЛов) внутри тепловыделяющих сборок (ТВС) имеет регулярную структуру. Обычно они располагаются в узлах правильной треугольной или (реже) прямоугольной сетки. Количество ТВЭЛов в одной сборке обычно составляет ~200–300 штук. Аналогичная картина наблюдается и для расположения ТВС, которые представляют собой прямые правильные шестиугольные (или четырехугольные) призмы. В активной зоне реактора насчитывается порядка 102 сборки и они также образуют правильную структуру. Таким образом, становится актуальной проблема сравнительно простого и удобного задания регулярного расположения одинаковых геометрических объектов в рамках одной задачи.

Простейшая модель реактора представляет собой цилиндрический стакан с многослойной боковой стенкой и двумя крышками. Внутренность стакана – активная зона – заполнена ТВС. ТВС содержат наборы стержней, которые подразделяются на ТВЭЛы, регулирующие (поглощающие) и конструкционные (рис. 2). Подавляющее число стержней в ТВС составляют ТВЭЛы. Для каждого ТВЭЛа необходимо знать координаты его расположения.

Количество ТВЭЛов может составлять от нескольких десятков до нескольких сотен штук. В свою очередь, в активной зоне может находиться порядка 102 ТВС (рис. 3). Для каждой ТВС требуется задать координаты ее расположения внутри активной зоны. Таким образом, реактор может содержать ~104 ТВЭЛов, и это обстоятельство определяет главные трудности при задании исходных данных реактора.

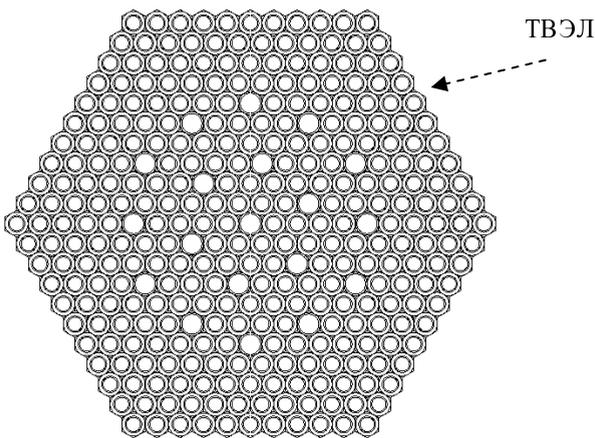


Рис. 2. Совокупность стержней внутри ТВС

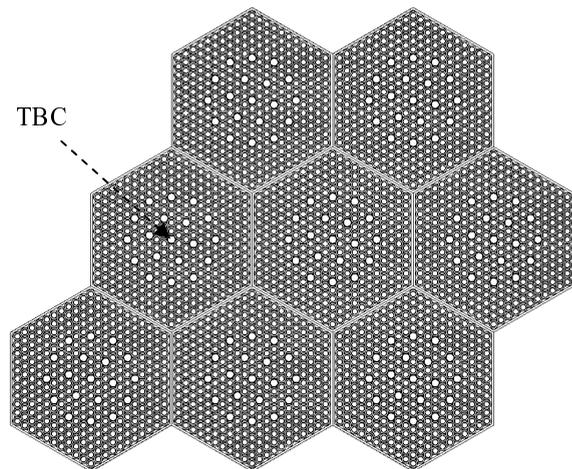


Рис. 3. Фрагмент активной зоны, содержащий несколько ТВС

Штатные возможности методики С-007 позволяют выполнить это задание, например, следующим образом. Описываем все типы стержней в виде осесимметричных блоков. Для описания ТВС используем возможности, предусмотренные для трехмерных блоков. Также в виде осесимметричного блока можно описать и активную зону вместе с ее окружением. Затем, используя

предварительно вычисленные координаты расположения стержней с ТВС, размещаем в нем нужное количество экземпляров блоков, описывающих соответствующие типы стержней.

Аналогичная процедура осуществляется при размещении требуемого количества ТВС внутри области блока, представляющего активную зону. Однако, поскольку исходные данные в программе С-007 задаются в виде текстового файла, запись информации о расположении нескольких сотен стержней в ТВС и, в свою очередь, расположении всех ТВС внутри активной зоны становится довольно трудоемким делом.

Чтобы справиться с подобными проблемами, в геометрии методики существует еще один вид блока – решетка. Он представляет собой двумерный массив одинаковых прямых призм. Основаниями призм могут служить или правильные шестиугольники, или прямоугольники. На рис. 4 изображен пример блока, составленного из шестиугольных призм, и показано положение локальной системы координат. Расстояние между центрами шестиугольников есть так называемый шаг решетки, и он является единственным параметром, характеризующим ее структуру. Для прямоугольной решетки таких параметров два – шаги по длине и ширине прямоугольника. Для законченного описания блока еще требуется указать, какие ячейки (они же области блока) входят в его состав, и определить верхнюю и нижнюю границы, т. е. максимальную и минимальную Z -координаты.

Теперь, чтобы описать ТВС, достаточно будет «расставить» ТВЭЛы и другие стержни по ячейкам блока, не занимаясь расчетом координат их центров. Аналогичным способом можно будет заполнить ТВС активную зону.

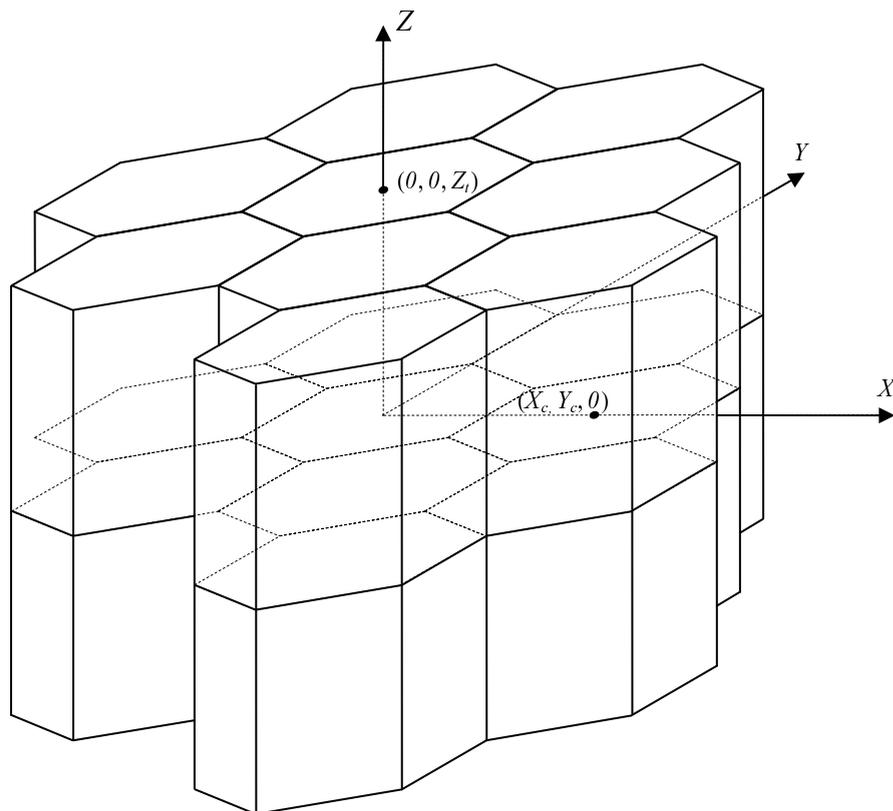


Рис. 4. Пример блока, составленного из шестиугольных призм

Конечно, использовать блок-решетку можно не только для задач, связанных с реакторными расчетами, но и там, где в геометрии задачи есть большое количество объектов, расположение которых позволяет использовать структуру решетки.

Моделирование траектории частицы

Траектория частицы представляет собой набор отрезков в пространстве фазовых координат, определяющих состояние частицы. Концы отрезков, составляющих траекторию этого события (моменты остановки траектории) в жизни частицы: столкновения и пересечения границ между областями, а сами отрезки представляют собой пробег частицы между событиями. Одним из основных компонентов алгоритма моделирования траектории является определение длины пробега частицы до границы области.

Состояние моделируемой частицы от момента ее «рождения» определяется набором фазовых координат, среди которых есть ряд чисто геометрических параметров, которые характеризуют положение частицы в пространстве и направление ее движения:

N_{bl} – номер блока;

N_{pat} – номер экземпляра блока;

N_{reg} – номер области в блоке;

N_{sur} – номер поверхности, на которой находится частица в момент остановки (если этот момент – столкновение, то $N_{sur} = 0$);

x, y, z – декартовы координаты частицы в системе координат данного блока;

α, β, γ – направляющие косинусы вектора, вдоль которого движется частица.

Среди геометрических параметров есть несколько вспомогательных, которые используются для определения новых фазовых координат при пересечении частицей поверхности. К ним относятся:

N_{sur_nxt} – номер поверхности, до которой долетит частица за следующий отрезок траектории;

$N_{bl_nxt}, N_{pat_nxt}, N_{reg_nxt}$ – номера блока, его экземпляра, а также области в этом блоке, который расположен за поверхностью N_{sur_nxt} ;

$N_{bl_pr}, N_{pat_pr}, N_{sur_pr}$ – номера блока, его экземпляра, а также поверхности в этом блоке, на которой находилась частица в момент предыдущей остановки (если этот момент – столкновение, то эти величины равны нулю).

Формулы, использующиеся для расчета расстояния в области для разных типов блоков, приводятся далее, а здесь мы коснемся ситуации, когда требуется найти расстояние до границы вложенного в область блока.

В структурах данных для каждого блока содержится информация о том, как система координат данного блока расположена относительно системы координат объемлющего блока, а именно: заданы координаты центра системы (x_c, y_c, z_c) и матрица направляющих косинусов для координатных осей

c_{11}, c_{21}, c_{31} – направляющие косинусы оси OX ,
 c_{12}, c_{22}, c_{32} – направляющие косинусы оси OY ,
 c_{13}, c_{23}, c_{33} – направляющие косинусы оси OZ .

Когда в области присутствует вложенный блок, то для определения расстояния до него производится преобразование координат частицы и вектора направления ее полета в систему координат вложенного блока, используя для этого вышеупомянутые данные этого блока. Формулы преобразования стандартные и приводятся только для полноты картины

$$\begin{aligned}x' &= c_{11}(x - x_c) + c_{21}(y - y_c) + c_{31}(z - z_c), \\y' &= c_{12}(x - x_c) + c_{22}(y - y_c) + c_{32}(z - z_c), \\z' &= c_{13}(x - x_c) + c_{23}(y - y_c) + c_{33}(z - z_c),\end{aligned}$$

где штрихами обозначены координаты в системе вложенного блока. По аналогичным формулам определяется вектор направления полета. Если частица действительно направляется ко вложенному блоку, то помимо расстояния до него определяются и дополнительные параметры: N_{bl_nxt} – номер этого блока, N_{sur_nxt} – номер поверхности, до которой долетит частица, и N_{reg_nxt} – номер области в этом блоке, который расположен за поверхностью N_{sur_nxt} . Кроме того, определяется N_{pat_nxt} по следующей формуле: $N_{pat_nxt} = (N_{pat} - 1)K_{dbl} + N_{pat_1}$, где K_{dbl} – количество размещений блока N_{bl_nxt} в текущем блоке, а N_{pat_1} – порядковый номер размещения этого блока.

Преобразование координат частицы и вектора ее полета производится еще в ситуации, когда частица вышла на границу блока и требуется перейти в объемлющий блок. Пересчет делается по обратным формулам

$$\begin{aligned}x &= c_{11}x' + c_{12}y' + c_{13}z' + x_c, \\y &= c_{21}x' + c_{22}y' + c_{23}z' + y_c, \\z &= c_{31}x' + c_{32}y' + c_{33}z' + z_c,\end{aligned}$$

где штрихами обозначены координаты в текущем блоке, а без штрихов – координаты в объемлющем блоке, и параметры системы координат взяты из структуры данных вложенного блока. Перейдя в объемлющий блок, частица оказывается в состоянии «внутри области», т. е. параметр $N_{surf} = 0$. Кроме того, в этой ситуации важную роль играют вспомогательные параметры: предыдущие номера блока, экземпляра блока и поверхности, с помощью которых правильно осуществляется возможность снова попасть в только что покинутый блок.

Определение расстояния до границы области

Алгоритм поиска расстояния от точки, принадлежащей области, вдоль вектора направления движения частицы до границы области состоит в переборе всех поверхностей, составляющих границу, и выборе той из них, расстояние до которой минимально. В ряде случаев удастся определить, не вычисляя до конца расстояние, что оно больше минимума из уже найденных расстояний, и это позволяет сократить объем вычислений.

Расчет расстояния до поверхностей плоского и сферического блоков не составляет сложностей. Интерес представляет расчет расстояния до поверхностей осесимметричного и трехмерного блоков.

Далее будем полагать, что точка имеет координаты $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$, а направляющий вектор есть $\vec{\omega} = (\alpha, \beta, \gamma)$. Расстояние до поверхности обозначим t .

4.1. Расстояние в осесимметричном блоке

В качестве оси симметрии выбрана ось OZ декартовой системы координат, поэтому уравнения поверхностей осесимметричного тела могут быть записаны в виде

$$f(x, y, z) = F(\rho, z) = 0, \quad (1)$$

где $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. В плоскости $\{\rho, z\}$ уравнение (1) представляет собой образующую, вращением которой вокруг оси OZ и получена поверхность.

Уравнение прямой, выходящей из точки (x_0, y_0, z_0) с направляющим вектором (α, β, γ) , можно записать в виде

$$\begin{aligned} x &= x_0 + \alpha t, \\ y &= y_0 + \beta t, \\ z &= z_0 + \gamma t. \end{aligned} \quad (2)$$

В координатах (ρ, z) уравнение этого луча будет иметь вид

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \rho_0^2 + 2t(x_0\alpha + y_0\beta) + (1 - \gamma^2)t^2, \\ z &= z_0 + \gamma t, \end{aligned} \quad (2a)$$

где $\rho_0^2 = x_0^2 + y_0^2$. Чтобы найти точки пересечения луча с поверхностью, надо подставить формулы (2) в уравнение поверхности (1)

$$f(x(t), y(t), z(t)) = \Phi(t) = 0 \quad (3)$$

и решить полученное уравнение относительно параметра t . Величина t является расстоянием от точки (x_0, y_0, z_0) до поверхности по направлению (α, β, γ) .

В программе для описания осесимметричных тел используются следующие типы поверхностей: круговой конус, цилиндр, плоскость $z = \text{const}$, сфера, эллипсоид. Это поверхности второго

порядка, и уравнение (3) для этих поверхностей (кроме плоскости) является обычным квадратным уравнением

$$A_0 t^2 + A_1 t + A_2 = 0, \quad (4)$$

решение которого не представляет особого труда.

Кроме того, допустимо использование тороидальных поверхностей, для которых уравнение (3) имеет четвертый порядок. По этой причине расчет расстояния до этих поверхностей становится довольно сложной задачей.

Круговой тор получается вращением окружности с центром в точке (ρ_c, z_c) и радиусом R вокруг оси OZ : $(\rho - \rho_c)^2 + (z - z_c)^2 = R^2$.

Эллиптический тор получается вращением эллипса с центром в точке (ρ_c, z_c) и полуосями a и b вокруг оси OZ : $\frac{(\rho - \rho_c)^2}{a^2} + \frac{(z - z_c)^2}{b^2} = 1$. Здесь не приводится уравнение тора в декартовых координатах, так как в дальнейшем оно не требуется.

Для расчета расстояния от точки (x_0, y_0, z_0) до тора воспользуемся уравнением луча в плоскости $\{\rho, z\}$ вида (2а). Чтобы упростить дальнейшие выкладки, введем переменные

$$\rho' = \rho/a, \quad z' = (z - z_c)/b. \quad (5)$$

Для кругового тора $a = b = R$. В новых переменных уравнение тора имеет вид

$$(\rho' - \rho'_c)^2 + z'^2 = 1, \quad (6)$$

а уравнения для луча есть

$$\begin{aligned} \rho'^2 &= \rho_0'^2 + 2 \frac{(\alpha x_0 + \beta y_0)}{a} t' + (1 - \gamma^2) t'^2, \\ z' &= z_0' + \frac{a}{b} \gamma t', \end{aligned} \quad (7)$$

где $t' = t/a$. Подставляя второе уравнение из (7) в уравнение тора (6), получим систему уравнений для нахождения точек пересечения тора и луча

$$\begin{aligned} (\rho' - \rho'_c)^2 + (z_0' + a/b \gamma t')^2 &= 1, \\ \rho'^2 &= \rho_0'^2 + 2 \frac{(\alpha x_0 + \beta y_0)}{a} t' + (1 - \gamma^2) t'^2. \end{aligned}$$

Введем обозначения $\hat{\gamma} = a/b \gamma$ (для кругового тора $\hat{\gamma} = \gamma$) и $A_{\alpha\beta} = \frac{\alpha x_0 + \beta y_0}{a}$. Тогда, опуская штрихи, получаем систему уравнений в виде

$$\begin{cases} (\rho - \rho_c)^2 + (z_0 + \hat{\gamma} t)^2 = 1, \\ \rho^2 = \rho_0^2 + 2 A_{\alpha\beta} t + (1 - \gamma^2) t^2. \end{cases} \quad (8)$$

В дальнейшем полезным окажется еще одно обозначение: $F_\gamma = 1 - \gamma^2 + \hat{\gamma}^2$.

Заменим второе уравнение в системе (8) разностью уравнений. В полученной разности исчезает член с ρ^2 , что упрощает исследование точек пересечения. Преобразованная система уравнений имеет вид

$$\begin{cases} \rho^2 + \hat{\gamma}^2 t^2 - 2\rho\rho_c + 2t\hat{\gamma}z_0 + (z_0^2 + \rho_c^2 - 1) = 0, \\ t^2 F_\gamma - 2\rho\rho_c + 2t(\hat{\gamma}z_0 + A_{\alpha\beta}) + (z_0^2 + \rho_c^2 + \rho_0^2 - 1) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Умножив второе уравнение системы на $-\lambda$ и сложив его с первым, получим уравнение пучка кривых второго порядка

$$\rho^2 + (\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma) t^2 + 2\rho\rho_c(\lambda - 1) + 2t[\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}] + [(z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2] = 0. \quad (10)$$

Ясно, что если система (9) имеет решения, т. е. соответствующие кривые пересекаются, то и любая кривая пучка (10), задаваемая каким-либо численным значением λ , проходит через все эти точки пересечения. Будем искать в пучке вырожденную кривую, которая в данном случае является парой действительных прямых [4].

Матрица кривой пучка имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \rho_c(\lambda - 1) \\ 0 & \hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma & \hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta} \\ \rho_c(\lambda - 1) & \hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta} & (z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2 \end{pmatrix}.$$

Второй и третий инварианты кривой пучка есть соответственно

$$\begin{aligned} I_2(\lambda) &= \hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma, \\ I_3(\lambda) &= (\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma) \left[(z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda\rho_0^2 \right] - [\hat{\gamma}z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}]^2 - \rho_c^2 (\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma) (1 - \lambda)^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Для вырожденности кривой пучка необходимо, чтобы третий инвариант был равен нулю, т. е. чтобы λ являлась корнем уравнения $I_3(\lambda) = 0$. А чтобы эта кривая пучка была парой действительных прямых, требуется выполнение условия $I_2(\lambda) \leq 0$. Подставляя в последнее неравенство выражение для $I_2(\lambda)$, получаем следующее условие для λ :

$$\lambda \geq \frac{\hat{\gamma}^2}{1 - \gamma^2 + \hat{\gamma}^2} = \lambda_*. \quad (12)$$

Отметим, что $0 \leq \lambda_* \leq 1$.

Вычислим значения третьего инварианта в точках $0, \lambda_*, 1$

$$\begin{aligned} I_3(0) &= -\hat{\gamma}^2 \leq 0, \\ I_3(\lambda_*) &= -\left[\hat{\gamma}z_0(1-\lambda_*) - \lambda_* A_{\alpha\beta}\right]^2 \leq 0, \\ I_3(1) &= (1-\gamma^2)\rho_0^2 - A_{\alpha\beta}^2 = (x_0\beta - y_0\alpha)^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что он имеет, по крайней мере, один корень на промежутке $[\lambda_*, 1]$. Перепишем инвариант в виде полинома третьего порядка

$$I_3(\lambda) = \lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_1\lambda - c, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} a_2 &= \left(F_\gamma(z_0^2 + \rho_0^2 - 1) - \rho_c^2(F_\gamma + \hat{\gamma}^2) - (\hat{\gamma}z_0 + A_{\alpha\beta})^2\right) / \rho_c^2 F_\gamma, \\ a_1 &= \left((1-\gamma^2)\rho_0^2 - A_{\alpha\beta}^2 - \rho_c^2 F_\gamma + \hat{\gamma}^2 - a_2\right) / \rho_c^2 F_\gamma, \\ c &= \hat{\gamma}^2 / \rho_c^2 F_\gamma > 0. \end{aligned}$$

Для оценки поведения полинома (13) потребуется его дискриминант D , для чего преобразуем полином к приведенному виду, сделав замену переменной: $\lambda = x - a_2/3$. Приведенный полином имеет вид: $I(x) = x^3 + 3px + q$, где $p = a_1/3 - (a_2/3)^2$, $q = 2(a_2/3)^3 - a_1(a_2/3) - c$. Теперь дискриминант можно вычислить: $D = (q/2)^2 - p^3$. Нетрудно сосчитать значения приведенного полинома $I(x)$ и его производных при $x = 0$, что даст соответствующие величины для полинома $I_3(\lambda)$ в точке $\lambda = -a_2/3$:

$$\begin{aligned} I_3(-a_2/3) &= q, \\ I_3'(-a_2/3) &= 3p, \\ I_3''(-a_2/3) &= 0. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что точка $\lambda = -a_2/3$ является точкой перегиба для полинома, и этот факт будет использован для выбора начального приближения в итерационном процессе поиска корня.

Известно, что если $D > 0$, то у кубического уравнения есть только один действительный корень. Вспоминая, что у полинома $I_3(\lambda)$ корень на отрезке $[\lambda_*, 1]$ обязательно есть, то этот корень единственный. В этом случае в пучке есть пара действительных прямых и, следовательно, возможны точки пересечения луча с тором.

При $D \leq 0$ кубического уравнения имеется три действительных корня. В этом случае пересечение тора с лучом возможно, если каждому корню соответствует пара действительных прямых в пучке (10), т. е. все корни не меньше λ_* . Напомним правило знаков Декарта для полинома: число положительных корней равно числу N перемен знака в последовательности коэффициентов полинома или меньше N на четное число. Отсюда следует, что, когда $a_2 \geq 0$ или $a_1 \leq 0$, полином (13) имеет только один положительный корень, так как в последовательности коэффициентов есть только одна смена знака. Следовательно, есть корни меньше λ_* и поэтому точек пересече-

ния нет. Таким образом, пересечение луча с тором возможно только при условии $a_2 < 0$ и $a_1 > 0$. В этом случае все корни полинома – положительные – и остается выяснить, имеются ли корни меньше λ_* . Для этого запишем полином (13) по степеням $(\lambda - \lambda_*)$: $I(\lambda - \lambda_*) = (\lambda - \lambda_*)^3 + (\lambda - \lambda_*)^2 d_2 + (\lambda - \lambda_*) d_1 + I_3(\lambda_*)$, где $d_2 = 3\lambda_* + a_2$, $d_1 = (3\lambda_* + 2a_2)\lambda_* + a_1$.

Снова применяя правило Декарта, видим, что все корни исходного полинома будут не меньше λ_* только при $d_2 < 0$ и $d_1 > 0$ и, следовательно, только в этом случае возможны пересечения луча с тором.

При условии пересечения луча с тором подходящий корень полинома предлагается вычислять методом Ньютона. При этом начальное приближение к корню удобно выбирать так, чтобы процесс итераций сходился монотонно к корню. Если $D > 0$, то имеется один корень и начальное приближение λ_0 выбирается следующим образом (вспомним значение полинома в точке перегиба): $\lambda_0 = \lambda_*$, если $q \geq 0$, $\lambda_0 = 1$, если $q < 0$. При первом значении λ_0 процесс сходится монотонно к корню слева, а при втором – справа.

При $D \leq 0$ имеется три подходящих корня, причем один из корней может быть кратным или почти кратным. Поскольку метод Ньютона сходится медленно при поиске такого корня, то следует искать простой корень. Для поиска простого корня начальное приближение выбирается следующим образом. Если $D \geq -\varepsilon$ (ε – достаточно малое число) и $q \leq 0$, в качестве начального приближения λ_0 берем следующее выражение [3]: $\lambda_0 = -a_2/3 + 2\sqrt{-p}$, которое является оценкой сверху максимального корня. При этом итерационный процесс будет сходиться монотонно к простому корню слева. Если $D < -\varepsilon$ или $q > 0$, то в качестве λ_0 берем λ_* , и в этом случае итерационный процесс сходится монотонно к простому корню справа. Процесс сходимости к корню можно заметно ускорить, если воспользоваться методом Ньютона второго порядка [5].

Пусть теперь λ – найденный выше корень. Тогда из равенства нулю инварианта $I_3(\lambda)$ получаем

$$(z_0^2 + \rho_c^2 - 1)(1 - \lambda) - \lambda \rho_0^2 = \frac{[\hat{\gamma} z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}]^2}{(\hat{\gamma}^2 - \lambda F_\gamma)} + \rho_c^2(1 - \lambda)^2. \quad (14)$$

Используя это равенство в уравнении пучка (10), получаем

$$[\rho - \rho_c(1 - \lambda)]^2 = \left[\sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2} t - \frac{\hat{\gamma} z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}}{\sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2}} \right]^2.$$

Извлекая квадратный корень из обеих частей, получаем уравнения пары прямых: $\rho = \pm \sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2} t + \rho_c(1 - \lambda) \mp \frac{\hat{\gamma} z_0(1 - \lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}}{\sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2}}$. Так как $\lambda_* = \hat{\gamma}^2 / F_\gamma$, то при $\lambda = \lambda_*$ в уравнениях есть особенность. Чтобы избавиться от нее, воспользуемся равенством (14). Тогда уравнения прямых приобретут вид

$$\rho = \pm \sqrt{\lambda F_\gamma - \hat{\gamma}^2} t + \rho_c(1 - \lambda) \mp s \sqrt{(1 - \lambda) \left[z_0^2 + (\rho_0 - \rho_c)^2 - 1 \right] - [\rho_0 - \rho_c(1 - \lambda)]^2}, \quad (15)$$

где $s = \text{sign}[\hat{\gamma}z_0(1-\lambda) - \lambda A_{\alpha\beta}]$. Подставляя поочередно полученные выражения в первое уравнение системы (9), получаем два квадратных уравнения для определения значений t в момент пересечения луча с тором. Поскольку решение проводилось для штрихованных переменных, окончательное значение расстояния от точки (x_0, y_0, z_0) до тора получается умножением t на a .

Стоит отметить, что метод получения корней посредством выделения вырожденной кривой в пучке кривых второго порядка взят из работы [6].

4.2. Расстояние в трехмерном блоке

Трехмерный блок используется для задания геометрии объектов, которые не описываются иным способом. Геометрия блока описывается с помощью элементарных объемов. Элементарный объем – это часть пространства, ограниченная поверхностью второго или первого порядка, лежащая с отрицательной стороны от поверхности, а области блока задаются посредством теоретико-множественных операций, производимых над элементарными объемами. Это не вполне традиционное использование стороны поверхности в теоретико-множественном описании области. Обычно со знаком «плюс» в описываемый объем входит часть пространства, лежащая с положительной стороны от поверхности. Однако, используемый нами подход имеет свои достоинства: так, элементарный объем, задаваемый сферой, является шаром, цилиндр определяет свою внутренность, и т. д.

Расстояние до поверхности, ограничивающей область блока, определяется подобно тому, как это делается в случае осесимметричного блока. Подстановка уравнения траектории частицы $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{\omega}t$ в уравнение поверхности $F(\vec{r}) = 0$ приводит к квадратному уравнению: $At^2 + 2Bt = F_{\text{sur}}$, решая которое находится искомое расстояние. Проверка его пригодности производится с помощью теоретико-множественной формулы, задающей данную область. Отметим смысл коэффициентов квадратного уравнения: B есть скалярное произведение вектора внешней нормали к поверхности на направление полета $\vec{\omega}$, а F_{sur} – значение точки \vec{r}_0 на поверхности.

Заключение

Приведенный в статье способ задания геометрии, принятый в методике С-007, неплохо себя зарекомендовал. Особенно отчетливо проявляются его достоинства, когда проводятся расчеты серии задач, геометрия которых отличается расположением какого-либо фрагмента, описанного в виде блока. В таких случаях изменения в исходных данных разных задач оказываются минимальными.

Надеемся также, что метод получения точек пересечения прямой с тором посредством выделения вырожденной кривой из пучка представит интерес для читателя.

Список литературы

1. Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П. и др. Методика C-007. Решение методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.
2. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Version 4a / Ed. by J. F. Briesmeister. Los Alamos National Laboratory, 1993.
3. Kandiev Y. Z., Kashaev E. A., Khatuntsev K. E. et al. PRIZMA status // Proc. Joint international conference on supercomputing in nuclear applications and Monte Carlo. Paris, France, 27–31 October 2013.
4. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1970.
5. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 2. М.: Физматгиз, 1962.
6. Стародетко Е. А. Элементы вычислительной геометрии. Минск: Наука и техника, 1986.

Geometric Problems of Simulating Particle Trajectories in the C-007 Code

V. I. Roslov, A. G. Mal'kin, A. V. Gorbunov

The principles of defining geometric objects are described in the C-007 code for solving linear transport problems with the Monte Carlo method. The way of constructing the problem geometry is described and the geometric block types are given. The derivation of formulas to calculate the distance to a surface is shown by the example of an axially symmetric block. Special attention is paid to the calculation of the distance to torus.

УДК 519.6

DOI 10.53403/978591505163_2021_26_1_160

Методика «ПИ» моделирования протонных изображений

К. Л. Михайлюков, И. В. Храмов,
А. В. Скобеев, С. В. Потапов, Н. В. Фролова,
М. Д. Романова

Описана методика ПИ (протонные изображения), предназначенная для математического моделирования прохождения пучка протонов через различные объекты и магнитную оптику с целью расчетного моделирования протонных изображений объектов. Программная реализация методики необходима для сопровождения имеющихся и перспективных протонных радиографических установок и состоит из двух модулей, выполняющих моделирование на основе методов лучевых сумм и Монте-Карло. Последняя версия программной реализации ПИ дополнена подсистемой автоматизированной подсистемой подготовки и запуска задач ПИ (АПИ). Подсистема АПИ обеспечивает автоматизированное задание параметров расчета, их просмотр, редактирование, проверку, а также запуск на выполнение расчетов протонных изображений методами лучевых сумм и Монте-Карло. Кратко описаны результаты валидации методики, приводятся некоторые примеры смоделированных протонных изображений.

Введение

Метод протонной радиографии с использованием магнитных линз, впервые появившийся в Лос-Аламосе в середине 1990-х гг. и применяемый на ускорителе У-70 (г. Протвино) с 2005 г., зарекомендовал себя как качественный инструмент по исследованию газодинамических процессов с высоким пространственным разрешением. Данный метод обладает серьезными преимуществами перед рентгеновской радиографией: многокадровостью, высокой проникающей способностью и большим полем обзора.

Для математического обеспечения и сопровождения экспериментов, проводимых на протонных радиографических установках, была разработана методика ПИ, на программную реализацию которой в 2014 г. было получено свидетельство о государственной регистрации.

Программная реализация ПИ состоит из двух модулей, выполняющих моделирование на основе методов лучевых сумм и Монте-Карло. Последний модуль базируется на реализации объектно-ориентированной библиотеки классов GEANT4, предназначенной для моделирования прохождения элементарных частиц через вещество.

С помощью смоделированных протонных изображений с различными настройками магнитооптической системы осуществляется выбор оптимальных значений коллиматоров, устанавливаемых в фурье-плоскости, и токов в магнитных квадрупольных линзах, для получения наиболее информативных экспериментальных снимков.

В работе дается представление о текущей версии программной реализации методики ПИ, созданной для математического моделирования процесса прохождения пучка протонов через 2D- и 3D-объекты и расчета протонных изображений объектов. Дано краткое описание используемых алгоритмов и функций. Представлены расчетные изображения.

Учитываемые процессы

Остановимся коротко на процессах, которые возникают при прохождении протонов через просвечиваемые объекты и магнитную оптику и которые необходимо учесть при моделировании протонных изображений.

Во-первых, вследствие многократного кулоновского рассеяния (МКР) на выходе из объекта протон отклоняется от начального направления на некоторый угол θ , а также смещается на некоторое расстояние Δx от своей прямолинейной траектории (рис. 1).

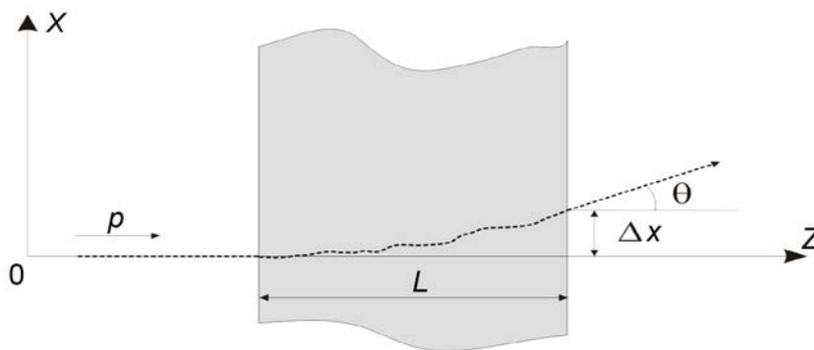


Рис. 1. Отклонение и смещение протонов под воздействием МКР

По формуле из работы [1] при энергии протона 70 ГэВ и толщине объекта из вольфрама 150 мм угол отклонения составит 1,4 мрад, а смещение – 120 мкм. При энергии протона 50 ГэВ угол отклонения – 1,9 мрад, а смещение – 170 мкм. Значительный угол отклонения свидетельствует о том, что без магнитной оптики, компенсирующей МКР, уже на расстоянии 1 м от объекта изображение будет крайне размытым (размытие $\geq 1,4$ мм). Смещение также существенно.

Второй процесс, который необходимо учитывать, – это ионизационная потеря энергии и ее флуктуация. На рис. 2 представлены спектры импульса протонов с начальным импульсом 50 ГэВ/с, прошедших через объекты из вольфрама разной толщины.

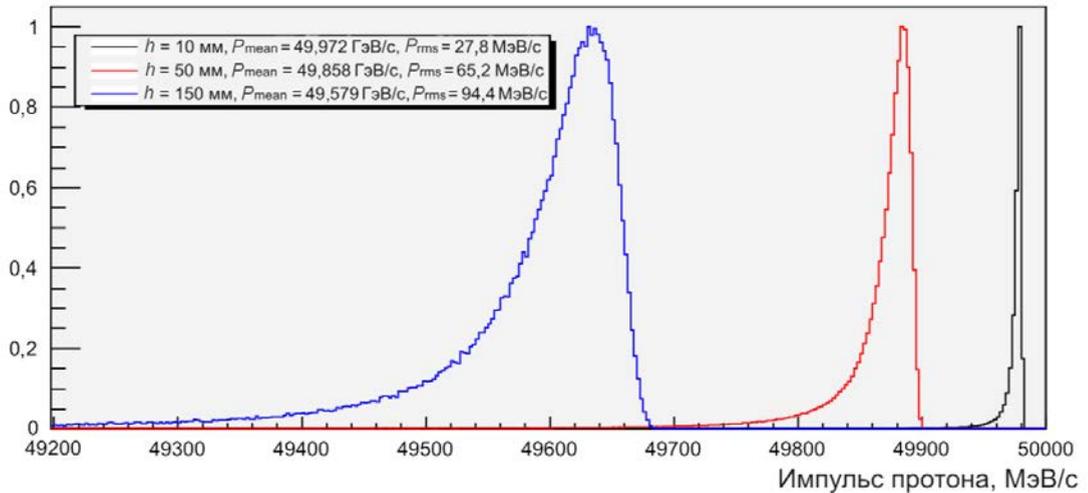


Рис. 2. Спектр импульса протонов с начальным импульсом 50 ГэВ/с, прошедших через объекты из вольфрама различной толщины: $h = 10$ мм (черный цвет), 50 мм (красный цвет), 150 мм (синий цвет)

Видно, что по мере увеличения толщины среднеквадратичное отклонение импульса возрастает (при толщине 150 мм оно составит почти 100 МэВ/с). Это приводит к значительной хроматической абберации. В самом деле, за объектом находится магнитная оптика, фокусирующая протоны на плоскость регистрации, и она может быть настроена на фокусировку протонов только с определенным импульсом. Отклонение от этого импульса даст неполную фокусировку (хроматическую абберацию), приводящую к размытию изображения.

Следующие процессы – это неупругое и упругое ядерное рассеяние. Протоны могут попасть в ядро и возбудить его или развалить с образованием большого количества вторичных частиц (неупругое взаимодействие). Это основной процесс, за счет которого протонный пучок на выходе из объекта несет информацию о распределении массовой толщины внутри объекта. Для железа, например, длина неупругого ядерного взаимодействия составляет около 130 г/см^2 , а для свинца – 200 г/см^2 [1].

Упругое ядерное рассеяние, когда ядро отдачи не возбуждается, приводит к дополнительному рассеянию и размытию изображения. Для оптически тонких объектов только небольшая часть протонов испытывает упругое рассеяние, но при этом угол рассеяния (для железа – около 2 мрад, для дейтерия – около 5 мрад) велик по сравнению с углом МКР. Для оптически плотных объектов доля протонов, испытавших хотя бы одно упругое рассеяние, возрастает, но при этом угол рассеяния становится сравнимым с величиной МКР. То есть процесс упругого ядерного рассеяния также необходимо учитывать.

Наконец, существует влияние регистратора. Протон, попадая в сцинтиллятор, за счет вторичных частиц выделяет энергию не только вдоль своей траектории, но и на значительном расстоянии от нее. Есть еще также оптические процессы, связанные с фокусировкой, переотражением света от границ сцинтиллятора и объемным рассеянием света. Все это приводит к размытию изображения. Данное размытие для используемого сцинтиллятора было экспериментально изме-

рено в 2008 г. [2, 3], оно оказалось близким к расчету энерговыделения по программе Geant4 (рис. 3).

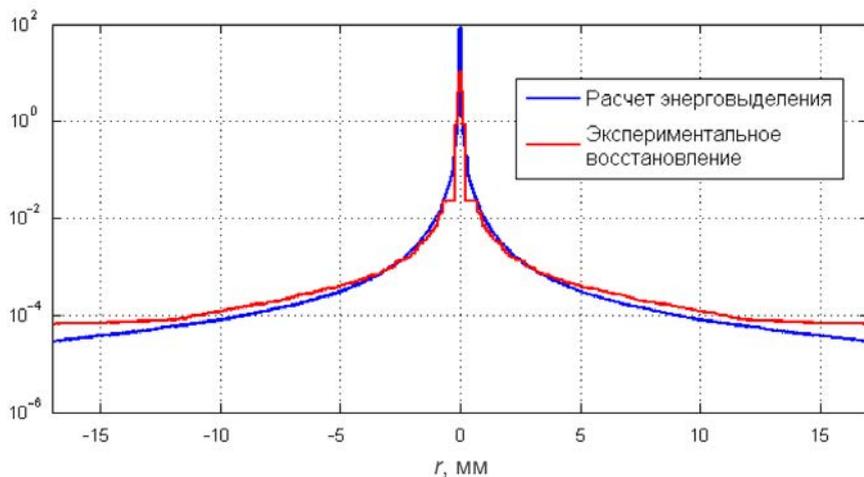


Рис. 3. Функция размытия точки, восстановленная экспериментально (красный цвет), а также расчетное распределение энерговыделения в сцинтилляторе (синий цвет)

Данный фактор приводит к небольшому размытию изображений и значительным искажениям восстановленных массовых толщин.

Структура программной реализации методики

Программная реализация методики ПИ (рис. 4) состоит из двух независимых программных модулей, реализующих методы лучевых сумм и Монте-Карло.

В рамках метода лучевых сумм реализованы *дифференциальный* и *интегральный* алгоритмы построения изображений.

В дифференциальном алгоритме весь объект, в зависимости от требуемой точности и длины, делится несколькими плоскостями, перпендикулярными направлению радиографирования (рис. 5). Все плоскости разбиваются на одинаковое количество прямоугольных ячеек.

Для первой плоскости, исходя из параметров падающего пучка, в каждой ячейке задаются плотность протонов, средний угол полета, дисперсия угла, средняя энергия. Для первой пары плоскостей определяется вероятность полета протонов из каждой ячейки плоскости i в каждую ячейку плоскости j . Для отрезков, соединяющих эти ячейки, определяются вероятности поглощения протонов, угол рассеяния, потеря энергии. Для каждой ячейки плоскости j данные величины и вероятности со всех направлений суммируются. Тем самым пересчитываются все параметры протонного пучка из плоскости i в плоскость j . Далее операция повторяется для следующей пары плоскостей, и т. д. Этими пересчетами учитывается непрерывное кулоновское рассеяние протонов в объекте. На заключительном этапе методом Монте-Карло рассчитывается прохождение через магнитооптическую систему.

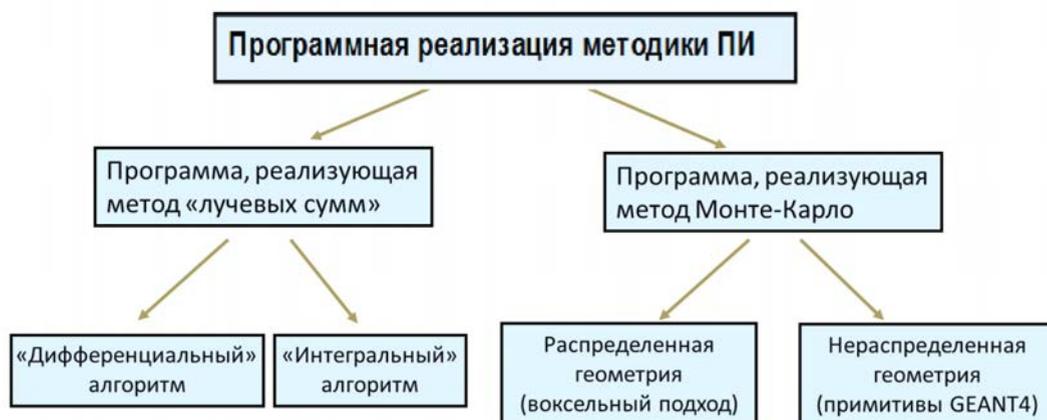


Рис. 4. Структура программной реализации методики ПИ

Данный метод исторически был реализован первым. Однако, если его реализовывать с большой детализацией, то время расчета может приблизиться к прямому расчету методом Монте-Карло. Поэтому после разработки интегрального алгоритма работы по нему были приостановлены.

В интегральном алгоритме время расчетов лучевых сумм на порядки меньше. В этом алгоритме отклонение протонов и их смещение от оси луча учитываются с помощью теории Ферми – Эйгеса [4], которая была адаптирована к протонной радиографии. В рамках этой теории все возможные распределения веществ вдоль направления полета протонов учитываются с помощью нескольких интегралов вдоль луча, по которым в плоскости после объекта генерируется совместное распределение смещения протонов от прямолинейной траектории и угла рассеяния.

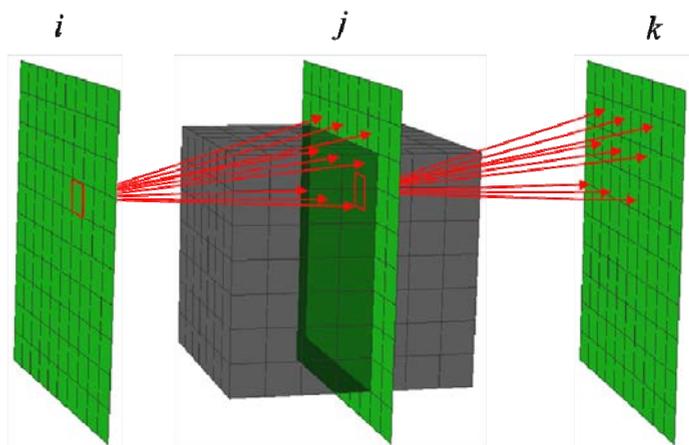


Рис. 5. Схема реализации дифференциального алгоритма

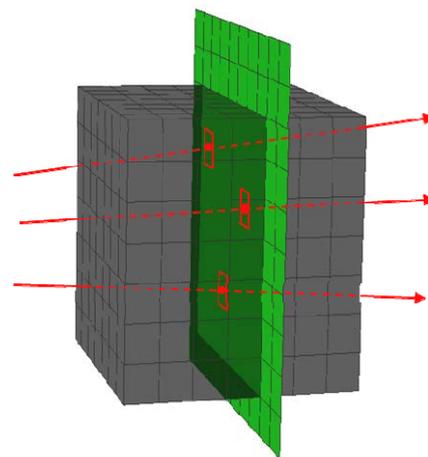


Рис. 6. Схема реализации интегрального алгоритма

В интегральном алгоритме центральная плоскость объекта разбивается на ячейки, для каждой из которых вычисляется направление полета протонов согласованного пучка (рис. 6, см. также цветную вкладку).

Для каждого направления вычисляются вероятность поглощения протонов, средняя потеря энергии, а также интегралы вида:
$$I_n = \int_0^z (z - z')^n \frac{d\sigma^2(z')}{dz'} dz'$$
. По этим интегралам генерируется со-

вместное распределение смещения протонов от прямолинейной траектории и угла рассеяния. Далее методом Монте-Карло рассчитывается прохождение через магнитную оптику с учетом потери энергии и поглощения.

Интегральный алгоритм имеет параллельную реализацию с использованием MPI интерфейса и позволяет сравнительно быстро получать протонные изображения. На данный момент это основной метод получения протонных изображений.

Программный модуль, реализующий метод Монте-Карло, основан на программе с открытым кодом Geant4 [5, 6], созданной в ЦЕРН. Программный модуль имеет параллельную реализацию с использованием MPI интерфейса, в нем реализованы две полунезависимые ветви, в которых геометрия представляется либо в виде примитивов Geant4, либо в виде вокселей с различными веществами и плотностями. В первом случае, на каждом MPI процессе генерируется идентичная геометрия объекта, моделирование выполняется с индивидуальными пучками протонов (различными по начальным значениям частиц). Алгоритмически в одном параллельном приложении каждый процесс выполняет самостоятельную задачу, количество которых равно числу используемых процессоров. Процесс моделирования в данной постановке задачи является хорошо масштабируемым и может быть выполнен на любом доступном количестве процессоров без ухудшения времени выполнения расчета. Определив размер пучка протонов для одного эксперимента с оптимальным временем выполнения, можно практически неограниченно увеличивать совокупный объем частиц. Подобный метод используется для моделирования статических тест-объектов, которые можно задать как некоторую совокупность примитивов (сферических и цилиндрических оболочек, торов, параллелепипедов, конусов и т. д.).

Для реализации воксельной геометрии на базе классов программы Geant4 был разработан набор производных классов, позволяющих задавать геометрию в виде вокселей с различными веществами и плотностями, получаемыми в результате газодинамических расчетов, а также выполнять моделирование с различными типами межпроцессорных распределений геометрии. В случае если объем данных небольшой, геометрия хранится на каждом MPI-процессе и процесс радиографирования идет независимо. При моделировании большого объема данных, превышающего объем оперативной памяти вычислительного узла, возникает вопрос о межпроцессорном распределении геометрии.

В текущей версии программной реализации представлено два способа распределения. Первый – это разбиение перпендикулярно оси полета протонов (рис. 7,а). На первом процессе, где хранится начало геометрии, генерируется порция протонов. Протоны, достигающие конца геометрии, записываются в буфер. Когда вся порция протонов промоделирована, буфер передается на следующий процесс, а на первом генерируется новая порция протонов. И так далее. Процесс повторяется до тех пор, пока не будут смоделированы все порции. То есть был реализован конвейерный способ моделирования.

Альтернативный способ – разбиение плоскостями вдоль оси (рис. 7,б). Моделирование также происходит порциями. На каждом процессе генерируется порция протонов, которая ведется до конца своего сегмента геометрии и формирует конечное изображение. Протоны,

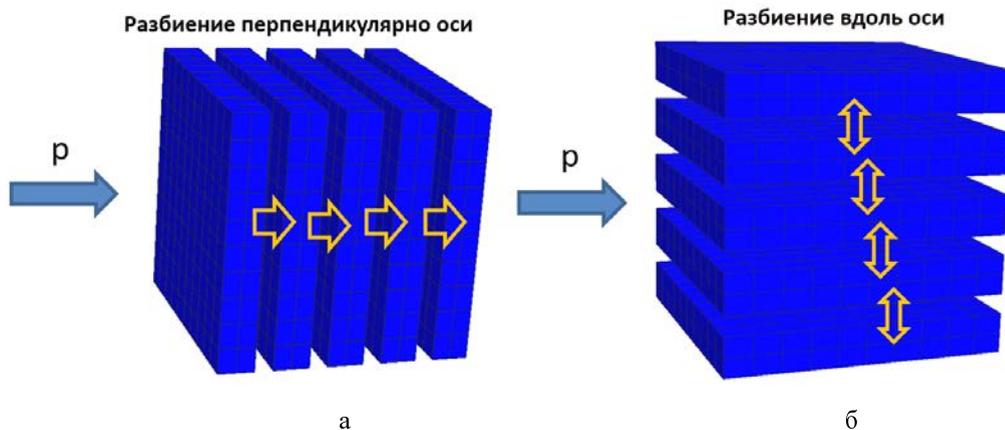


Рис. 7. Схема разбиения воксельной геометрии: а – перпендикулярно оси и б – вдоль оси

пересекающие границу между областями, записываются в буфер, и в конце моделирования порций на каждом процессе данные процессы обмениваются буферами между собой. Обмен буферами продолжается, пока в них не закончатся протоны. Затем моделируется следующая порция и т. д., пока не выполнится моделирование всех протонов. На заключительном этапе изображения с каждого процессора объединяются.

АПИ

Последнюю версию программной реализации ПИ дополнила АПИ, необходимость которой обусловлена требованиями создания вычислительной среды для выполнения пакета заданий – специализированной файловой системы окружения для каждого расчета. Подготовка заданий в ручном режиме является достаточно затратным по времени и не исключающим ошибки процессом.

Подсистема АПИ обеспечивает автоматизированное задание параметров расчета, их просмотр, редактирование и проверку, возможность запуска переинтерполяции сеточных величин, а также запуск на выполнение расчетов протонных изображений методами лучевых сумм и Монте-Карло.

АПИ предоставляет пользователю веб-интерфейс, обеспечивающий ввод и редактирование параметров расчета посредством веб-браузера. На рис. 8 показано основное окно интерфейса АПИ. Дополнительные окна обеспечивают возможность определения необходимой конфигурации параметров, а также управления архивами данных.

Л Протонные изображения

Подготовка исходных данных

| | |
|--|--|
| Данные для выполнения расчетов | |
| Дата | 06.07.2017 |
| Каталог подготовки исходных данных для расчета | /var/tmp/proto/user1 |
| Архив | user1_LS_2017_07_06_14_03 <input type="button" value="Развернуть"/> <input type="button" value="Удалить"/> <input type="button" value="Общий доступ"/> |
| Номер темы | 1111 |
| Файл материалов | /home/xx_config/_matter_kubik.bt рекомендуется обработать локальный файл материалов командой: dos2unix имя_файла <input type="button" value="Проверить"/> |
| Файл конфигурации | / config/config.bt |
| Каталог разрезов | /home/xx/user1/_efr <input type="button" value="Получить список"/> |
| Список разрезов <i>обновить после получения списка- F5</i> | /home/xx/user1/_efr/_cylindr_fe.efr /home/xx/user1/_efr/_klin.efr /home/xx/user1/_efr/_kubik.efr /home/xx/user1/_efr/_kubik_al.efr /home/xx/user1/_efr/_kubik_fe.efr |
| Количество разрезов (определяется автоматически после сохранения данных формы) | 5 |
| Математик | Ivanov Ivan Ivanovich |
| Переинтерполяция | |
| Просмотр текущих параметров | <input type="button" value="Просмотр"/> |
| Указать каталог efr-разрезов (входных) | |
| Определить параметры | <input type="button" value="Параметры"/> |
| Выполнить переинтерполяцию | <input checked="" type="radio"/> Да <input type="radio"/> Нет |
| Расчет | |
| Тип расчета | <input checked="" type="radio"/> Лучевые суммы <input type="radio"/> Монте-Карло |
| Определить дополнительные параметры для метода лучевых сумм | <input type="button" value="Параметры"/> |
| Конфигурация МО | Миско <input type="button" value="Просмотр"/> |
| Размер источника (см) | по X: 2 по Y: 2 |
| Разбиение | по X: 2000 по Y: 2000 |
| Число частиц | 5 $\cdot 10^4$ |
| Центр поля обзора (см) | Xc: 1.7 Yc: 0 Zc: 0 |
| Направление просвечивания | <input type="radio"/> вдоль X <input type="radio"/> вдоль Y <input type="radio"/> вдоль Z |
| Направление разбиения геометрии (метод Монте-Карло) | <input type="radio"/> <input type="radio"/> |
| Число разбиений геометрии | 1 |
| Количество глобальных запусков | 1 |
| Несеточные объекты | |
| Тип РО <i>обновить после сохранения конфигурации- F5</i> | выбрать тип РО из списка <input type="button" value="Просмотр"/> |
| Параметры интегр. алгоритма | |
| MP3 параметры | |
| Длина фрагмента (px) | 100 |
| Окантовка (px) | 50 |
| Характеристики расчета | |
| Время счета | |
| Комментарий | |
| <input type="button" value="Подтвердить"/> <input type="button" value="Сохранить"/> <input type="button" value="Сбросить"/> <input type="button" value="Справка"/> | |

Рис. 8. Основное окно интерфейсов АПИ

После успешного сохранения всех параметров расчета на стороне вычислительного сегмента пользователю достаточно активировать управляющий скрипт, который формирует специальную файловую систему окружения пакета заданий (рис. 9).

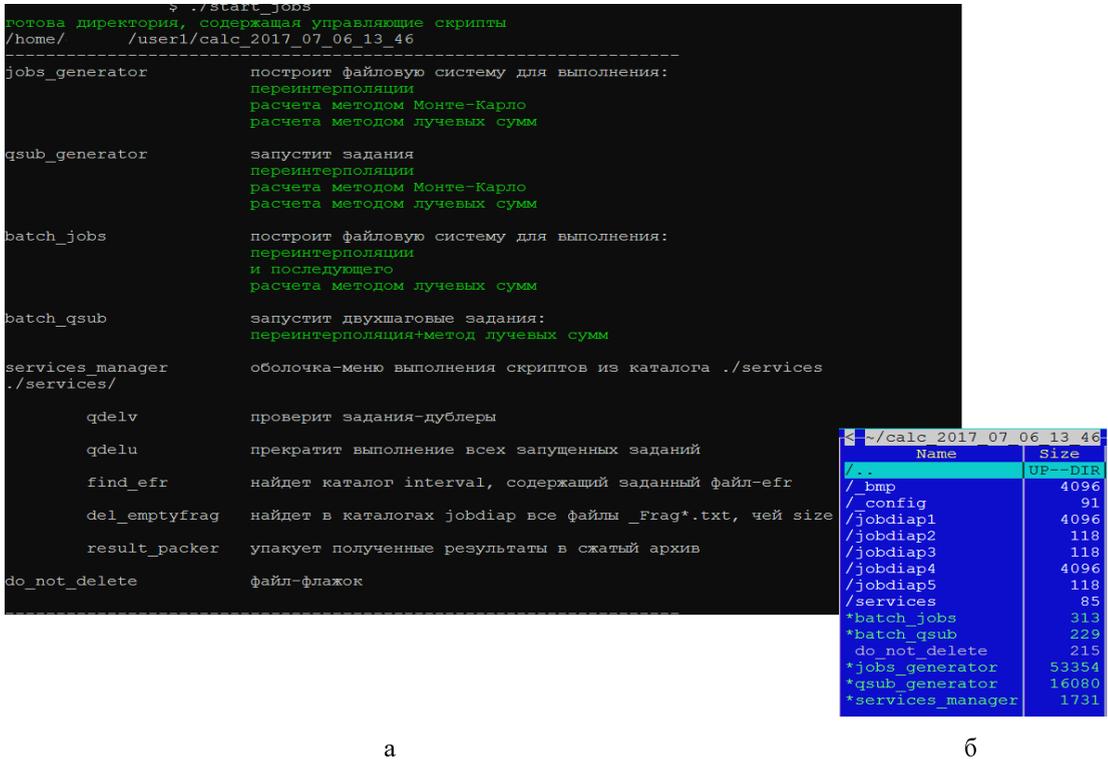


Рис. 9. Результат работы скрипта start_jobs: а – информационное сообщение; б – директория, подготовленная для запуска и сопровождения заданий

Управляющая оболочка обеспечивает необходимый для выполнения и обслуживания пакета заданий сервис. Сохранение конфигурации расчета возможно в случае как успешного завершения задачи, так и аварийного прерывания. Сопроводительная информация о проведенных расчетах хранится во встроенной базе данных, которая представляет собой репозиторий указателей (ссылок) на архивы данных.

Большая часть служебных операций администратора подсистемы АПИ, включающая создание каталогов, добавление и редактирование файлов конфигурационных файлов, регистрацию/удаление пользователей, ведение встроенной базы данных, регулярное резервирование всех данных, также автоматизирована.

Тестирование программной реализации методики ПИ

Тестирование проходило в двух направлениях. Во-первых, на основе сравнения с верифицированным комплексом программ Geant4 проверялся интегральный алгоритм метода лучевых сумм. На рис. 10 изображена одна из моделируемых геометрий, состоящая из трех разнесенных пластин, а на рис. 11 – сравнительные распределения размытия протонов для этой геометрии в плоскости регистрации, полученные с помощью Geant4 и «интегрального» алгоритма. На рис. 12 представлены спектры протонов с начальным импульсом 50 ГэВ/с после прохождения

через железную пластину толщиной 100 мм, также полученные с помощью Geant4 и интегрального алгоритма. Видно, что полученные различными способами хорошо совпадают между собой, что подтверждает работоспособность интегрального алгоритма.

Кроме того, на основе сравнения с экспериментом проверялась программа, реализующая метод Монте-Карло. На рис. 13 представлены смоделированные и экспериментальные протонные радиограммы, а также профиль изображения вдоль пунктирных линий. Видно также неплохое соответствие результатов.

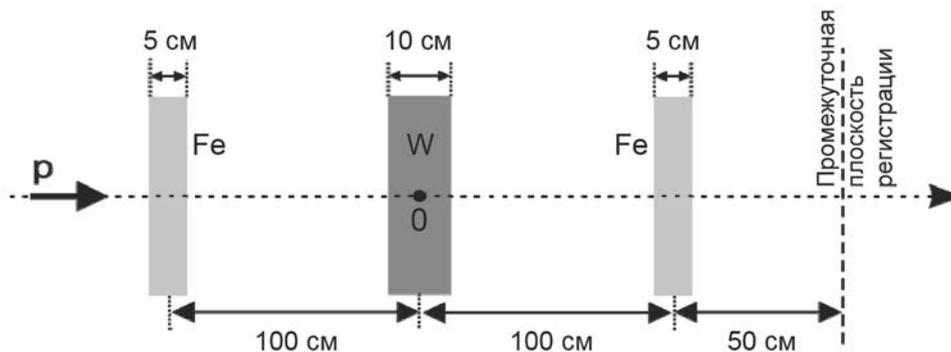


Рис. 10. Геометрия моделирования для тестирования интегрального алгоритма

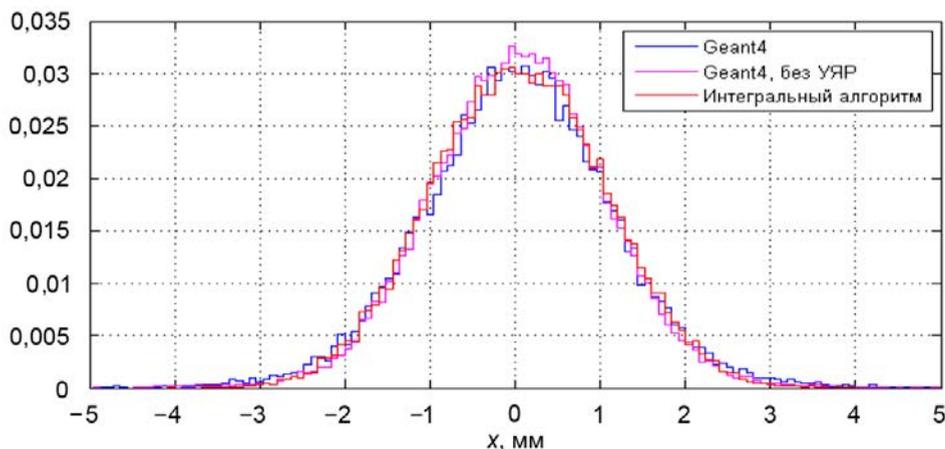


Рис. 11. Сравнение расчетов Монте-Карло (Geant4), расчетов Geant4 без упругого ядерного рассеяния (УЯР) и расчетов по интегральному алгоритму: размытие протонов в плоскости регистрации

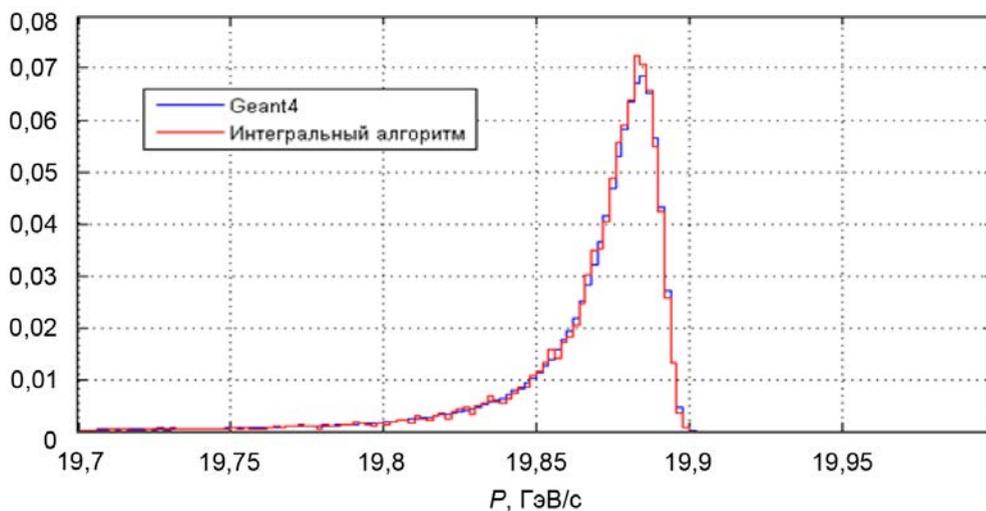


Рис. 12. Сравнение расчетов Монте-Карло (Geant4) и расчетов по интегральному алгоритму: спектр протонов с начальным импульсом 50 ГэВ/с после прохождения через железную пластину толщиной 100 мм

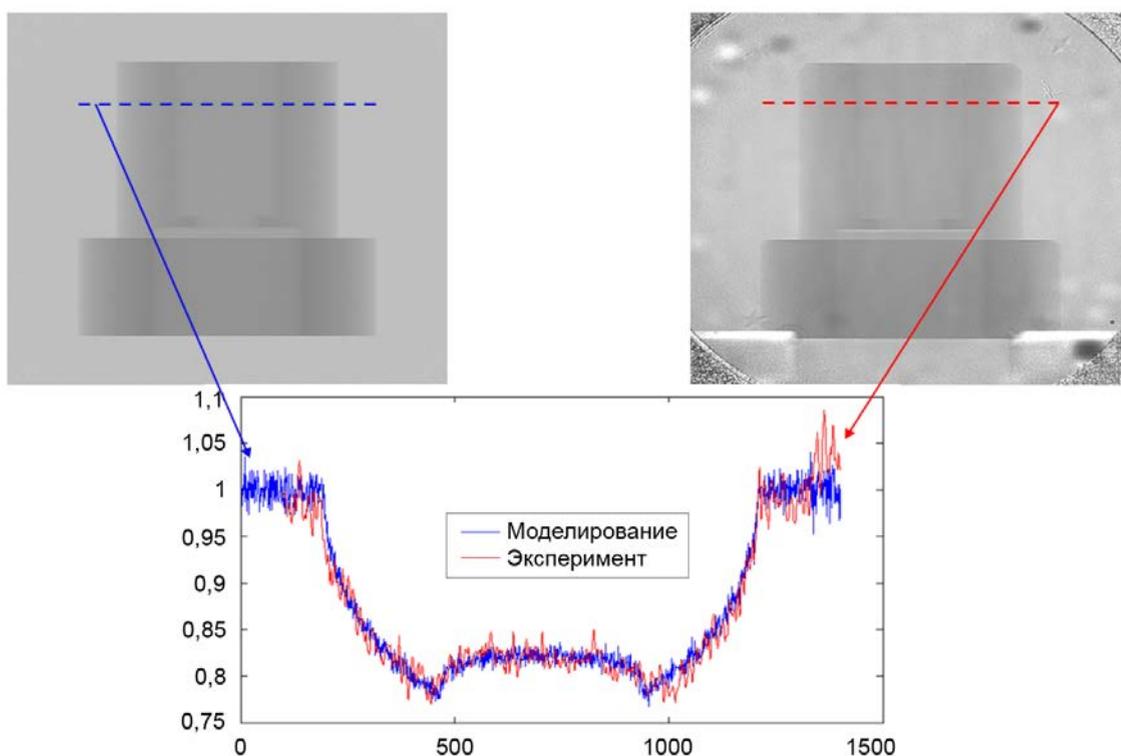


Рис. 13. Смоделированное (слева) и экспериментальное (справа) протонные изображения тест-объекта, а также профиль изображения вдоль пунктирных линий (снизу)

Примеры расчетов по методике ПИ

Приведем некоторые примеры расчетов по методике ПИ.

Пример 1. При исследовании динамики схождения сферических железныхборок встал вопрос о выборе взрывозащитных камер для проведения экспериментальной отработки: использовать имеющиеся в наличии или изготавливать новые. Выполненные по методике ПИ расчеты продемонстрировали, что при использовании имеющихся железных взрывозащитных камер без радиографических окон информативность получающихся протонограмм достаточна для исследования процессов, протекающих в сборках. Смоделированные протонные изображенияборок на некоторый момент времени с использованием двух разных взрывозащитных камер представлены на рис. 14.

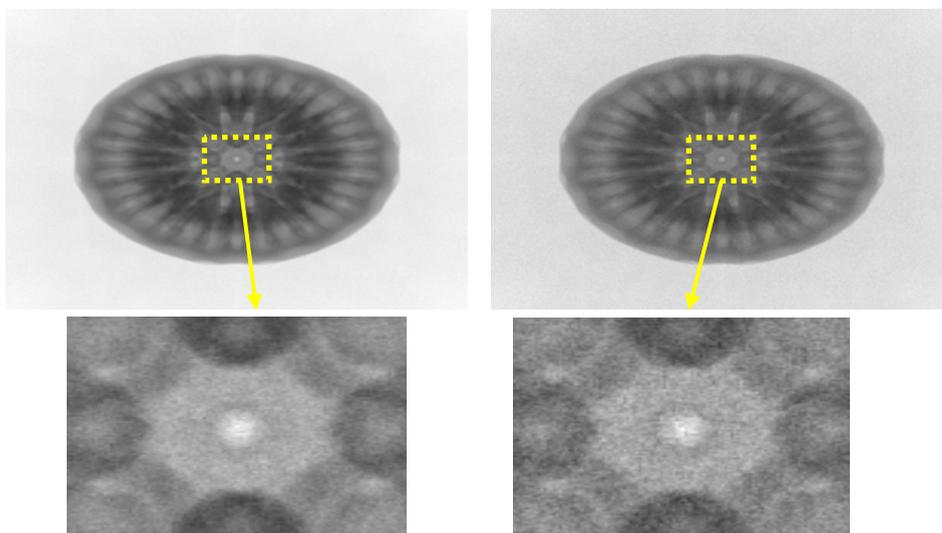


Рис. 14. Пример 1. Протонные изображения, смоделированные с использованием двух взрывозащитных камер

Пример 2. Исследуется объект из двух тонких металлических оболочек, окруженных слоем взрывчатого вещества. Объект подрывается справа в одной точке, возникает скользящая детонация, огибающая оболочки и сжимающая их несимметричным образом с образованием кумулятивной струи. Две последовательные стадии данного процесса представлены на рис. 15.

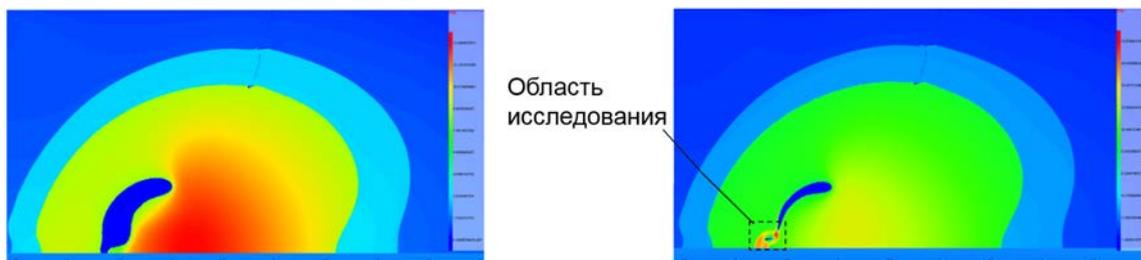


Рис. 15. Пример 2. Две стадии процесса в расчетах газовой динамики

Исследуется взаимодействие кумулятивной струи с веществом. На рис. 16 представлены смоделированные протонные изображения области исследования, отмеченной на рис. 15. В качестве магнитооптической системы использовались обычная «-1»-оптика и протонный микроскоп с увеличением в 10 раз. Видно, что с помощью протонного микроскопа удается получить менее размытое изображение за счет уменьшения влияния хроматических aberrаций и процессов, происходящих в сцинтиляторе.

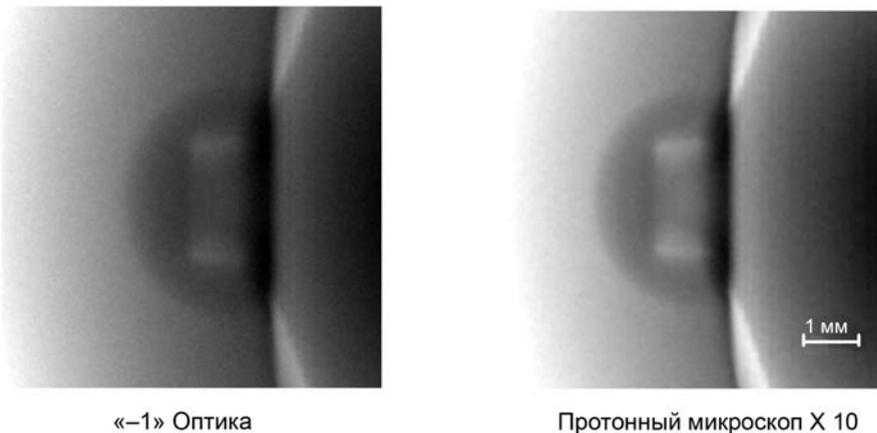


Рис. 16. Пример 2. Протонные изображения одного и того же фрагмента, полученные с помощью обычной «-1» оптики (слева) и протонного микроскопа с увеличением в 10 раз (справа)

Пример 3. На рис. 17 приведены изображения процесса образования кумулятивной струи на фоне высокоплотной преграды, смоделированные с использованием методики ПИ для радиографической установки без увеличения изображения объекта («-1»-оптика) и протонного микроскопа с 8-кратным увеличением (в обоих случаях при отсутствии выходного окна камеры просвечиваемого объекта). Видно, что изображение, получаемое с помощью протонного микроскопа, оказывается более четким и позволяет исследовать мельчайшие детали процесса.

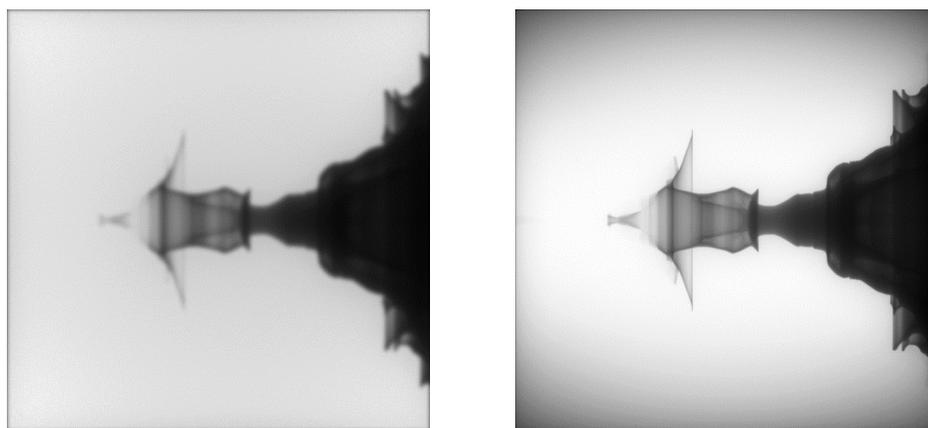


Рис. 17. Пример 3. Смоделированные изображения процесса образования кумулятивной струи, полученные для радиографической установки с «-1» оптикой (слева) и протонного микроскопа с коэффициентом увеличения в 8 раз (справа)

Заклучение

В работе описаны основные процессы, влияющие на формирование и качество протонных изображений. Дано общее описание модулей программной реализации методики ПИ, а также приведены некоторые примеры ее использования. Протонные радиограммы, полученные с помощью методики ПИ, необходимы для выбора оптимальных параметров проведения эксперимента и анализа полученных данных.

Список литературы

1. Bartels J., Haidt D., Zichichi A. Atomic and nuclear properties of materials // The European Physical Journal C. 2000. Vol. 15.
2. Mikhaylyukov K. L., Ivanin I. A., Tatsenko M. V. et al. A method of experimental measurement of Point Spread Function (PSF) due to scintillator for high energy protons // Workshop on High Energy Proton Microscopy НЕРМ-2010, г. Черногловка, 2–4 июня, 2010.
3. Михайлюков К. Л., Таценко М. В., Картанов С. А. Метод получения функции размытия точки в системе сцинтиллятор-регистратор при регистрации протонов высоких энергий // Труды XI Межд. конф. «Забабахинские научные чтения», Снежинск, 2012.
4. Eyges L. Multiple scattering with energy loss // Phys. Rev. 1948. Vol. 74, N 10. P. 1534–1535.
5. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. // Geant4 – a simulation toolkit Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2003. Vol. 506, Issue 3. P. 250–303.
6. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Geant4 developments and applications // IEEE Transactions on Nuclear Science. 2006. Vol. 53, N 1. P. 270–278.

The "PI" Technique for the Simulation of Proton Images

**K. L. Mikhaylyukov, I. V. Khramov, A. V. Skobeyev, S. V. Potapov,
N. V. Frolova, M. D. Romanova**

The technique intended for the mathematical simulation of a proton beam passing through various objects and magnetic optics in order to simulate the proton images of these objects. The software implementation of this technique is required for managing the available and future proton radiography devices and consists of two modules for the simulation using the beam summation and Monte Carlo methods. The last version of the software implementation of the PI technique has been supplemented with the API subsystem for computer-based job preparation and running. The API subsystem provides the computer-based parameter setting, viewing, editing, and checking out, an ability of re-interpolating the grid values of quantities and running jobs on the simulation of proton images using the beam summation and Monte Carlo methods. API provides the user's web-interface for entering and editing simulation parameters via a web-browser. The paper briefly describes the code validation results and gives some examples of the simulated proton images.

УДК 519.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_174

Численное моделирование движения жестких ударников в упругопластических средах на неподвижной счетной сетке по методике ЭГАК

Представлены результаты расчетов нескольких задач о движении малодеформируемых ударников в упругопластических средах. Численное моделирование проводилось по методике ЭГАК на неподвижной счетной сетке с использованием для описания ударника приближения абсолютно твердого тела. Течение окружающей среды рассчитывалось в неинерциальной системе отсчета, связанной с неподвижным ударником. Результаты расчетов ЭГАК хорошо согласуются с результатами аналогичных расчетов в лагранжевых переменных и экспериментальными данными.

А. А. Краюхин, Ю. В. Янилкин, А. Л. Стадник

Введение

При численном моделировании в эйлеровых переменных движения малодеформируемых тел (ударников) в упругопластических средах (преградах) возникает ряд проблем, связанных с точностью описания контактных границ между различными веществами [1]. Из-за использования односкоростного приближения и усреднения газодинамических величин в смешанных ячейках на границе контакта ударника с преградой в расчетах на неподвижных счетных сетках происходит искусственное «прилипание» контактирующих материалов. Этот счетный эффект может существенно повлиять на результаты расчетов, в частности, увеличить ускорение торможения ударника, уменьшить глубину внедрения, изменить траекторию движения ударника и форму каверны. Одним из способов решения указанных проблем является использование для описания ударника приближения абсолютно твердого тела. В работе [2] предложен метод BODY-3D расчета пространственного движения абсолютно твердого тела в упругопластической среде с учетом силы трения. Метод BODY-3D реализован в методике ЭГАК [3]. Результаты численного моделирования тестовых задач показали применимость и приемлемую точность предложенного подхода. Целью настоящей работы является валидация метода BODY-3D на модельной задаче [4] и двух сериях опытов [5, 6], связанных с движением малодеформируемых ударников в упругопластических средах.

1. Общие положения метода BODY-3D

Метод BODY-3D представляет собой способ расчета пространственного движения ударника в упругопластической среде на неподвижной счетной сетке и заключается в численном моделировании течения окружающей среды в неинерциальной системе отсчета, в которой ударник является неподвижным [2]. Кратко изложим его основные положения. Рассмотрим тело, которое характеризуется массой m , радиусом-вектором центра масс \vec{r}_C и тензором инерции в главных осях относительно центра масс J . В момент времени $t = 0$ тело ударяется со скоростью \vec{V}_0 о преграду из упругопластического материала и внедряется в нее. Уравнения движения тела записываются в виде [7]

$$m\vec{a} = \vec{F}, \quad J \frac{d\vec{\omega}}{dt} = \vec{M}, \quad (1)$$

где \vec{F} и \vec{M} – соответственно сила сопротивления внедрению тела и момент силы относительно его центра масс, действующие на тело со стороны преграды; \vec{a} – ускорение центра масс тела, $\vec{\omega}$ – вектор угловой скорости вращения тела относительно центра масс. Силу сопротивления внедрению можно найти по формуле [8]

$$\vec{F} = \int_S (\sigma_n \vec{n} + \sigma_\tau \vec{\tau}) dS, \quad (2)$$

где σ_n и σ_τ – соответственно нормальное и касательное напряжения, действующие на площадке dS на поверхности тела; S – площадь поверхности тела, \vec{n} – единичный вектор нормали к поверхности тела, $\vec{\tau}$ – единичный вектор тангенциальной компоненты массовой скорости среды на поверхности тела. Касательное напряжение определяется из закона сухого трения Кулона

$$\sigma_\tau = \begin{cases} 0, & \sigma_n < 0, \\ \min\{\mu\sigma_n, Y\}, & \sigma_n \geq 0, \end{cases} \quad (3)$$

где $\mu = \text{const}$ – коэффициент трения, Y – предел текучести вещества окружающей среды. Здесь полагается, что при сжатии среды $\sigma_n > 0$. Момент силы по определению

$$\vec{M} = \int_S [\vec{r}, (\sigma_n \vec{n} + \sigma_\tau \vec{\tau})] dS, \quad (4)$$

где \vec{r} – радиус-вектор элемента поверхности тела dS , на который действует сила $d\vec{F} = (\sigma_n \vec{n} + \sigma_\tau \vec{\tau}) dS$, относительно центра масс.

Метод BODY-3D реализован для случая внедрения ударника при подходе под углом θ к поверхности преграды, с углом атаки α и нулевым углом скольжения ($\beta = 0$). При этом предполагается, что ударник имеет плоскость симметрии, перпендикулярную поверхности преграды. В частном случае он является телом вращения. Тогда количество уравнений, описывающих движение ударника, сокращается с шести до трех

$$ma_x = F_x, \quad ma_y = F_y, \quad J_C \frac{d\omega}{dt} = M_Z, \quad (5)$$

где ω – угловая скорость вращения тела вокруг оси OZ относительно центра масс, а J_C – момент инерции вокруг оси OZ относительно центра масс тела. Величина ω , а также угол поворота ударника относительно оси стрельбы γ рассчитываются по формулам

$$\omega = \frac{1}{J_C} \int M_Z dt, \quad \gamma = \int \omega dt. \quad (6)$$

Численная реализация метода BODY-3D, а также особенности подготовки расчетов подробно изложены в работе [2]. Основное изменение аппроксимации уравнения движения среды по сравнению со стандартным подходом, реализованным в методике ЭГАК [3], состоит в использовании формул пересчета кинематических величин (ускорения, массовой скорости, координат) при переходе от инерциальной системы отсчета к неинерциальной [7].

2. Расчеты задач проникания по методике ЭГАК

2.1. Внедрение стального ударника в алюминиевую преграду

В работе [4] представлены результаты расчетов по коду AUTODYN [9] модельной задачи о внедрении по нормали стальных ударников в алюминиевую полубесконечную преграду. В статье также рассматривались цилиндрические ударники с наконечниками различной формы. Отношение длины ударника к его диаметру составляло: $L/D = 20$ ($D = 0,6$ см, $L = 12$ см), масса: $m \approx 27$ г. В расчетах полагалось, что ударник испытывает только упругие деформации. Материал преграды описывался в приближении идеального упругопластического тела с пределом текучести $Y = 0,4$ ГПа. Расчеты проводились в двумерной осесимметричной постановке. Движение преграды рассчитывалось в эйлеровых переменных, а ударника – в лагранжевых. Одним из основных результатов работы [4] является обоснование существования критического значения скорости соударения V_C , ниже которой величина ускорения торможения ударника на квазистационарной стадии внедрения не зависит от скорости удара. Для ударников с оживальным наконечником (CRH = 3) при внедрении в алюминиевую преграду это значение составило: $V_C = 2,1 - 2,2$ км/с [4]. На рис. 1 изображены зависимости ускорения торможения ударника с оживальным наконечником от времени при скорости соударения $V_0 = 0,5 - 1,5$ км/с, полученные в работе [4]. Из графика видно, что на квазистационарной стадии внедрения для всех случаев ускорение торможения проникателя оказалось близко к константе $a_x = 200000g$, где $g \approx 10$ м/с² – ускорение свободного падения. По этой причине далее для сравнения используются только данные из расчета с $V_0 = 1$ км/с [4].

Численное моделирование процесса проникания проводилось в двумерной осесимметричной постановке на квадратной неподвижной счетной сетке с размером ячейки $h = 0,015$ см. Для описания ударника применялось приближение абсолютно твердого тела. В этом случае учитывалась только продольная компонента силы сопротивления внедрению F_x , а F_y и M_z полагались равными нулю (см. формулу (5)). Коэффициент трения между веществами ударника и преграды полагался нулевым: $\mu = 0$.

Для описания материалов преграды использовались уравнение состояния (УРС) в форме Ми–Грюнаизена и модель идеального упругопластического тела с параметрами из табл. 1. Отрицательное давление ограничивалось величиной откольной прочности.

Таблица 1

Параметры материалов

| Материал | ρ_0 , г/см ³ | C_0 , км/с | Γ | n | P_{spall} , ГПа | ν | Y , ГПа |
|----------|------------------------------|--------------|----------|-----|-------------------|-------|-----------|
| Алюминий | 2,71 | 5 | 2,13 | 4 | -0,5 | 0,33 | 0,4 |

На рис. 2 изображены зависимости ускорения торможения ударника от времени для разной скорости соударения. Из представленных данных видно, что результаты расчетов по методике ЭГАК совпадают с данными численного моделирования по коду AUTODYN [4].

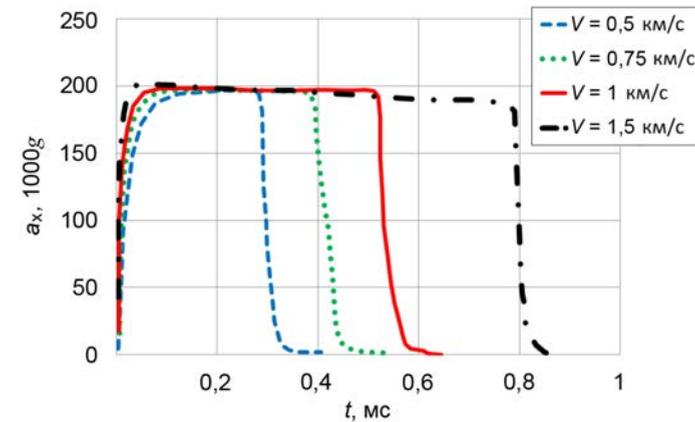


Рис. 1. Зависимости ускорения торможения ударника от времени

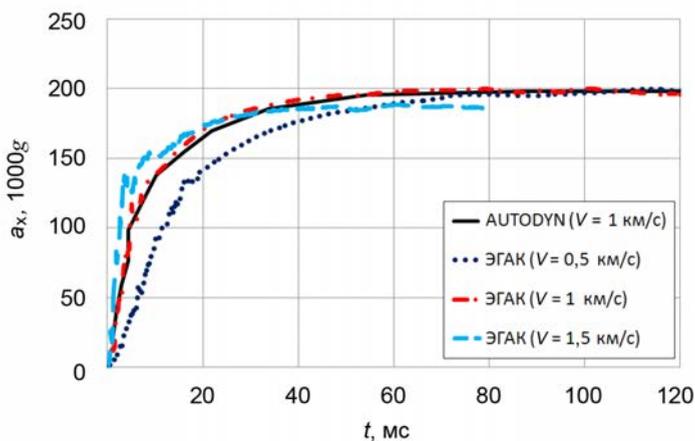


Рис. 2. Зависимости ускорения торможения ударника от времени

2.2. Пробивание плиты из алюминиевого сплава стальным ударником

В работе [5] приведено описание серии экспериментов, в которых исследовалось пробитие пластин из алюминиевого сплава Al 6061-T651 стальными ударниками по нормали и под углом $\theta = 60^\circ$ к поверхности мишени при скорости соударения $V_0 = 0,28 - 0,86$ км/с. Толщина пластин составляла $H = 2,63$ см. Ударники изготавливались из стали 4340 и имели форму стержня с оживальным наконечником (CRH = 3). Масса ударников составляла: $m = 81$ г, диаметр: $D = 1,29$ см, длина: $L = 8,89$ см.

Численное моделирование процесса пробивания пластины проводилось с использованием метода BODY-3D на кубической неподвижной счетной сетке в трехмерной постановке. Коэффициент трения между веществами ударника и преграды полагался равным нулю: $\mu = 0$. В основной серии расчетов размер счетной ячейки $h = 0,03225$ см. При измельчении счетной сетки результаты расчетов практически не изменились. Для описания ударного сжатия вещества преграды использовалось УРС в форме Ми–Грюнайзена с параметрами из табл. 2. Отрицательное давление ограничивалось величиной откольной прочности. Для описания сдвиговой прочности вещества преграды применялась модель упругопластичности Джонсона–Кука с параметрами из табл. 3 [10].

Таблица 2

Параметры УРС и откольная прочность

| Материал | ρ_0 , г/см ³ | C_0 , км/с | Γ | n | P_{spall} , ГПа |
|------------|------------------------------|--------------|----------|-----|-------------------|
| Al 6061-T6 | 2,703 | 5,24 | 1,15 | 4 | -1,1 |

Таблица 3

Параметры модели Джонсона–Кука и модуль сдвига

| Материал | A , ГПа | b , ГПа | k | c | m | C_v , кДж/(г·К) | T_m , К | G , ГПа |
|------------|-----------|-----------|------|-------|-----|---------------------|-----------|-----------|
| Al 6061-T6 | 0,335 | 0,085 | 0,11 | 0,012 | 1 | $875 \cdot 10^{-6}$ | 925 | 26 |

На рис. 3 приведены зависимости запреградной скорости ударника от скорости соударения, полученные в опытах [5] и расчетах. Из графиков видно, что результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем диапазоне скоростей соударения. При численном моделировании нормального пробития воспроизведен баллистический предел, полученный в опытах.

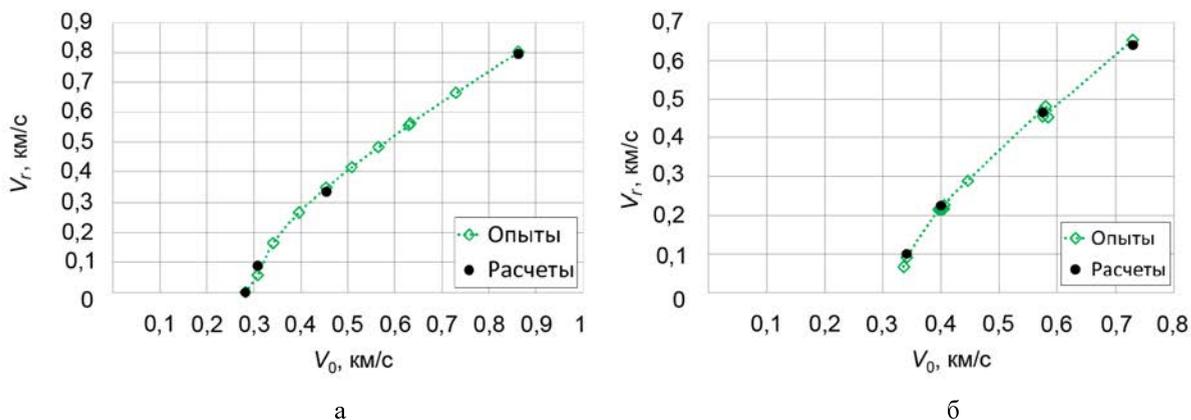


Рис. 3. Зависимости запреградной скорости ударника от скорости соударения в опытах и расчетах: а – нормальное пробитие, б – наклонное пробитие

На рис. 4–8 приведены рентгенограммы и поля плотности, полученные в соответствующих опытах [5] и расчетах на близкие моменты времени. Из представленных данных видно, что для большей части рассмотренных случаев соударения расчетная картина пробивания ударником плиты близка к экспериментальной. Исключение составляют лишь случаи наклонного пробивания преграды при умеренной скорости соударения $V_0 \leq 0,5$ км/с. В этих опытах реализовался заметный пластический изгиб стержневой части ударника при вылете в запреградное пространство (см. рис. 6). В расчетах из-за использования приближения абсолютно твердого тела для описания проникателя такой эффект не моделируется.

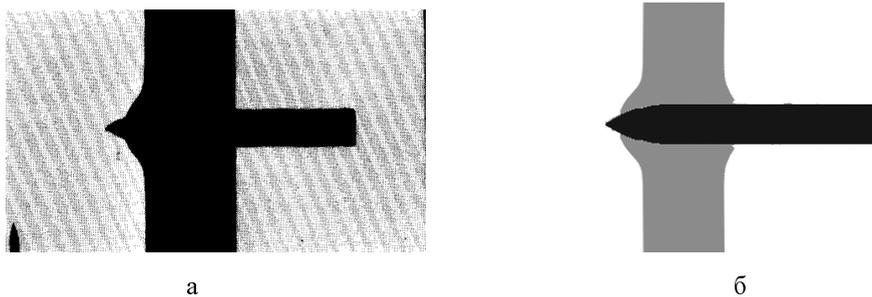


Рис. 4. Пробивание преграды при $V_0 = 0,308$ км/с: а – рентгенограмма опыта на $t = 185$ мкс; б – поле плотности на $t = 200$ мкс в расчете ЭГАК

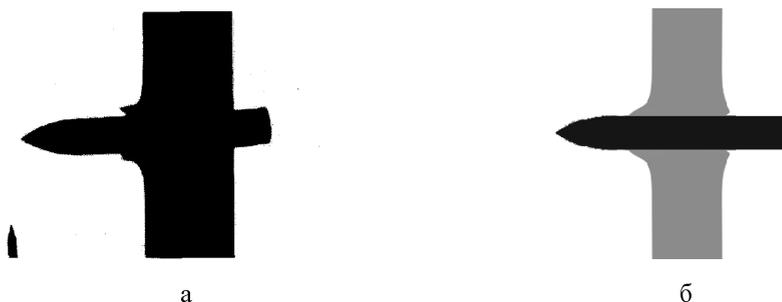


Рис. 5. Пробивание преграды при $V_0 = 0,863$ км/с: а – рентгенограмма опыта на $t = 85,2$ мкс; б – поле плотности на $t = 80$ мкс в расчете ЭГАК

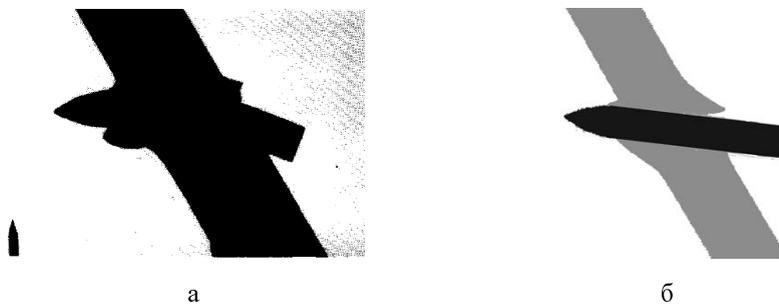


Рис. 6. Пробивание преграды при $V_0 = 0,4$ км/с: а – рентгенограмма опыта на $t = 204,3$ мкс; б – поле плотности на $t = 220$ мкс в расчете ЭГАК

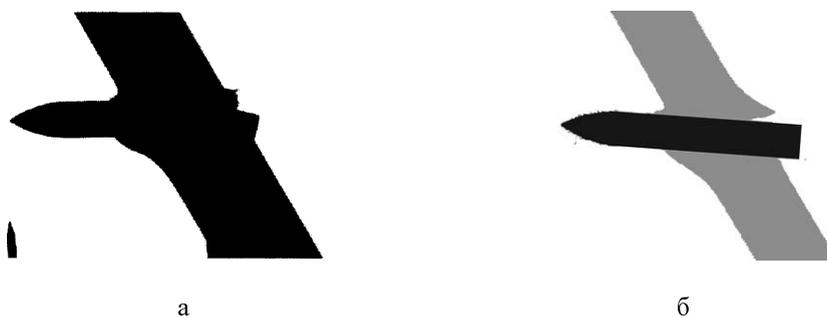


Рис. 7. Пробивание преграды при $V_0 = 0,573$ км/с: а – рентгенограмма опыта на $t = 152,8$ мкс; б – поле плотности на $t = 160$ мкс в расчете ЭГАК

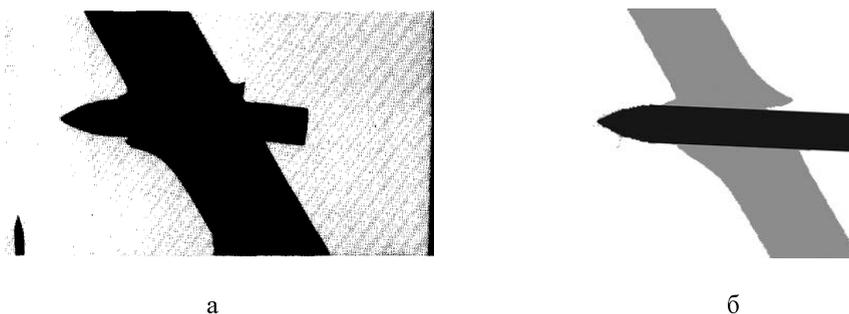


Рис. 8. Пробивание преграды при $V_0 = 0,73$ км/с: а – рентгенограмма опыта на $t = 90,6$ мкс; б – поле плотности на $t = 100$ мкс в расчете ЭГАК

2.3. Движение стального конуса в пластине

В работе [6] приведены описание и результаты опытов по нормальному прониканию малодеформируемых тел в пластилин. В качестве ударников использовались сплошные стальные конуса с углом полураствора $\varphi = 8,167^\circ$, диаметром основания $D = 7$ мм, высотой $H = 23$ мм и массой $m = 2,354 - 2,5$ г. Было проведено семь экспериментов при варьировании угла атаки

проникателя α и скорости соударения $V_0 = 0,25 - 0,32$ км/с. При небольших значениях α центр масс проникателя двигался по дуге окружности большого радиуса, а к моменту его остановки траектория постепенно выпрямлялась. При входе конуса в преграду с углом атаки, превышающим некоторое критическое значение ($\alpha_{crit} \approx 10^\circ$), происходило нарастание возмущений, которое завершалось «кувырком» проникателя с разворотом относительно поперечной оси на угол $\gamma \sim 180^\circ$.

Численное моделирование процесса проникания проводилось с использованием метода BODY-3D на кубической неподвижной счетной сетке в трехмерной постановке. Коэффициент трения между веществами ударника и преграды полагался равным нулю: $\mu = 0$. В опытах угол атаки ударника α задавался приближенно [6], поэтому в расчетах ЭГАК это был варьируемый параметр в пределах $0 < \alpha < 17^\circ$. Для исследования влияния этой величины на траекторию движения ударника была проведена серия расчетов при фиксированной скорости соударения $V_0 = 0,28$ км/с. Эта величина близка к среднему значению, реализованному в опытах (см. работу [6]). В основной серии расчетов размер счетной ячейки $h = 0,035$ см. При измельчении счетной сетки результаты расчетов практически не изменились. Для описания ударного сжатия пластилина использовалось УРС в форме Ми–Грюнайзена с параметрами из табл. 4. Отрицательное давление ограничивалось величиной откольной прочности. Упругие параметры брались из работы [11].

Таблица 4

Параметры УРС, откольная прочность, коэффициент Пуассона

| Материал | ρ_0 , г/см ³ | c_0 , км/с | Γ | n | P_{crit} , ГПа | ν |
|-----------|------------------------------|--------------|----------|-----|------------------|-------|
| Пластилин | 1,48 | 1,55 | 1 | 3 | -0,005 | 0,465 |

Для определения предела текучести использовалась степенная зависимость от скорости деформации [12]

$$Y = \min \left\{ A(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0)^n, Y_{max} \right\}, \quad (7)$$

где $A = 0,637$ МПа и $n = 0,266$ – параметры, определенные с помощью обработки опытов по динамическому деформированию пластилина [12], $\dot{\epsilon}_0 = 1$ с⁻¹. Величина $Y_{max} = 3,5$ МПа, ограничивающая рост предела текучести сверху, подбиралась для получения наилучшего согласия результатов численного моделирования с опытными данными.

На рис. 9 приведены профили каверн в преграде после остановки ударника, полученные в расчетах при разных α . На рис. 10 изображены траектории движения центра масс ударника при разных α в безразмерных координатах: $x^* = x/H$ и $y^* = y/H$, где $H = 2,3$ см – высота конуса. Из представленных данных видно, что в расчете с нулевым углом атаки ($\alpha = 0$) траектория движения ударника представляет собой прямую линию. Этот результат является очевидным, так как в этом случае по условию задачи отсутствуют начальные поперечные возмущения, которые могут действовать на проникатель и привести к искривлению траектории движения. При малых значениях угла атаки $2 < \alpha < 8^\circ$ проникатель сначала двигается по траекториям, представляющим собой окружности большого радиуса. По мере торможения проникателя его траектория движения выпрямляется, т. е. происходит стабилизация. Это согласуется с теоретическим выводом [13] об увеличении запаса устойчивости проникателя с падением скорости его движения. При превышении

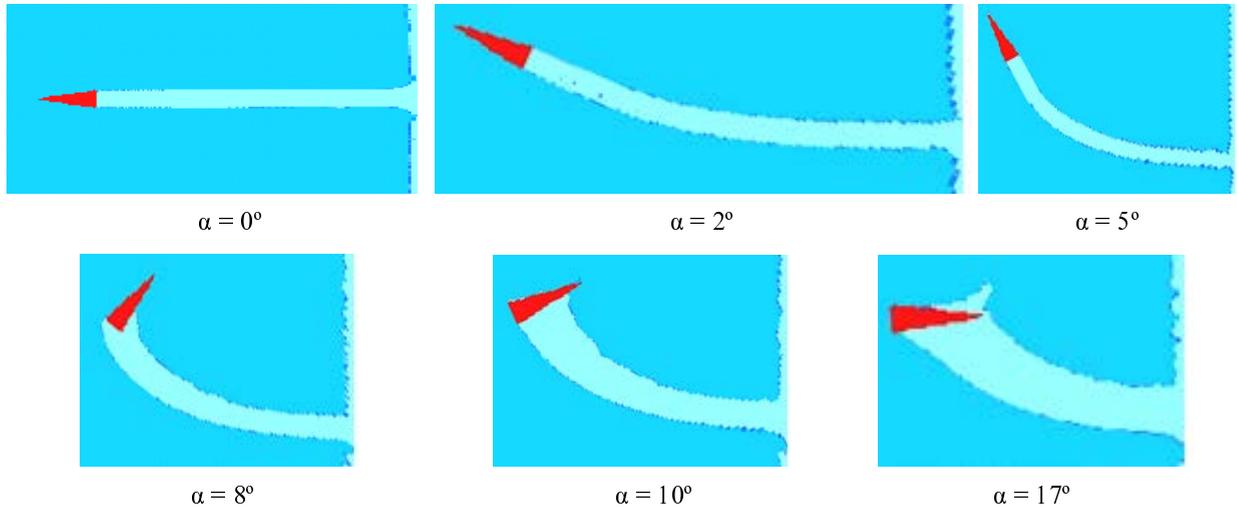


Рис. 9. Каверны в преграде после остановки ударника при разных углах атаки

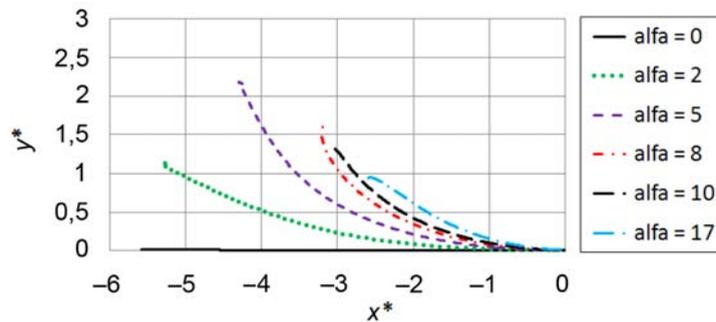


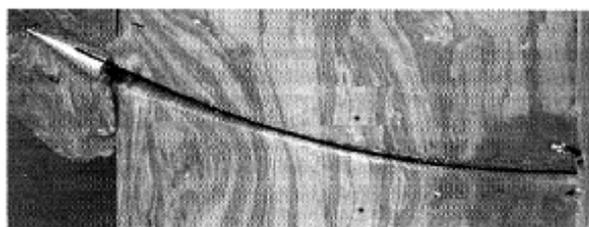
Рис. 10. Траектории движения центра масс ударника при разных углах атаки

критического значения угла атаки $8^\circ < \alpha_{cr} < 10^\circ$ реализуется «кувырок» проникателя с разворотом относительно поперечной оси на угол $\gamma \sim 180^\circ$. Полученные результаты согласуются с данными опытов работы [6]. Также стоит отметить форму траектории движения, рассчитанную при $\alpha = 8^\circ$. В этом случае получено, что проникатель, развернувшись в преграде на угол $\gamma > 90^\circ$, движется обратно к ее лицевой поверхности. В опытах [6] траекторий такого типа не наблюдалось, однако в работах [13, 14] теоретически предсказано их существование, а также отмечено, что они фиксировались в экспериментах.

При численном моделировании угол атаки α являлся варьируемым параметром, поэтому для сравнения с опытными данными выбирались те расчеты, результаты которых наиболее близко лежали к экспериментам. Сопоставление результатов расчетов и опытов проводилось по форме каверны, положению в ней проникателя, а также по форме траектории движения центра масс ударника. На рис. 11 изображены экспериментальные фотографии каверн [6] и результаты расчетов в одинаковом масштабе. Видно, что в расчетах получено хорошее качественное и количественное согласие с опытными данными. Аналогично опытам при численном моделировании процесса внедрения при небольших углах атаки $\alpha = 2$ и 5° проникатель движется по окружностям большого радиуса, а к моменту его остановки траектория постепенно выпрямляется. При больших значениях угла атаки $\alpha = 12$ и 15° проникание завершается «кувырком» ударника. После

остановки углы разворота ударника относительно оси стрельбы в опытах и расчетах получились близкими друг к другу. Например, в опыте № 6 проникатель совершил «кувырок», но его вершина осталась заглубленной в стенке каверны. А в опыте № 7 вершина уже оказалась расположена в самой каверне без контакта со стенками каверны. Причем, в стенке каверны от нее осталась вмятина. Аналогичная картина получена в расчетах.

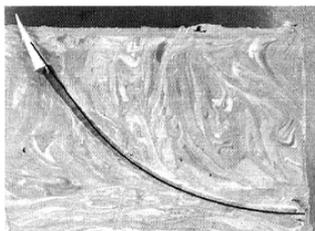
На рис. 12 изображены опытные [6] и расчетные траектории движения центра масс ударника при разных значениях α в безразмерных координатах. Из рис. 12 видно, что результаты расчетов согласуются с опытными траекториями. В среднем, отличие в глубине проникания составляет ~10 %. Возможно, это связано с несовершенством модели упругопластичности (16), использованной в расчетах для описания пластилина.



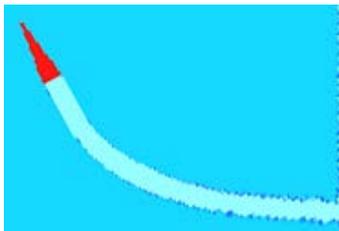
Опыт № 3



Расчет ($\alpha = 2^\circ$)



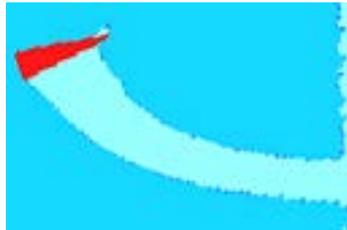
Опыт № 4



Расчет ($\alpha = 5^\circ$)



Опыт № 6



Расчет ($\alpha = 12^\circ$)



Опыт № 7



Расчет ($\alpha = 15^\circ$)

Рис. 11. Результаты опытов и расчетов

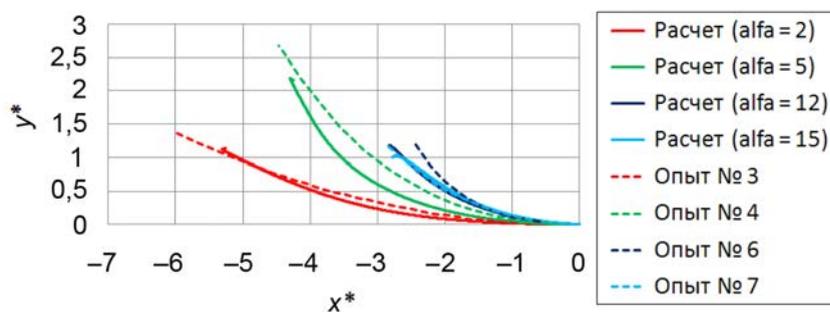


Рис. 12. Траектории движения центра масс ударника в опытах и расчетах

Заключение

Выполнена валидация метода BODY-3D на модельной задаче и двух сериях экспериментов по пространственному движению малодеформируемых ударников в упругопластических средах. Метод основан на использовании для описания ударника приближения абсолютно твердого тела и расчете течения окружающей среды в неинерциальной системе отсчета, связанной с неподвижным ударником. Численное моделирование процесса проникания проводилось по методике ЭГАК на неподвижной счетной сетке. Результаты расчетов показали хорошее согласие с «эталонным» решением модельной задачи, а также экспериментальными данными. Таким образом, в работе продемонстрирована адекватность результатов численного моделирования пространственного движения малодеформируемых ударников в упругопластических средах, полученных по эйлеровой методике ЭГАК с использованием метода BODY-3D.

Список литературы

1. Scheffler D. R. Modeling non-eroding perforation of an oblique aluminum target using the Eulerian CTN code // Int. J. Impact Eng. 2005. Vol. 32. N 1–4. P. 461–472.
2. Краюхин А. А., Янилкин Ю. В., Стадник А. Л., Егужова М. Ю. Метод расчета движения абсолютно твердого тела в упругопластической среде на неподвижной счетной сетке // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2018. Вып. 1. С. 15–29.
3. Янилкин Ю. В., Беяев С. П., Бондаренко Ю. А. и др. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–65.
4. Rosenberg Z., Dekel E. The penetration of rigid long rods – revisited // Int. J. Impact Eng. 2009. Vol. 36. P. 551–564.

5. Piekutowski A. J., Forrestal M. J., Poormon K. L., Warren T. L. Perforation of aluminum plates with ogive-nose steel rods at normal and oblique impacts // Int. J. Impact Eng. 1996. Vol. 18. N 7–8. P. 877–887.
6. Осипенко К. Ю. Проникание тела вращения в упругопластическую среду // Механика твердого тела. 2009. № 1. С. 169–180.
7. Сивухин Д. В. Общий курс физики. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1979.
8. Li Q. M., Flores-Johnson E. A. Hard projectile penetration and trajectory stability // Int. J. Impact Eng. 2011. Vol. 38. P. 815–823.
9. ANSYS AUTODYN: Help [Electronic resource], Mode of access: www.century-dynamics.com, 2007.
10. Dabboussi W., Nemes J. A. Modeling of ductile fracture using the dynamic punch test // Int. J. Impact Eng. 2005. Vol. 47. P. 1282–1299.
11. Колесников Ю. И., Борода С. С. Об определении упругих констант высокопластичных материалов // Физическая мезомеханика. 2009. № 12. С. 121–126.
12. Сапожников С. Б., Игнатова А. В. Исследование механических свойств технического пластилина при квазистатическом и динамическом деформировании // Вестник ПНИПУ. Механика. 2014. № 2. С. 200–219.
13. Симонов И. В., Осипенко К. Ю. Устойчивость, траектории и динамический изгиб затупленного тела вращения при проникании в упругопластическую среду // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 3. С. 146–160.
14. Бивин Ю. К., Симонов И. В. Механика динамического проникания в грунтовую среду // Механика твердого тела. 2010. № 6. С. 157–191.

Numerical Simulation with the «EGAK» Code of Moving Rigid Penetrators in Elasto-Plastic Media Using a Stationary Computational Grid

A. A. Krayukhin, Yu.V. Yanilkin, A. L. Stadnik

Results of simulations for several problems of rigid penetrators moving in elasto-plastic media are presented. The numerical simulation was performed with the EGAK code using a stationary computational grid and an ideal solid body approximation to describe the penetrator. The medium flow was simulated using the non-inertial frame of reference with respect to a fixed penetrator. The EGAK simulation results are in a good agreement with results of similar simulations in Lagrangian variables and data of experiments.

УДК 544.454.3

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_186

Исследование применимости метода SPH к моделированию процессов газодинамики с детонацией в двумерном случае

И. М. Епишков, И. В. Залялова,
Д. М. Линник, С. Ю. Сулова

Статья посвящена исследованию возможности применения классического метода SPH к моделированию процессов газовой динамики с детонацией в двумерном случае. Приводятся основные формулы метода, а также представлены результаты расчетов газодинамики с детонацией с контролем скорости детонационной волны и по модели кинетики Морозова–Карпенко. Полученные результаты сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и аналогичными результатами по двумерной методике Д.

Введение

В последнее время среди численных алгоритмов для описания двумерных газодинамических процессов большой популярностью пользуются так называемые *бессеточные* методы. В статье рассматривается один из таких алгоритмов, а именно метод сглаженных частиц, или SPH (Smooth Particle Hydrodynamics). Метод SPH основан на свободно-лагранжевом подходе, описанном в работах [1–4], согласно которому элементы среды представляются как «размазанные» по пространству области вещества, центры масс которых двигаются по законам динамики сплошной среды.

Одними из немаловажных, требующих моделирования, физических процессов являются горение и детонация взрывчатых веществ (ВВ). Необходимость предсказания точного поведения таких материалов при различных воздействиях на содержащие их конструкции, содержащие их, делает чрезвычайно актуальной задачу численного моделирования процессов инициирования и распространения детонации либо затухания детонации в зависимости от условий удара. Для решения этой задачи можно использовать модели кинетики детонации. Одной из таких моделей является модель кинетики детонации Морозова–Карпенко [5]. Цель данной работы – исследование возможности применения метода SPH для численного моделирования двумерных газодинамических течений с расчетом детонации с контролем скорости и по модели кинетики Морозова–Карпенко.

SPH-уравнения газовой динамики с детонацией

Основная идея метода состоит в дискретизации сплошной среды набором сферических частиц постоянной массы m_i . Расчетные величины аппроксимируются в частицах интегралами по области течения Ω

$$F(\vec{r}) = \int_{\Omega} F(\vec{r}') W(\vec{r} - \vec{r}', h) d\vec{r}', \quad (1)$$

с весовой функцией $W(\vec{r} - \vec{r}', h)$, аналитически дифференцируемой и обладающей свойствами нормировки и предельного перехода: $\int_{\Omega} W(\vec{r}, h) d\vec{r} = 1$ и $\lim_{h \rightarrow 0} W(\vec{r}, h) = \delta(\vec{r})$, где δ – функция

Дирака, а сами интегралы (1) заменяются конечной суммой по частицам: $F(\vec{r}) =$

$$= \sum_i F_i \frac{m_i}{\rho_i} W(\vec{r} - \vec{r}_i, h), \text{ где } \vec{r}_i, m_i, \text{ и } \rho_i - \text{ радиус-вектор, масса и плотность частицы с номером } i$$

соответственно. Отсюда градиент величины представляется следующей формулой:

$$\nabla F(\vec{r}) = \sum_i F_i \frac{m_i}{\rho_i} \nabla W(\vec{r} - \vec{r}_i, h).$$

Формула для вычисления плотности имеет вид: $\rho(\vec{r}) = \sum_i m_i W(\vec{r} - \vec{r}_i, h)$, что можно пони-

мать как сглаживание масс дискретных частиц для получения непрерывного поля плотности. Весовую функцию $W(\vec{r} - \vec{r}', h)$ называют ядром интерполяции, при этом величина h с размерностью длины является параметром интерполяции (или сглаживающей длиной), с помощью которого можно регулировать «размазывание» массы частицы вокруг ее центра.

В рамках данной работы ограничимся самым распространенным вариантом интерполяционного ядра, представленного в виде В-сплайна:

$$W = \frac{1}{0,7\pi h^2} \begin{cases} 1 - 1,5R^2 + 0,75R^3, & 0 \leq R \leq 1, \\ 0,25(2 - R)^3, & 1 \leq R \leq 2, \\ 0, & R > 2, \end{cases}$$

где $R = \frac{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}{h}$.

С помощью приведенной выше процедуры можно непосредственно из дифференциальной формы уравнений неразрывности, импульса и энергии для сплошной среды получить их аппроксимацию

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{k=1}^N m_k (\vec{U}_i - \vec{U}_k) \nabla_i W_{ik}, \quad (2)$$

$$\frac{d\vec{U}_i}{dt} = - \sum_{k=1}^N m_k \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_k}{\rho_k^2} + q_{ik} \right) \nabla_i W_{ik}, \quad (3)$$

$$\frac{dE_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_k}{\rho_k^2} + q_{ij} \right) (\bar{U}_i - \bar{U}_k) \nabla_i W_{ik}. \quad (4)$$

где ρ_i , P_i , E_i – плотность, давление и внутренняя энергия частицы с номером i соответственно.

Градиент от интерполяционного ядра запишется как: $\nabla_i W_{ik} = W' \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_k}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|}$, искусственная вяз-

кость задается следующим образом:

$$q_{ik} = \frac{2}{\rho_i + \rho_k} \left(-\alpha \mu_{ik} \frac{c_i + c_k}{2} + \beta \mu_{ik}^2 \right),$$

$$\mu_{ik} = \begin{cases} h(\bar{U}_i - \bar{U}_k) \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_k)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_k|^2 + \eta^2}, & (\bar{U}_i - \bar{U}_k)(\vec{r}_i - \vec{r}_k) < 0, \\ 0, & (\bar{U}_i - \bar{U}_k)(\vec{r}_i - \vec{r}_k) \geq 0, \end{cases}$$

где α и β – коэффициенты линейной и квадратичной вязкости, подбираемые эмпирическим путем для заданного класса задач, c_i – значение скорости звука частицы с номером i , а $\eta^2 = \varepsilon h_{ij}^2$, при $\varepsilon = 0,01$.

Указанные выше уравнения будем решать по схеме *предиктор–корректор*.

При расчете детонации уравнение (4) заменяется на следующее: $\frac{dE_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_k}{\rho_k^2} + q_{ij} \right) (\bar{U}_i - \bar{U}_k) \nabla_i W_{ik} - Q_i K(\widetilde{W}_i, P_i, \rho_i)$, где \widetilde{W}_i – массовая концентрация ВВ – невозрастающая функция от t , которая характеризует степень химического превращения ВВ в ПВ (продукт взрыва); значение \widetilde{W}_i лежит в диапазоне от $\widetilde{W}_i = 1$ для ВВ до $\widetilde{W}_i = 0$ для ПВ; Q_i – калорийность ВВ, $K(\widetilde{W}_i, P_i, \rho_i) = \frac{d\widetilde{W}_i}{dt}$ – скорость выгорания ВВ. Для реагирующего ВВ задается уравнение состояния, которое является функцией трех независимых переменных, а именно, к обычным переменным – плотности ρ_i и энергии E_i добавляется концентрация ВВ – \widetilde{W}_i : $P_i = f(\rho_i, E_i, \widetilde{W}_i)$. Для замыкания указанной выше системы уравнений необходимо указать алгоритм однозначного задания величины \widetilde{W}_i , определяемым уравнением кинетики детонации.

При расчете детонации с контролем скорости детонационной волны для каждой частицы по ее координатам геометрическим способом [6] в начальный момент времени определяется момент взрывчатого превращения ВВ в ПВ. При достижении этого времени зануляется концентрация ВВ и мгновенно выделяется энергия, равная калорийности ВВ.

Тестовые расчеты

В тестовых расчетах величины измеряются в следующих единицах: время – мкс, расстояние – см, плотность – г/см³, скорость – км/с, давление – ГПа, энергия – кДж/г, калорийность – кДж/г.

Задача 1. О распространении плоской стационарной детонационной волны. Тестирование в реализованном методе SPH модели расчета детонации с контролем скорости проводилось на задаче о распространении плоской стационарной детонационной волны по образцу ВВ длиной 6 с начальной плотностью 1,9. Инициирование ВВ производилось на левой границе образца. Данный расчет проводился по одномерной программе SPH и методике Д [7]. Значения термодинамических величин в точке Жуге для исследуемого ВВ: массовая скорость 1,9; скорость нормальной детонации 7,53; давление 27,1832; плотность 2,541208.

Все расчеты проводились с использованием кинетики мгновенного энерговыделения. Расчеты по методу SPH проводились с коэффициентами линейной и квадратичной вязкости $\alpha = 1$ и $\beta = 1$. В базовом расчете количество частиц в направлении оси абсцисс составило $n = 3000$. Расчеты по методике Д проводились на сетке с размером ячейки в направлении движения волны 0,01 (600 ячеек). На рис. 1 представлены профили давления на моменты времени $t = 1,5$ (синий цвет) и $t = 3$ (красный цвет).

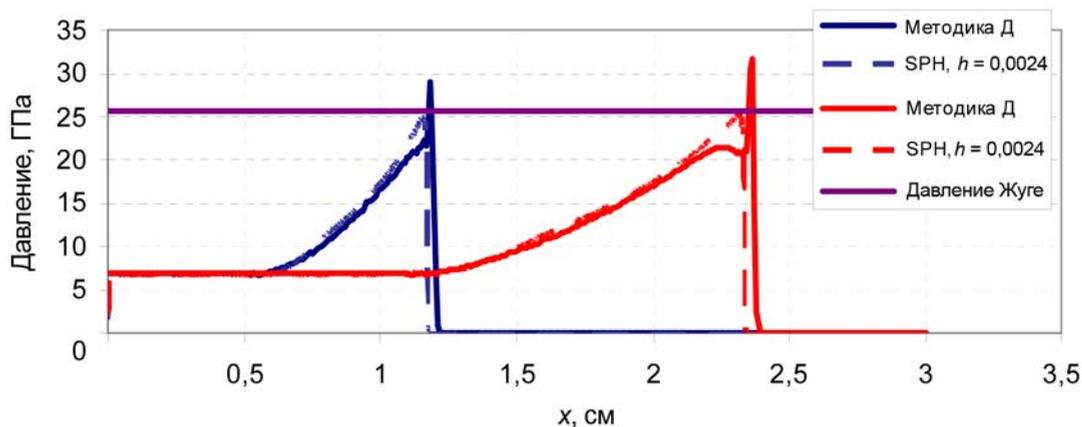


Рис. 1. Профили давления в расчетах теста о распространении плоской стационарной детонационной волны по методу SPH и методике Д

Далее по методу SPH были проведены расчеты на сходимость. Количество частиц в направлении оси абсцисс в этих расчетах составило $n = 300, 1500, 3000$. Полученные результаты в сравнении с результатами по методике Д представлены на рис. 2. Графики на рисунке демонстрируют сходимость результатов при увеличении количества частиц. Также видно, что метод SPH позволяет с приемлемой точностью моделировать распространение плоской стационарной детонационной волны, правда, для этого требуется большее число расчетных элементов, чем в методике Д.

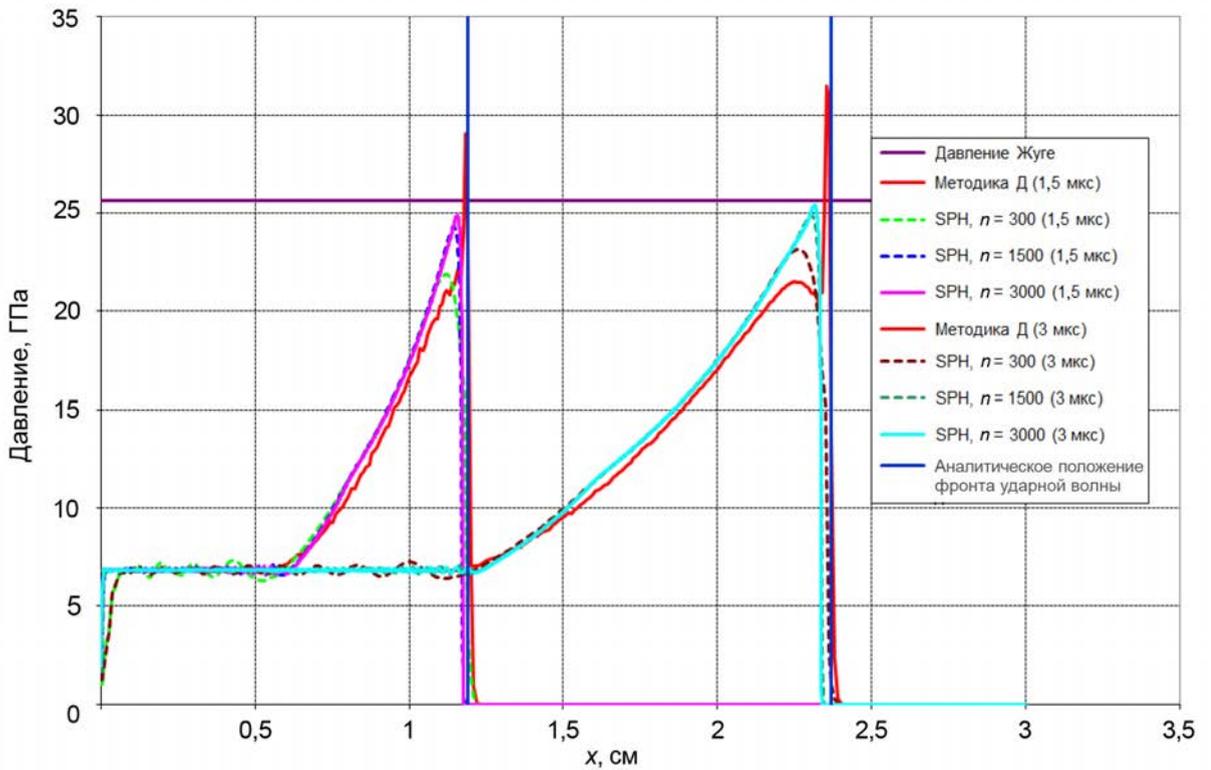


Рис. 2. Профили давления в расчетах теста о распространении плоской стационарной детонационной волны по методу SPH с различным числом частиц

Задача 2. Зависимость глубины возбуждения детонации от нагружающего давления для ВВ на основе ТАТБ. Рассмотрим расчет одномерной задачи определения глубины преддетонационного участка в исследуемом ВВ при заданных значениях давления на границе ВВ в плоской инициирующей ударной волне прямоугольного профиля.

Определение зависимости глубины возбуждения детонации от нагружающего давления, называемой диаграммой Пополато [8], представляет собой серию расчетов одномерной задачи, в которой инициирование ВВ на основе ТАТБ (триаминотринитробензола) осуществлялось нагружением ударной волной через экраны из алюминия. Начальные данные в алюминиевом экране получены в предположении, что для Al использовалось УРС в форме Ми–Грюнайзена с параметрами: $\rho_0 = 2,71$; $c_0 = 5,52 \left[\frac{\text{м}}{\text{с}^2} \right]$; $n = 3,54$; $h = 2,7$, а скорость ударной волны в Al определялась соотношением: $D = 5,333 + 1,356U$. Тогда при заданном значении U состояние экрана определяется формулами: $E = \frac{U^2}{2}$; $\rho = \rho_0 \frac{D}{D-U}$; $P = \rho_0 D U$.

Начальная геометрия системы изображена на рис. 3, где АВ и CD – свободные поверхности ($P_{\text{тр}} = 0$), AD и BC – жесткие стенки. Количество частиц в направлении оси абсцисс составило: $n = 3000$.

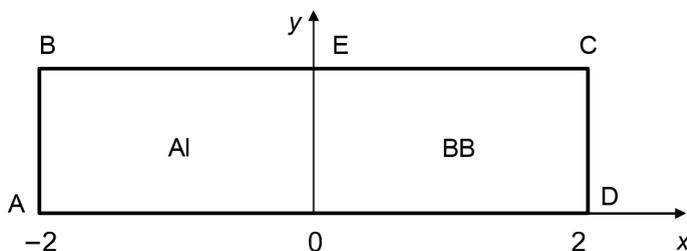


Рис. 3. Начальная геометрия задачи 2

На рис. 4 показана кривая Пополато для ВВ ТАТБ с начальной плотностью 1,91, полученная в расчете по методу SPH. На этот же график нанесены экспериментально полученные точки. Из представленного рисунка видно согласие результатов расчетов с экспериментальными данными.

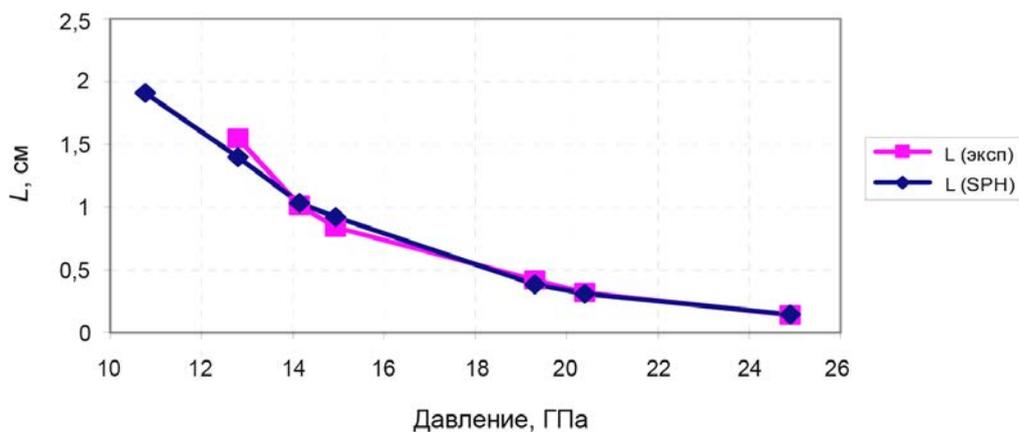


Рис. 4. Задача 2. Диаграммы Пополато для ВВ ТАТБ с начальной плотностью 1,91

Задача 3. Возбуждение детонации в ВВ на основе ТАТБ расходящейся цилиндрической волной. На рис. 5 изображена начальная геометрия плоской двумерной модельной задачи, демонстрирующей возбуждение детонации в ВВ на основе ТАТБ расходящейся ударной волной [9].

Поверхность на оси OX – ось симметрии системы. Начальные условия нулевые: во всех областях $U_x = U_y = 0$, $E = P = 0$. В начальный момент времени шашка из активного ВВ (область 1 на рис. 5) инициируется в точке на оси OX . Детонация в инициирующей шашке, состоящей из ВВ на основе октогена с начальной плотностью 1,86, рассчитывается с контролем скорости детонации, в ВВ ТАТБ – с кинетикой Морозова–Карпенко. Размеры шашки и исследуемого образца: $a = 0,75$; $b = 2,5$; $c = 3$, $h = 1$.

По методу SPH проведено два расчета с разным числом частиц. В расчете 1 частицы представлялись равномерно с шагом $\Delta x = \Delta y = 0,01$, сглаживающая длина при этом составила $h = 0,0133$, суммарное число частиц ~ 189000 . В расчете 2 шаг по пространству составил $\Delta x = \Delta y = 0,005$, сглаживающая длина $h = 0,00655$, суммарное число частиц ~ 756000 . Коэффициенты линейной и квадратичной вязкости в этих расчетах составили 1 и 8 соответственно. Результаты

расчетов сравнивались с расчетом по методике Д, выполненным на квадратной счетной сетке с шагом по пространству 0,025 (общее число ячеек в задаче ~26000), и с положением фронта детонационной волны.

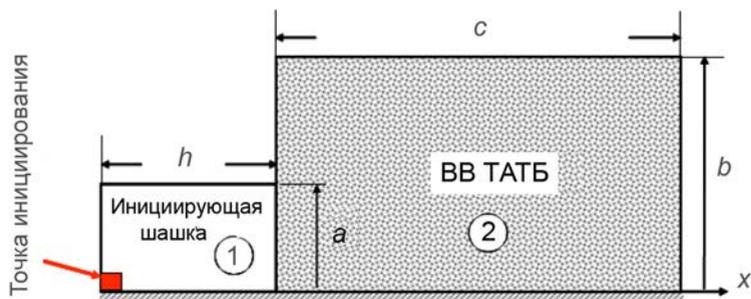


Рис. 5. Начальная геометрия задачи 3

На рис. 6 показано распределение концентрации ВВ на несколько моментов времени, полученное по методу SPH в расчетах 1 и 2, а также по методике Д.

Представленные данные демонстрируют совпадение результатов расчетов по двум методикам по положению фронта ДВ. На рис. 7 показано распределение концентрации ВВ, полученное в расчете 2 и по методике Д на момент $t=4,5$, с указанием положения фронта УВ и детонационной волны. Различие картин выгорания, полученных по методикам SPH и Д, наблюдается лишь в форме невыгоревших зон.

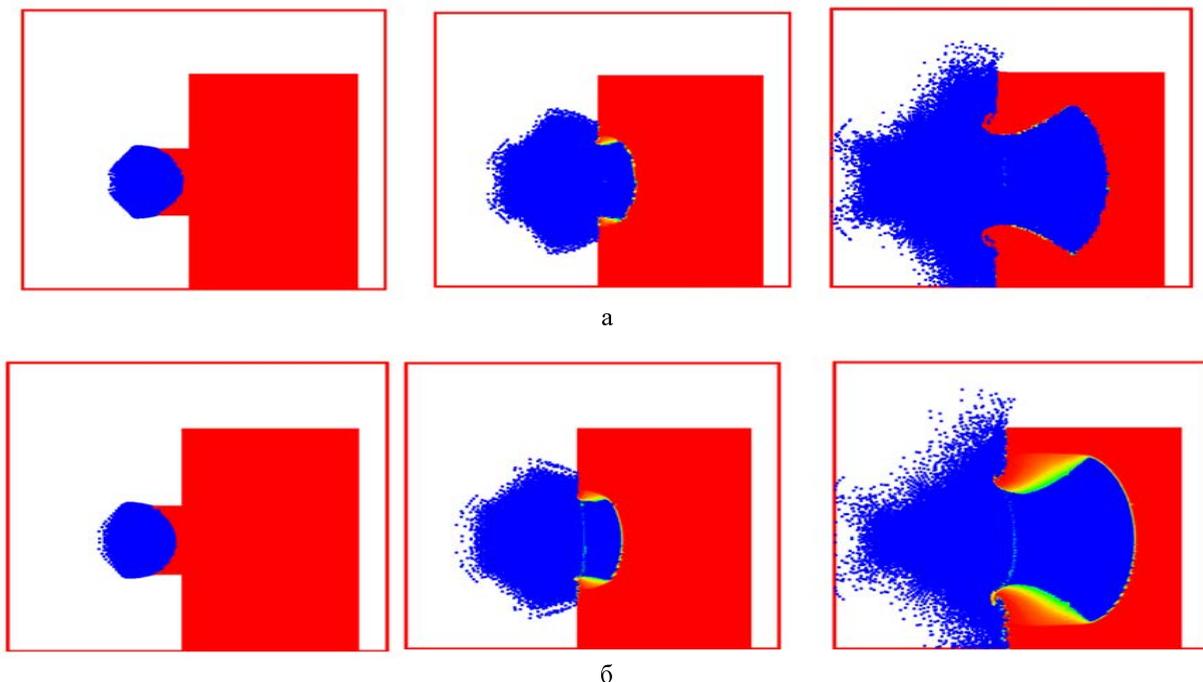
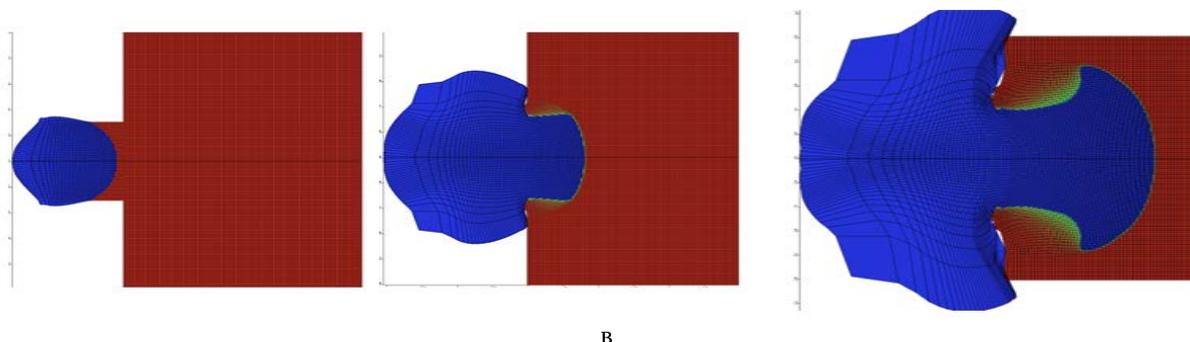
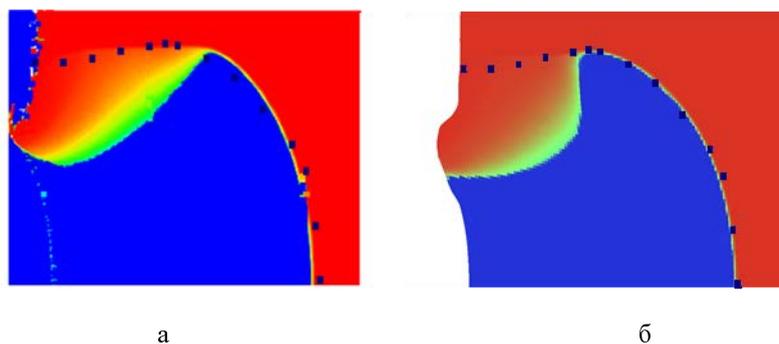


Рис. 6. Задача 3. Поле концентрации ВВ на разные моменты времени: а – расчет 1; б – расчет 2; в – расчет по методике Д. Окончание рисунка на с. 193



в

Рис. 6. Окончание



а

б

Рис. 7. Задача 3. Поле концентрации ВВ с положением фронта волны: а – расчет 2; б – расчет по методике Д

Как следует из рис. 7, положения фронта волны, полученные в расчетах по методу SPH и методике Д, совпадают. Результаты расчета 2 ближе к результатам по методике Д по сравнению с расчетом 1 (см. рис. 6, 7). Поэтому можно сделать вывод, что для проведения подобных расчетов по методу SPH достаточно расстановки частиц с шагом 0,01. Именно такая равномерная расстановка частиц с $\Delta x = 0,01$; $\Delta y = 0,01$ применялась во всех рассматриваемых ниже расчетах по методу SPH.

Задача 4. Влияние толщины инициирующей пластины из ВВ на основе ТЭНа на формирование детонации в ВВ на основе октогена. Начальная геометрия тестового расчета изображена на рис. 8. Исследование применимости модели кинетики МК к моделированию формирования и распространения детонации в ВВ на аналогичных тестах приведено в работе [10].

При подготовке к счету эта система разбивалась на четыре математические области (рис. 8). В качестве пассивного ВВ (область 1) задавалось ВВ1 на основе октогена с плотностью 1,86. Плотность пенопласта 0,6, а плотность ВВ на основе ТЭНа 1,525. Толщина инициирующей пластины (Δ) варьировалась. Распространение детонации в активном ВВ (область 3) рассчитывалось с контролем скорости детонационной волны, в пассивном ВВ – по модели кинетики детонации МК [5]. В начальный момент времени $t = 0$ в активном ВВ инициировался слой мгновенной детонации.

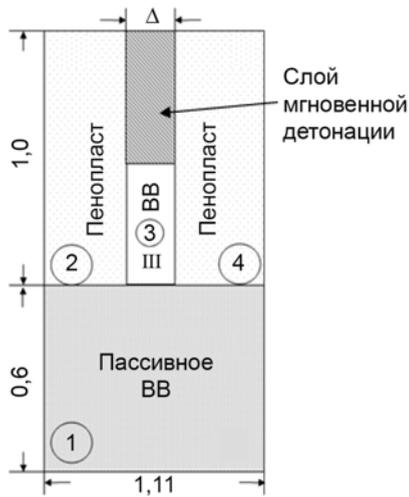


Рис. 8. Начальная геометрия задачи 4

В расчете по методу SPH оба коэффициента – линейной и квадратичной вязкости – были равны 1,0; сглаживающая длина $h = 0,0133$. Толщина инициирующей пластины бралась равной $\Delta = 0,1$ и $0,2$.

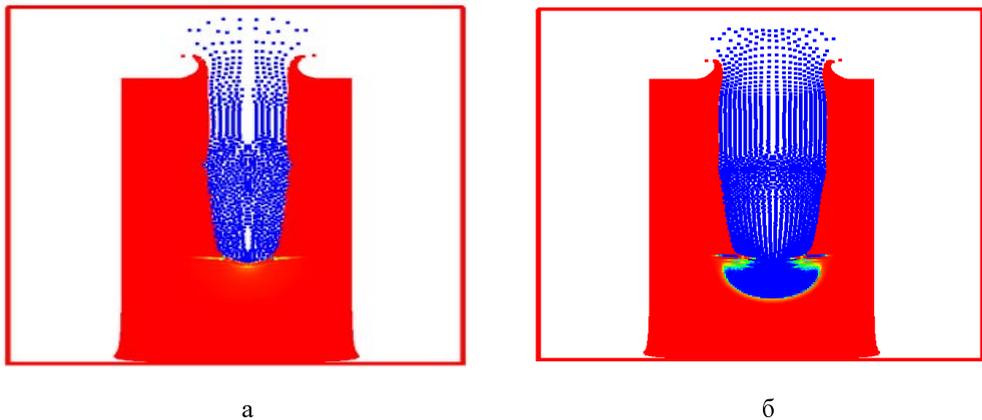


Рис. 9. Задача 4. Поле концентраций ВВ в расчете по методу SPH: а – $\Delta = 0,1$, $t = 1,2$; б – $\Delta = 0,2$, $t = 1,0$

На рис. 9 показано поле концентраций ВВ в расчете по методу SPH с разной толщиной инициирующей пластины на контрольные моменты времени. Из рисунка видно, что при толщине инициирующей пластины $\Delta = 0,1$ детонация в пассивном ВВ затухает. Аналогичный результат получен в расчете, выполненном по методике Д. При толщине инициирующей пластины $\Delta = 0,2$ продолжается распространение детонационной волны в пассивном ВВ. То же самое получается и

в аналогичном расчете, выполненном по методике Д. На рис. 10 показано поле концентраций ВВ в расчете по методу SPH (слева) и методике Д (справа).



Рис. 10. Задача 4. Поле концентраций ВВ, $\Delta = 0,2$, $t = 1,0$: а – расчет по SPH; б – расчет по методике Д

Таким образом, наблюдается совпадение расчетов по методу SPH и методике Д.

Задача 5. Влияние толщины инициирующей пластины из ВВ на основе ТЭНа на формировании детонации в ВВ на основе октогена и ТАТБ. На рис. 11 изображена начальная геометрия в плоской постановке [10].

Начальные условия нулевые: во всех областях – $U_x = U_y = 0$, $E = P = 0$. В начальный момент времени пластина из ВВ на основе ТЭНа (область 1) инициируется по поверхности. Плотность ВВ на основе ТЭНа 1,525, ВВ (октоген + ТАТБ) 1,89.

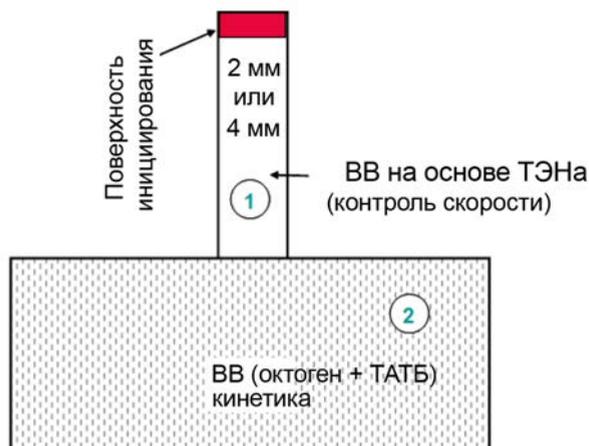


Рис. 11. Начальная геометрия задачи 5

Требуется определить, возникнет ли стационарная детонация в образце ВВ (октоген + ТАТБ) при толщине пластины 0,2 и 0,4. Детонация в инициирующей пластине считается с контролем скорости детонации, ВВ (октоген + ТАТБ) – с кинетикой МК [5]. Коэффициенты линейной и квадратичной вязкости равны 1; сглаживающая длина $h = 0,0133$. На рис. 12 показаны поля концентраций ВВ (октоген + ТАТБ) для толщины инициирующей пластины $\Delta = 0,2$ из ВВ на основе ТЭНа. При такой ширине инициирующей пластины детонация в ВВ (октоген + ТАТБ) угасает.

На рис. 13 показаны поля концентраций ВВ (октоген + ТАТБ) для толщины инициирующей пластины $\Delta = 0,4$. Из рисунков видно, что при толщине инициирующей пластины $\Delta = 0,2$ при прохождении ударной волны на глубину до $0,1$ стационарной детонации не возникает. При толщине инициирующей пластины $\Delta = 0,4$ стационарная детонация возникает практически сразу и характеризуется типичной детонационной картиной. Результаты расчетов согласуются между собой.

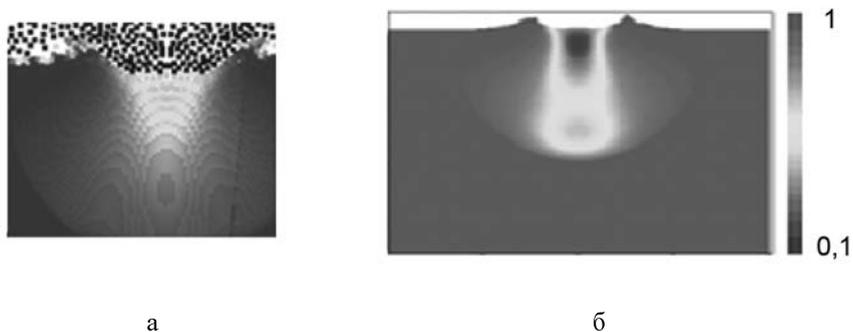


Рис. 12. Задача 5. Поле концентраций ВВ в расчетах при $\Delta = 0,2$: а – по методу SPH, б – по методике Д

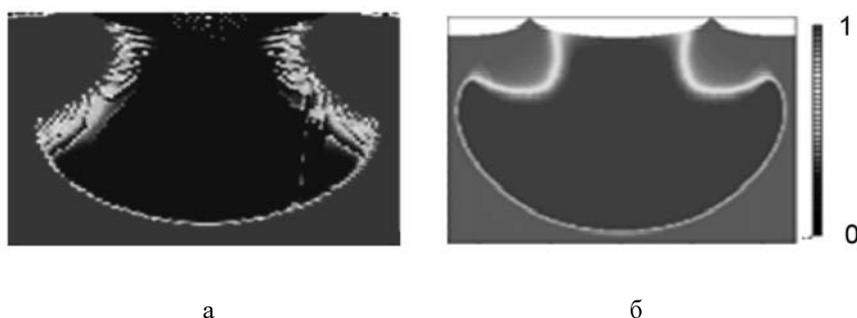


Рис. 13. Задача 5. Поле концентраций ВВ в расчетах при $\Delta = 0,4$: а – по методу SPH; б – по методике Д

Задача 6. Возбуждение детонации в ВВ на основе октогена расходящейся цилиндрической волной через демпфер из оргстекла. Описанный в этом разделе расчет был проведен для сравнения с результатами опытов, полученными методом протонной радиографии [11]. Требуется рассчитать формирование детонации под воздействием расходящейся ударной волны. Начальная геометрия приводится на рис. 14.

Плотность ВВ1 на основе ТЭНа $1,525$, плотность пенопласта $0,65$, оргстекла $1,18$, ВВ на основе октогена $1,883$. Коэффициенты линейной и квадратичной вязкости в расчете по методу SPH составили $1,0$ и $8,0$ соответственно; сглаживающая длина $h = 0,0133$.

Начальные условия нулевые: во всех областях – $U_x = U_y = 0$, $E = P = 0$. Распространение детонации в ВВ1 рассчитывалось с контролем скорости ДВ.

На рис. 15 изображены протонограммы эксперимента на два момента времени и распределения плотности, полученные в расчетах методом SPH и по методике Д на два момента времени.

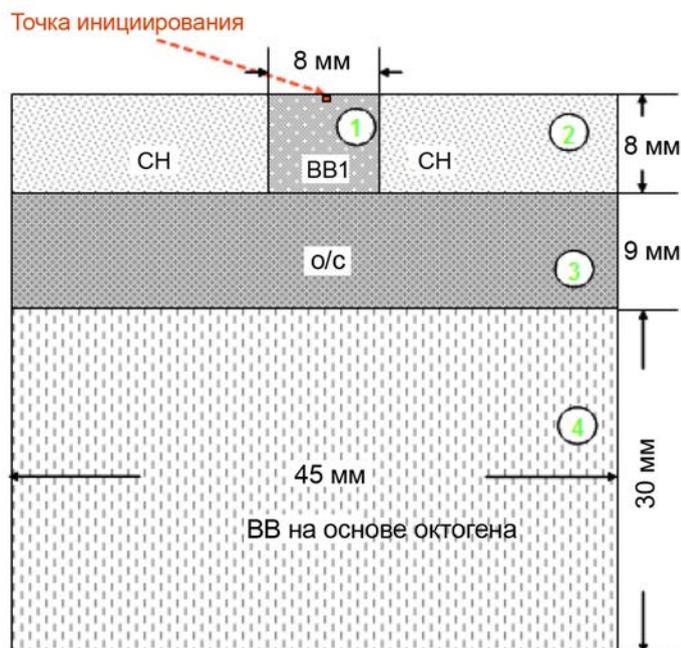


Рис. 14. Начальная геометрия задачи 6

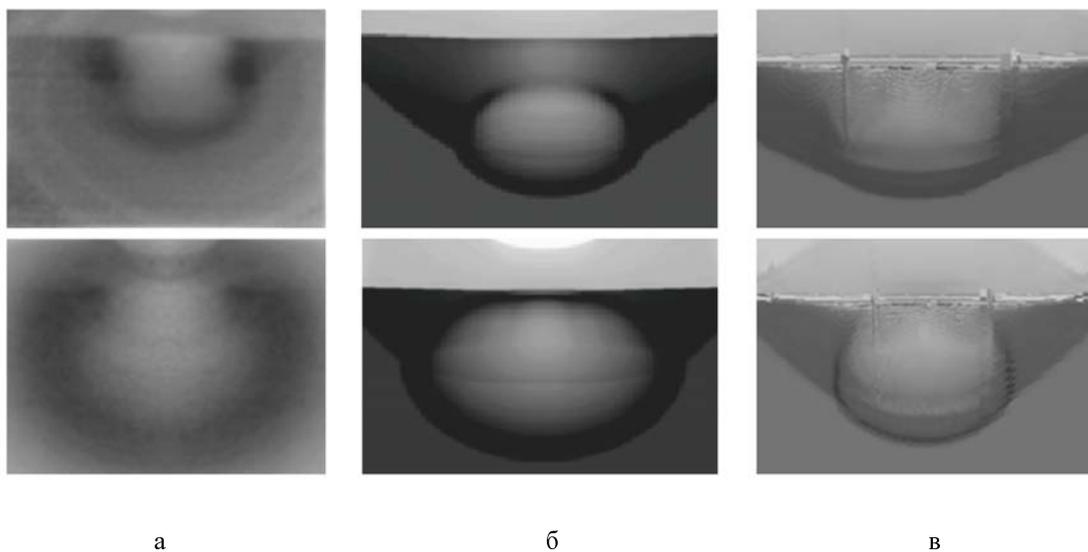


Рис. 15. Задача 6. Распределение плотности на два момента времени: а – эксперимент; б – расчет по методике Д; в – расчет по методу SPH

Из представленных результатов видно, что метод SPH позволяет промоделировать формирование детонации в «пассивном» ВВ. Расчетная и экспериментальная картины близки между собой.

Заключение

Проведенные численные исследования показали, что метод SPH можно применять для моделирования процесса детонации ВВ как с контролем скорости ДВ, так и с кинетикой по модели Морозова–Карпенко.

По результатам проведенных исследований выработаны рекомендации по подбору количества частиц для проведения расчетов по SPH с кинетикой детонации Морозова–Карпенко. Кроме того, на решение сильно влияет выбор входящих коэффициентов (сглаживающая длина h , коэффициенты вязкости α и β). В данной работе приведены оптимальные значения этих параметров. К сожалению, набор этих оптимальных коэффициентов часто индивидуален для каждой задачи и подбор их зачастую занимает довольно много времени.

Полученные в тестах результаты согласуются с результатами расчетов по методике Д и имеющимися экспериментальными данными.

Список литературы

1. Cloutman L. D. An Evaluation of Smoothed Particle Hydrodynamics // *Advances in the Free-Lagrange Method., Lecture Notes on Physics*. 1990. Vol. 395. P. 248–266.
2. Libersky L. D., Petschek A. G. Smoothed Particle Hydrodynamics with Strength of Materials // *Ibid.* P. 267–295.
3. Libersky L. D., Petschek A. G., Carney T. C. et al. High-strain Lagrangian Hydrodynamics. A Three-dimensional SPH Code for Dynamic Material Response // *J. Comput. Phys.* 1993. Vol. 109. P. 67–75.
4. Libersky L. D., Petschek A. G. Cylindrical Smoothed Particle Hydrodynamics // *Ibid.* P. 76–83.
5. Бахрах С. М., Володина Н. А., Зайцева М. О. и др. Экспериментальное и численное исследование развития процесса детонации ВВ типа ТАТБ // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2005. Вып. 1. С. 41–56.
6. Комрачков В. А., Карпенко Н. И., Ковтун А. Д. и др. Рентгенографические исследования влияния нагрева на ударно-волновую чувствительность пластифицированного ТАТБ // *Тр. Межд. конф. «V Харитоновские тематические научные чтения»*. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003. С. 208–214.
7. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Куратов С. Е. и др. Теоретическое обоснование феноменологической модели ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ // *Химическая физика*. 1995. Т. 14, № 2–3. С. 32–39.
8. Бондаренко Ю. А. Свойства решений при счете нормальной детонации навязыванием энерговыделения с заданной скоростью фронта // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов* 2009. Вып. 1. С. 3–18.
9. Артемьев А. Ю., Башурова М. С., Делов В. И. и др. Пакет прикладных программ Д для решения нестационарных задач газодинамики в переменных Лагранжа и задач механики дефор-

мируемого твердого тела на регулярных сетках // III Забабахинские научные чтения: тез. докл. Кыштым, 1992. С. 41–42.

10. Родионов А. В., Бельский В. М., Богданов Е. Н. и др. Определение глубины возбуждения детонации радиоволновым методом в пластифицированных октогене и ТАТБ // Сб. докл. Межд. конф. «IX Харитоновские тематические научные чтения. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. С. 69–73.

11. Трутнев Ю. А., Михайлов А. Л., Сырунин М. А. и др. Протонная радиография быстропротекающих процессов на базе ускорителя У-70. Новые возможности // Сб. докл. Межд. конф. «XIX Харитоновские чтения». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2017.

Studying the «SPH» Method Applicability to the 2D Simulation of Gas Dynamic Processes with Detonation

I. M. Epishkov, I. V. Zalyalova, D. M. Linnik, S. Yu. Suslova

The paper describes the study into the feasibility of using the classic SPH method for the 2D simulation of gas dynamic processes with detonation. The main formulas of the method are presented, as well as results of gas dynamics simulations with the detonation wave rate control and using the Morozov-Karpenko kinetic model. The calculated results are compared with the available experimental data and also with similar results obtained using the two-dimensional D code.

УДК 519.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_200

Модуль геометрического ядра GeoCore пакета программ 3D-РНД

Д. В. Логинов

Приводится общее описание библиотеки геометрического ядра GeoCore, используемой для расчета в пакете программ 3D-РНД начальных данных задач математической физики в трехмерной постановке. Геометрическое ядро предназначено для импорта и обработки трехмерных геометрических моделей, спроектированных в САПР. Для трехмерной модели в геометрическом ядре используется граничное представление. Геометрическое ядро реализовано в виде программной библиотеки и предоставляет интерфейс доступа к имеющимся возможностям по обработке трехмерных геометрий. Это позволяет использовать GeoCore как в 3D-РНД, так и в других программах. Представлены результаты применения геометрического ядра в пакете программ 3D-РНД.

Введение

Одним из компонентов технологии подготовки начальных данных для численного моделирования задач математической физики в трехмерной постановке является пакет программ 3D-РНД [1, 2]. С использованием 3D-РНД строятся сетки и рассчитываются начальные данные для методик, численно моделирующих физические процессы в различных постановках – лагранжевой, лагранжево-эйлеровой и эйлеровой, в последних двух – с применением или без применения метода концентраций веществ [3].

Особенностью программы 3D-РНД является то, что она позволяет проводить в интерактивном режиме расчет начальных данных (РНД) для трехмерных задач, не обладающих свойством симметрии. Одним из требований к 3D-РНД является максимальное единообразие вводимых данных для сокращения времени задания информации при проведении расчетов одной и той же задачи по разным математическим методикам. При этом особенности конкретной методики учитываются на этапах задания параметров пространственных сеток (структурированных и неструктурированных) и при расчете сеток и сеточных величин.

Сквозная технология проведения РНД состоит из нескольких этапов:

- построение геометрической модели задачи в САПР;
- импорт геометрии задачи в программу 3D-РНД;
- задание наборов областей, параметров сетки, начальных и граничных условий в диалоговом режиме в программе 3D-РНД;
- построение сеток и расчет сеточных величин, как правило, на многопроцессорной ЭВМ;
- запись результатов РНД в формате, доступном для всех расчетных методик;
- анализ рассчитанных данных с помощью интерактивной визуализации.

Для импорта и обработки трехмерной геометрической модели программа 3D-РНД использует программную библиотеку геометрического ядра GeoCore (далее – «геометрическое ядро»).

Структура библиотеки

Геометрическое ядро разрабатывалось как специализированный инструмент для работы с трехмерными геометрическими моделями при проведении РНД. Тем самым были определены основные возможности библиотеки, используемые в генераторах сетки и модуле расчета объемных концентраций. Это импорт геометрических моделей из САПР, получение информации о структуре и свойствах геометрической модели, выполнение операций пересечения геометрических объектов, построение тесселяции (аппроксимация граней тел треугольниками для отображения геометрической модели подсистемой визуализации программы 3D-РНД). Геометрическое ядро включает в себя программную реализацию математических алгоритмов обработки трехмерной геометрии.

Импорт и обработка геометрических моделей выполняются без упрощений. Современные геометрические (сборочные) модели, обрабатываемые геометрическим ядром, зачастую содержат несколько тысяч деталей.

Главной частью геометрической модели является описание формы моделируемого объекта. В геометрическом ядре GeoCore используется граничное представление (b-гер, boundary representation), позволяющее представлять и моделировать объекты произвольной формы и сложности [4, 5].

Описание трехмерного тела с помощью граничного представления опирается на топологические объекты: вершина, ребро, контур, грань и оболочка (совокупность стыкующихся по границам поверхностей).

Твердое тело представляет собой совокупность замкнутых оболочек. Оболочки описываются по единым правилам и состоят из набора граней. Грани, ребра и вершины строятся на базе элементарных геометрических объектов (точек, кривых и поверхностей) добавлением к ним информации о своих соседях и взаимной ориентации.

Геометрические объекты в ядре подразделяются на три основных типа: точки, кривые и поверхности. Они реализованы в виде иерархии классов C++.

Объект класса кривой задает параметрическую кривую в пространстве как векторную функцию одной переменной (параметра) и определяет набор методов для вычисления:

- точки кривой по ее параметру;
- первой и второй производной в точке;
- кривизны кривой в точке;
- точки кривой, ближайшей к заданной (получение проекции).

В библиотеке реализованы следующие типы кривых: прямая линия, дуга окружности, дуга эллипса, дуга параболы, дуга гиперболы, кубический сплайн, сплайн NURBS [6].

Класс обобщенной поверхности задает параметрическую поверхность в трехмерном пространстве как векторную функцию двух переменных и определяет следующий набор методов, обеспечивающих вычисление:

- точки поверхности по ее параметрам;
- нормали к поверхности;
- проекции точки на поверхность (параметров проекции);
- частных производных и производных по направлениям.

В библиотеке реализованы следующие типы поверхностей: плоскость, коническая поверхность, цилиндрическая поверхность, сферическая и тороидальная, линейчатая, поверхность вращения с образующей в виде обобщенной кривой (обычно сплайны), поверхность выдавливания с образующей в виде обобщенной кривой (обычно сплайны), поверхность скругления, бикубическая сплайновая поверхность, NURBS, цилиндрическая сплайновая (бикубическая сплайновая поверхность, заданная в цилиндрических координатах) [6].

Описанные типы кривых и поверхностей активно используются при построении трехмерных моделей в современных САПР.

Библиотека геометрического ядра имеет модульную структуру, что облегчает сопровождение и развитие программной библиотеки. Операции обработки геометрии, реализующие различные алгоритмы, выделены в отдельные модули, зависящие от модели данных ядра. Далее приводится описание основных модулей библиотеки.

Модель данных обеспечивает хранение и предоставляет доступ к объектам геометрической модели. Используемый при реализации модели объектно-ориентированный подход позволил выделить различные уровни топологических и геометрических объектов, а также алгоритмов обработки геометрии.

Модуль трансляции обеспечивает импорт геометрической модели, представленной в нейтральном формате САПР. Позволяет сохранить геометрическую модель во внутреннем бинарном формате модели данных геометрического ядра.

Модуль тесселяции реализует алгоритм построения поверхностной триангуляции граней тела, ориентированной на визуализацию геометрической модели. Набор треугольников, построенных модулем, используется программой 3D-РНД для отображения трехмерной геометрии.

Модуль проецирования реализует операции по нахождению проекций точек на кривые и поверхности. Проецирование является базовой операцией по отношению к геометрическим объектам и используется другими модулями обработки геометрии, в частности модулем пересечений и модулем тесселяции.

Модуль пересечений реализует алгоритмы нахождения точек пересечения кривых с поверхностями, телами, сборочными моделями.

Модуль построения реализует алгоритмы построения плоских сечений сборочной модели.

Алгоритмы библиотеки

Далее приведено описание некоторых алгоритмов, используемых программой 3D-РНД для проведения расчетов сеток и концентраций. Поскольку статья имеет обзорный характер, ограничимся описанием алгоритмов модулей тесселяции и пересечений (на примере пересечения прямой и геометрической модели).

Алгоритм тесселяции (триангуляции) поверхностей. Под *тесселяцией* поверхностей понимается аппроксимация поверхности набором полигонов. В рассматриваемом случае используются треугольники, с учетом границ грани. Модуль тесселяции позволяет построить полигональное представление всей геометрической модели, которое используется для визуализации и геометрических расчетов. Тесселяция в геометрическом ядре GeoCore выполняется в плоскости параметров поверхностей.

Так как основное назначение тесселяции – это использование в ее в подсистеме визуализации 3D-РНД, то основной упор сделан на скорость работы алгоритма и точность описания поверхности, а не на качество самих элементов (треугольников). Точность аппроксимации поверхности может варьироваться и в текущей реализации задается относительно размеров тела сборочной модели. В качестве алгоритма тесселяции был реализован алгоритм триангуляции параметрической грани, использующий подходы, представленные в работах [7, 8]. Пример поверхностной триангуляции, построенной модулем тесселяции геометрического ядра GeoCore, представлен на рис. 1.

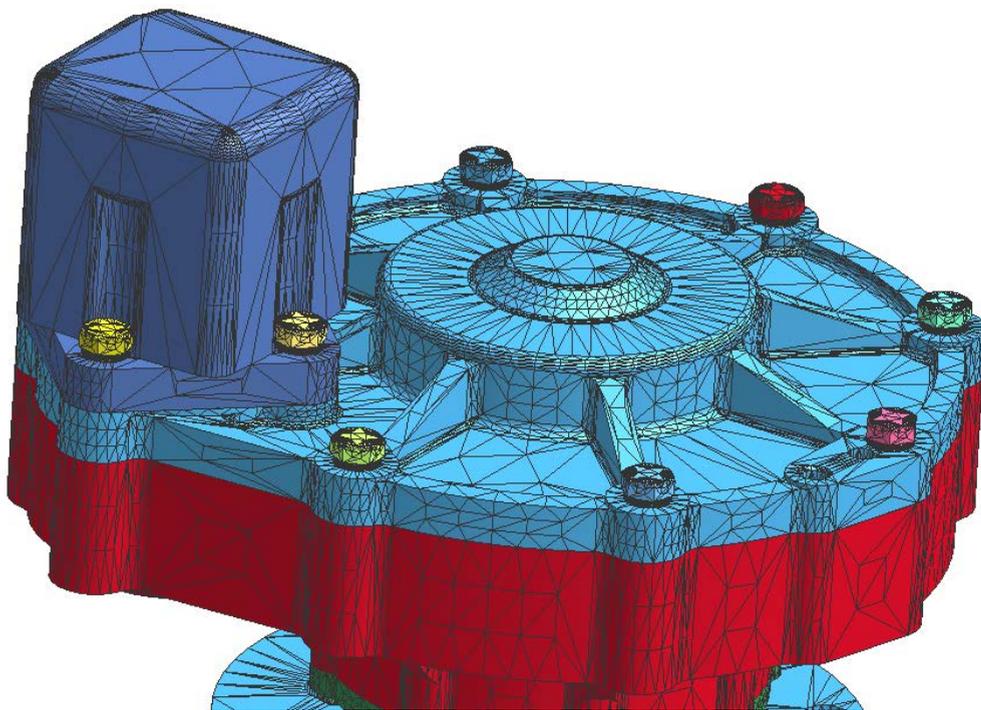


Рис. 1. Пример геометрической модели, импортированной в 3D-РНД

Определение пересечений геометрических объектов. Для построения пространственных сеток и расчета распределения веществ в ячейках сетки недостаточно методов навигации по геометрической модели и вычислений базовых характеристик геометрических объектов. При проведении РНД в части обработки геометрии необходимы методы определения пересечения линий расчетной сетки и геометрии задачи, классификация пространственных точек относительно тел сборочной модели и т. п. Указанные средства обработки трехмерной геометрии реализованы в геометрическом ядре в виде модуля пересечений. Данный модуль включает в себя логику биб-

лиотеки, связанную с пересечениями ее элементов. В нем выделены геометрическая (аналитическая) и топологическая части. К геометрической части относятся два набора алгоритмов: определяющих пересечения пространственных кривых и поверхностей и пересечения поверхностей между собой. Оба набора сгруппированы по типам поверхностей и имеют собственный программный интерфейс. К топологической части модуля пересечения относится модуль пересечения прямой и сборочной моделей (сборки).

Основной целью алгоритма пересечения сборки и прямой линии является получение разбиения прямой на порции (данное требование обусловлено особенностями генератора сеток 3D-РНД). Под порцией подразумевается часть прямой, которая целиком принадлежит одному из тел геометрии. Схематично разбиение линии на порции представлено на рис. 2.

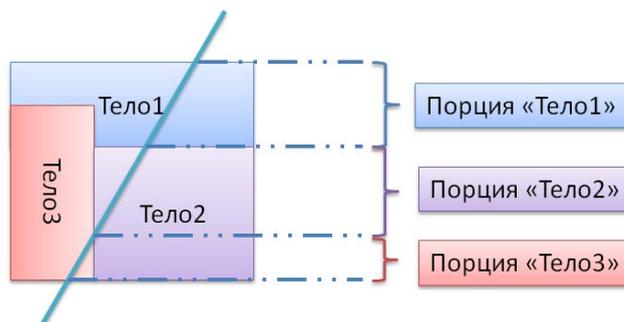


Рис. 2. Разбиение линии на порции

Рассмотрим структуру и принципы работы данного алгоритма.

Получение порций пересечения прямой и сборки осуществляется в несколько этапов:

- получение точек пересечения прямой и каждой из граней тела;
- группировка найденных точек в точки пересечения с телом, получение порций по этим точкам;
- группировка порций по всем телам сборки в порции уровня сборки.

Для получения информации о точках пересечения прямой и грани тела используется набор операций пересечения прямой и параметрической поверхности, а также методы, вычисляющие характеристики геометрических объектов. Среди методов ядра библиотеки GeoCore особую роль играет метод, определяющий принадлежность точки грани тела (грань представляет собой часть поверхности, ограниченную контуром из ребер). Он необходим для того, чтобы из найденных точек параметрической поверхности выделить те, которые принадлежат данной грани.

Пусть при нахождении точек пересечения для разных поверхностей (граней тела) было найдено подмножество точек, находящихся друг от друга на заданном небольшом расстоянии. Точки каждого такого подмножества с определенной точностью совпадают и образуют *точку сгущения*. Геометрически такая точка лежит на ребре (вершине) тела либо расположена в месте соприкосновения граней тела. Характеристиками этой точки являются тип, нормаль, информация о «хозяйне» (если это ребро или вершина тела) и параметр кривой. Нормаль в такой точке считается как сумма нормалей по всем точкам, из которых она формируется. Что касается типа точки сгущения

ния, то она может быть либо точкой касания к телу, либо точкой пересечения с телом. Для определения типа точки используются характеристики точек, из которых формируется точка сгущения.

После того как все точки сгущения обработаны, из рассмотрения убираются точки касания тела, а все остальные упорядочиваются в порядке возрастания параметра прямой. Далее из оставшихся точек, начиная с первой, формируются порции. Началом порции является точка входа прямой в тело, концом – точка выхода прямой из тела.

Результаты выполнения алгоритма пересечения прямой и тела записываются в контейнер порций. Элемент этого контейнера содержит участок прямой и список тел, которому принадлежит этот участок (список будет пуст, если участок не принадлежит ни одному из тел геометрии).

Алгоритм пересечения прямой и сборочной модели отвечает за объединение порций по всем телам сборки в единый контейнер, содержащий разбиение прямой на непересекающиеся участки. Формирование такого контейнера осуществляется в три этапа. Сначала получаются порции по всем телам сборки. Затем определяется, есть ли порции, имеющие общие участки прямой (такое возможно, если кривая проходит в месте соприкосновения тел или в месте проникновения одного тела в другое). Если такие порции есть и их участки совпадают, то они собираются в один элемент «порция»; если нет, то разбиваются на несколько участков и распределяются по отдельным элементам. После того как наложения локализованы в отдельных элементах, производится добавление участков прямой, которые не принадлежат ни одному из тел сборки.

Результаты использования GeoCore в программе 3D-РНД

Основное назначение геометрического ядра в программе 3D-РНД – это получение информации о геометрических объектах, построение поверхностной триангуляции модели для ее визуализации и использование генератором расчетных сеток и модулей распределения веществ.

При построении сетки учитываются требования методик к типу сетки и математической постановке задачи. В зависимости от постановки задачи при построении сетки границы раздела веществ могут учитываться (проходить по линиям сетки) или не учитываться.

В случае когда границы раздела веществ проходят по линиям сетки, в каждую ячейку сетки заносятся начальные данные одного вещества. Если границы раздела веществ проходят не по линиям сетки, в смешанных ячейках сетки рассчитываются объемные концентрации веществ, с помощью которых выделяются границы раздела между веществами. В этом случае расчет концентраций веществ в ячейках сетки занимает основное время выполнения программы 3D-РНД, поскольку активно используются ресурсоемкие операции геометрического ядра (нахождение пересечений геометрических объектов, классификации точек относительно тел и т. п.). На рис. 3 представлены геометрическая модель и расчетная сетка с рассчитанными объемными концентрациями (смешанные ячейки показаны белым цветом).

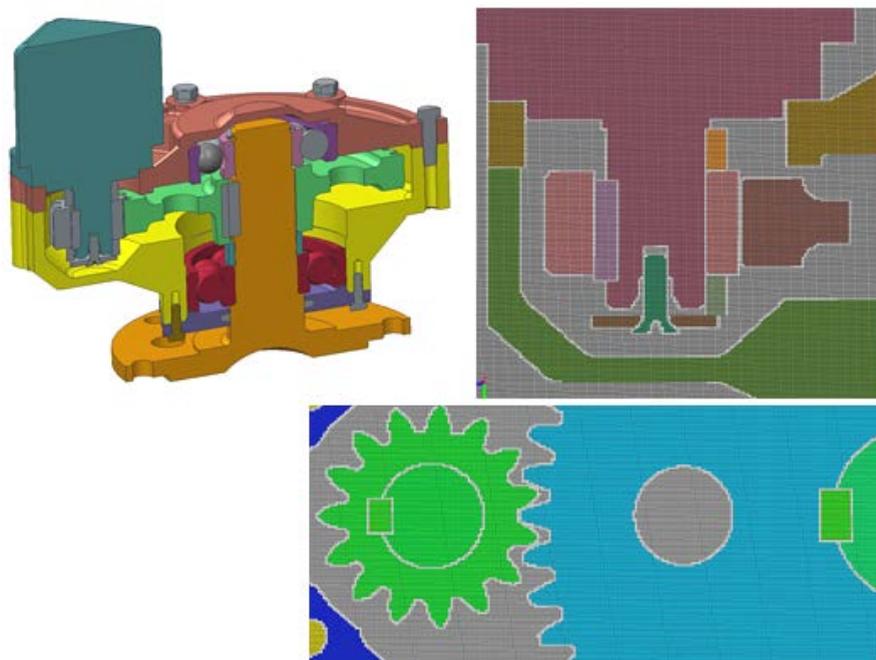


Рис. 3. Геометрическая модель и фрагменты прямоугольной структурированной сетки с рассчитанными объемными концентрациями

Заключение

Для численного моделирования задач математической физики в трехмерной постановке разработано и реализовано геометрическое ядро, используемое при расчете начальных данных по программе 3D-РНД. Приведено описание архитектуры и основных алгоритмов геометрического ядра, используемых при генерации расчетных сеток. Статья имеет обзорный характер и не раскрывает математических аспектов реализованных алгоритмов. Это, по мнению автора, является темой отдельной работы.

Геометрическое ядро прошло стадии формирования требований, проектирования, реализации, тестирования и внедрения, находится на этапе эксплуатации и сопровождения, позволяя проводить расчет начальных данных для трехмерных задач, геометрия которых моделируется в САПР.

Список литературы

1. Тарасов В. И., Ребров С. В., Волгин А. В. и др. Расчет начальных данных трехмерных задач по программе 3D-РНД // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 3. С. 66–71.
2. Олесницкая К. К., Потехин А. Л., Потехина Е. В., Тарасов В. И. Методы ускорения расчета начальных данных по комплексу программ 3D-РНД при численном моделировании задач математической физики в параллельном режиме // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 2. С. 49–58.
3. Бахрах С. М., Глаголева Ю. И., Самигулин М. С. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566–569.
4. Голованов Н. Н. Геометрическое моделирование. М.: ИНФРА-М, 2016.
5. Hoffmann C. M. Geometric and solid modeling. San Mateo, Calif.: Morgan Kaufman, 1989.
6. Farin G. E. Curves and Surfaces for Computer Aided Geometric Design – A Practical Guide, Boston: Academic Press, 1993.
7. Balázs A., Guthe M., Klein R. Efficient trimmed NURBS tessellation. Bonn: University of Bonn, 2004.
8. Klein R., Straßer W. Large Mesh Generation from Boundary Models with Parametric Face Representation // Proc. of ACM SIGGRAPH Symposium on Solid Modeling. Salt Lake City. 1995. P. 431–440.

Module of Geometric Core GeoCore in «3D-RND» Program Package

D. V. Loginov

A general description of the GeoCore geometric kernel library used to calculate the initial data of mathematical physics problems in a three-dimensional formulation in the 3D-RND software package is given. The geometric kernel is intended for importing and processing three-dimensional geometric models designed in CAD. For a 3D model, a boundary representation is used in the geometric kernel. The geometric core is implemented as a software library and provides an interface for accessing the available capabilities for processing three-dimensional geometries. This allows GeoCore to be used in both 3D RND and other programs. The results of applying the geometric kernel in the 3D-RND software package are presented.

УДК 519.6 + 533.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_208

Искусственная вязкость для подавления численной неустойчивости типа «карбункул» в расчетах трехмерных задач

А. В. Родионов

Приводится обобщение метода искусственной вязкости для подавления карбункул-неустойчивости на случай моделирования трехмерных задач. Рассматриваются схемы первого порядка точности (Годунова, Роу, Сафронова, HLLC, AUSM+) применительно к расчетам трехмерных задач на гладких структурированных сетках. Эффективность метода демонстрируется примерами решения известных тестовых задач.

Введение

Феномен карбункула (также известный как ударно-волновая неустойчивость) остается одной из наиболее серьезных вычислительных проблем с тех пор, как он был впервые замечен и идентифицирован [1, 2]. В работах [3, 4] был опробован новый подход к решению проблемы, заключающийся в том, что в базовый метод решения уравнений Эйлера добавляется некоторое количество диссипации в форме правых частей уравнений Навье – Стокса; при этом коэффициент молекулярной вязкости заменяется коэффициентом искусственной вязкости. В последующих работах [5, 6] эта методика подавления ударно-волновой неустойчивости получила свое развитие: модель искусственной вязкости была скорректирована и настроена на случай применения схем первого порядка аппроксимации к моделированию двумерных течений. Эффективность данного подхода была продемонстрирована многочисленными примерами решения известных тестовых задач. В данной статье предложенная в работах [5, 6] модель искусственной вязкости распространяется на случай решения трехмерных задач.

Модель искусственной вязкости

Выбранная в работах [5, 6] формула для коэффициента искусственной вязкости записывается следующим образом:

$$\mu_{AV} = \begin{cases} C_{AV}\rho h^2 \sqrt{(\nabla \vec{u})^2 - (C_{th}a/h)^2}, & \text{если } \nabla \vec{u} < -C_{th}a/h, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (1)$$

где \vec{u} – вектор скорости, ρ – плотность, a – скорость звука, h – характерный размер ячейки, C_{AV} – безразмерный параметр, C_{th} – коэффициент в пороговой интенсивности сжатия, ограничивающей действие искусственной вязкости только фронтом ударной волны (для этого коэффициента было выбрано: $C_{th} = 0,5$).

В дополнение к искусственной вязкости предлагаемый подход подразумевает учет искусственной теплопроводности, которая рассчитывается через коэффициент

$$\lambda_{AV} = \frac{\mu_{AV} C_P}{Pr}, \quad (2)$$

где C_P – удельная теплоемкость при постоянном давлении, Pr – число Прандтля, полагаемое равным $3/4$.

Коэффициенты искусственной вязкости и теплопроводности первоначально вычисляются в центрах ячеек, причем дивергенция вектора скорости вычисляется по теореме Гаусса–Остроградского. В случае использования достаточно гладкой структурированной сетки значения коэффициентов на боковых гранях ячеек находятся при помощи простой линейной интерполяции вида: $f_{i+1/2,j} = 0,5(f_{i,j} + f_{i+1,j})$.

Как было установлено в работах [5, 6], при использовании схем первого порядка аппроксимации, таких как схемы Годунова [7], Роу [8] и HLLC [9], величина $C_{AV} = 0,6$ обеспечивает подавление ударно-волновой неустойчивости во всех рассмотренных тестовых задачах. При этом характерный размер ячейки следует вычислять как

$$h = \max(d_1, d_2)/\sqrt{2}, \quad (3)$$

где d_1 и d_2 – длины диагоналей ячейки. Для прямоугольных ячеек в декартовых координатах это выражение сводится к $h = \sqrt{(h_x^2 + h_y^2)}/2$.

Обобщение на случай трехмерных расчетов

Рассмотрим тестовую задачу типа задачи Кёрка, которая была использована в работах [5, 6] для тестирования и настройки метода искусственной вязкости применительно к расчетам двумерных задач. Она обобщается на трехмерный случай простым способом: добавляется координатное направление z с сеточным разбиением и граничными условиями, аналогичными тем, что исполь-

зовались для координатного направления y . В результате получается трехмерная тестовая задача в следующей постановке.

Рассчитывается плоская ударная волна, распространяющаяся вдоль прямоугольного канала (вдоль оси OX). Расчетная область $[0, 1600] \times [0, 25] \times [0, 25]$ в пространстве XYZ покрывается регулярной сеткой, состоящей из кубических ячеек единичного размера ($h_x = h_y = h_z = 1$); начальное состояние газа (компоненты скорости, плотность и давление) в ячейках следующие: $(u_x, u_y, \rho, P) = (0, 0, 1, 1)$. На боковых границах расчетной области (вдоль осей OY и OZ) ставится условие периодичности течения. На правой границе расчетной области задается непроницаемая стенка, а слева задается втекающий поток с параметрами $(u_1, 0, \rho_1, P_1)$, которые определяются ударно-волновым числом Маха (M_S) и показателем адиабаты (γ):

$$u_1 = u_S \frac{2(M_S^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_S^2}, \quad \rho_1 = \frac{(\gamma + 1)M_S^2}{(\gamma - 1)M_S^2 + 2}, \quad P_1 = \frac{2\gamma M_S^2 - (\gamma - 1)}{(\gamma + 1)},$$

где $u_S = \sqrt{\gamma}M_S$ – скорость распространения ударной волны по неподвижному газу.

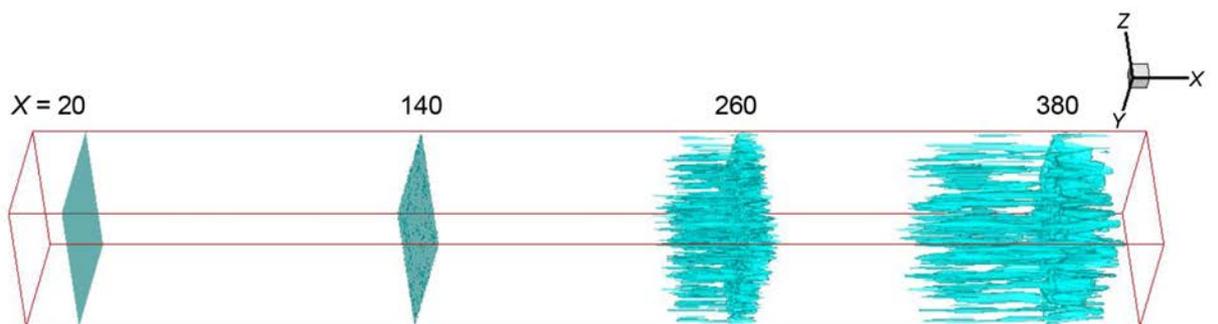
В трехмерной тестовой задаче неустойчивость плоской ударной волны инициируется ничтожно малым возмущением продольной координаты x в узлах сетки, расположенных в одном поперечном сечении $i = 10$. Это возмущение имеет вид: $\hat{x}_{10,j,k} = x_{10,j,k} + \delta(2RND_{j,k} - 1)$, где $\delta = 10^{-4}$, а $RND_{j,k}$ – случайные числа, генерируемые в интервале $[0, 1]$. Таким образом, ударная волна получает однократное (в момент прохождения сеточной линии $i = 10$) возмущение по всему фронту. Для измерения степени отклонения решения от одномерного потока используется величина

$$\varepsilon_0 = \max_{i,j,k} (|\rho_{i,j,k} - \bar{\rho}_i|), \quad \bar{\rho}_i = \frac{1}{JK} \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \rho_{i,j,k}.$$

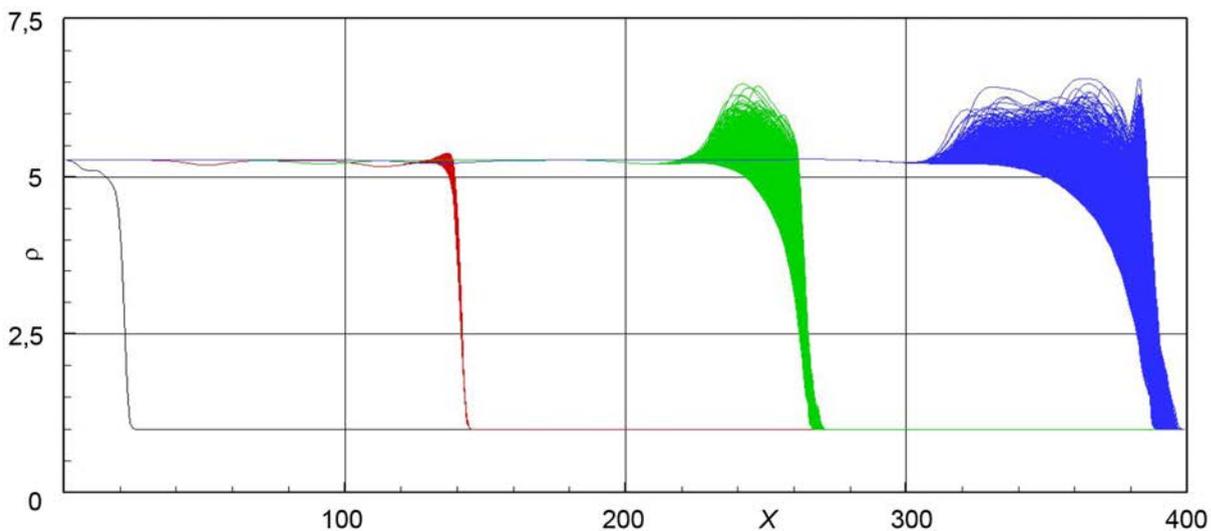
На рис. 1 (см. также цветную вкладку) приведены данные расчета по схеме Годунова трехмерной тестовой задачи при ударно-волновом числе Маха $M_S = 6$. Показано развитие ударно-волновой неустойчивости в динамике.

На рис. 2,а приведены зависимости ε_0 от расстояния, пройденного ударной волной ($x_S = u_S t$), для различных ударно-волновых чисел Маха, а на рис. 2,б показана динамика роста возмущений для ударной волны с $M_S = 6$ при различных значениях коэффициента C_{AV} . Если сравнить эти данные с аналогичными данными для двумерного варианта тестовой задачи (см. рис. 3 в работах [5, 6]), то обнаруживается их большое сходство. Действительно, в трехмерном случае пороговое значение ударно-волнового числа Маха $M_S^C \approx 2,3$ против $M_S^C \approx 2,2$ в двумерном случае; минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости ударной волны с $M_S = 6$, составляет $C_{AV}^{\min} \approx 0,28$ в обоих случаях. Отсюда можно заключить, что модель искусственной вязкости, выбранную в работах [5, 6] для подавления ударно-волновой неустойчивости в двумерных задачах, можно перенести на трехмерный случай с небольшой

оговоркой: выражение для характерного размера ячейки должно быть распространено на трехмерный случай, а рекомендованное для использования в двумерных расчетах значение $C_{AV} = 0,6$, возможно, следует немного скорректировать. Чтобы выполнить эту задачу, было проведено исследование на различных вариантах тестовой задачи; его результаты представлены в таблице. Во всех случаях поступательная ударная волна при $M_S = 20$ рассчитывалась по схеме Годунова. Рассматривались случаи, когда ячейки сетки являются прямоугольными параллелепипедами (в таблице это сетка типа А), со сдвиговой деформацией ячеек только в направлении y (сетка типа В) или одновременно в направлениях y и z (сетка типа С). Подробное описание способа построения сетки со сдвиговой деформацией ячеек приводится в работах [5, 6].



а



б

Рис. 1. Данные расчета по схеме Годунова модифицированной задачи Кёрка с $M_S = 6$ для четырех моментов времени, соответствующих положению ударной волны $x = 20, 140, 260$ и 380 : а – изоповерхности для трех уровней плотности, $\rho = 4,5, 5,5$ и $6,6$; б – осевые профили плотности для всех продольных линий сетки

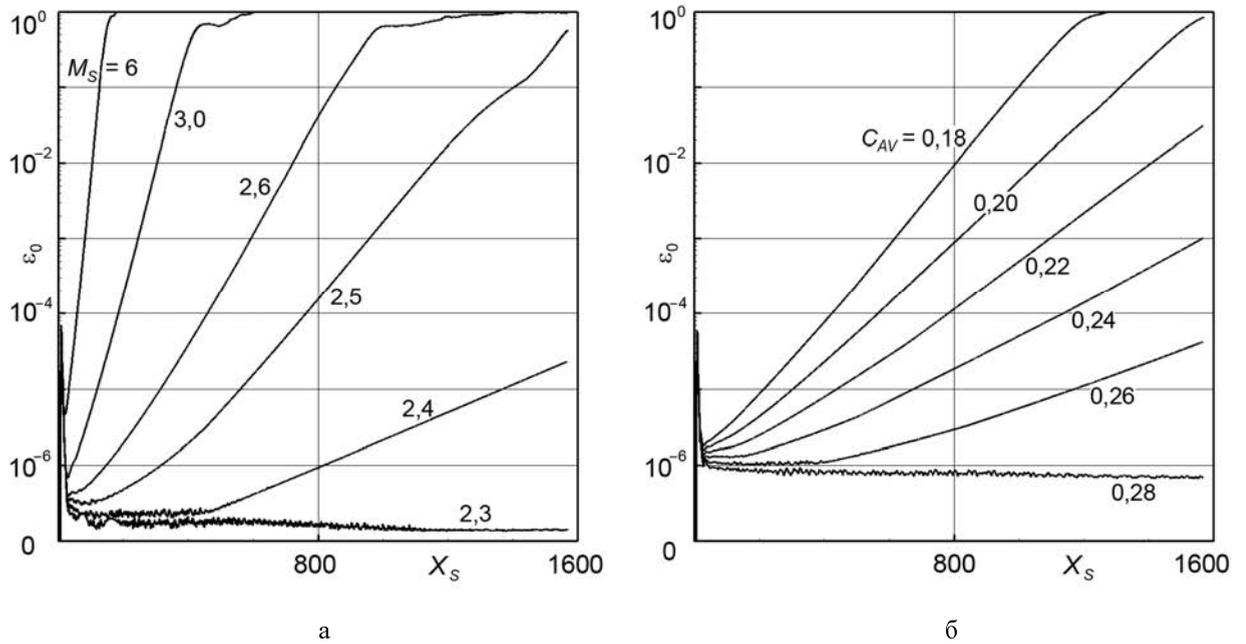


Рис. 2. Развитие неустойчивости в трехмерной тестовой задаче Кёрка. Расчеты по схеме Годунова: а – без искусственной вязкости (варьируется M_S); б – с искусственной вязкостью ($M_S = 6$, варьируется C_{AV})

Значения C_{AV}^{\min} в тестовой задаче с поступательной ударной волной (схема Годунова, $M_S = 20$)

| Тип сетки | А | А | А | А | А | В | В | С | С |
|----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| h_y/h_x | 1 | 1/4 | 1/4 | 4 | 4 | 1/2 | 1/4 | 1/2 | 1/2 |
| h_z/h_x | 1 | 1 | 1/4 | 1 | 4 | 1/4 | 1/2 | 1/2 | 1/4 |
| $h = d_{\max}^{(S)}$ | 0,44 | 0,62 | 0,56 | 0,31 | 0,14 | 0,60 | 0,43 | 0,64 | 0,64 |
| $h = d_{\max}^{(V)}$ | 0,44 | 0,90 | 0,80 | 0,43 | 0,20 | 0,88 | 0,56 | 0,53 | 0,71 |

Представленные в таблице значения C_{AV}^{\min} (минимальная величина C_{AV} , необходимая для подавления неустойчивости в конкретном варианте тестовой задачи) даны для двух способов расчета характерного размера ячейки

$$h = d_{\max}^{(S)} \equiv \max_i \left(d_i^{(S)} \right) / \sqrt{2}, \quad h = d_{\max}^{(V)} \equiv \max_i \left(d_i^{(V)} \right) / \sqrt{3}, \quad (4)$$

где $d_i^{(S)}$ – длины диагоналей боковых граней ячейки, $d_i^{(V)}$ – длины объемных диагоналей ячейки. Оба варианта согласуются с полученным ранее выражением (3) для использования в двумерных расчетах. Заметим, что в случае, когда ячейка является параллелепипедом с реберными векторами \vec{l}_1 , \vec{l}_2 и \vec{l}_3 , выражения (4) можно переписать

$$h = d_{\max}^{(S)} = \sqrt{\frac{\max(d_{12}^2, d_{23}^2, d_{13}^2)}{2}}, \quad d_{jk}^2 = l_j^2 + l_k^2 + 2\left|(\vec{l}_j \cdot \vec{l}_k)\right|,$$

$$h = d_{\max}^{(V)} = \sqrt{\frac{l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 + 2\left|(\vec{l}_1 \vec{l}_2)\right| + 2\left|(\vec{l}_2 \vec{l}_3)\right| + 2\left|(\vec{l}_1 \vec{l}_3)\right|}{3}}.$$

Как можно видеть из таблицы, использование выражения $h = d_{\max}^{(S)}$ обеспечивает устойчивый счет любого из рассмотренных вариантов при $C_{AV} = 0,64$, тогда как для выражения $h = d_i^{(V)}$ требуется значение $C_{AV} = 0,90$, что заметно выше. Исходя из полученных результатов, можно рекомендовать в трехмерных расчетах использовать выражение $h = d_{\max}^{(S)}$ и коэффициент $C_{AV} = 0,75$ (это значение взято с запасом).

Численные примеры

Рассмотрим задачу об обтекании цилиндра сверхзвуковым потоком, где феномен карбункула проявляется наиболее наглядно. Двумерный вариант постановки задачи и расчетная сетка описаны в работах [5, 6]. Отличие настоящих расчетов заключается в добавлении координаты z с равномерным разбиением интервала $0 \leq z \leq 1$ на 45 ячеек; на границах $z = 0$ и $z = 1$ ставится условие периодичности течения.

Результаты расчетов задачи при $\gamma = 1,4$ и двух значениях числа Маха набегающего потока, $M_\infty = 20$ и $M_\infty = 3$, представлены на рис. 3 и 4, соответственно. Расчеты задачи проводились с использованием схем Годунова [7], Роу [8], HLLC [9], AUSM⁺ [10] и Сафронова [11]. Заметим, что данные расчетов по схеме AUSM⁺ на этих рисунках не приводятся, так как они оказались аналогичными тем, что были получены в двумерном приближении (зависимость от координаты z в этих расчетах отсутствует). Напомним, что в расчетах двумерной задачи по схеме AUSM⁺ наблюдаются небольшие осцилляции параметров за ударной волной, которые в случае добавления искусственной вязкости исчезают.

На рис. 3 и 4 приведены изолинии числа Маха на границах расчетной области и в расчетных сечениях $z = \text{const}$, полученные с применением оригинальных схем. Видно, что феномен карбункула наиболее сильно проявляется при использовании схемы Роу. В этом случае решение имеет ярко выраженный пространственный и нестационарный характер с образованием рециркуляционной области в виде опухолеподобного нароста перед телом. При использовании схем Годунова и HLLC рециркуляционная область отсутствует. Тем не менее, и в этих вариантах решение остается пространственным и нестационарным, причем наиболее сильно неустойчивость течения проявляется в направлении z . В случае использования схемы Сафронова неустойчивость течения оказывается выше, чем в случае использования схем Годунова и HLLC.

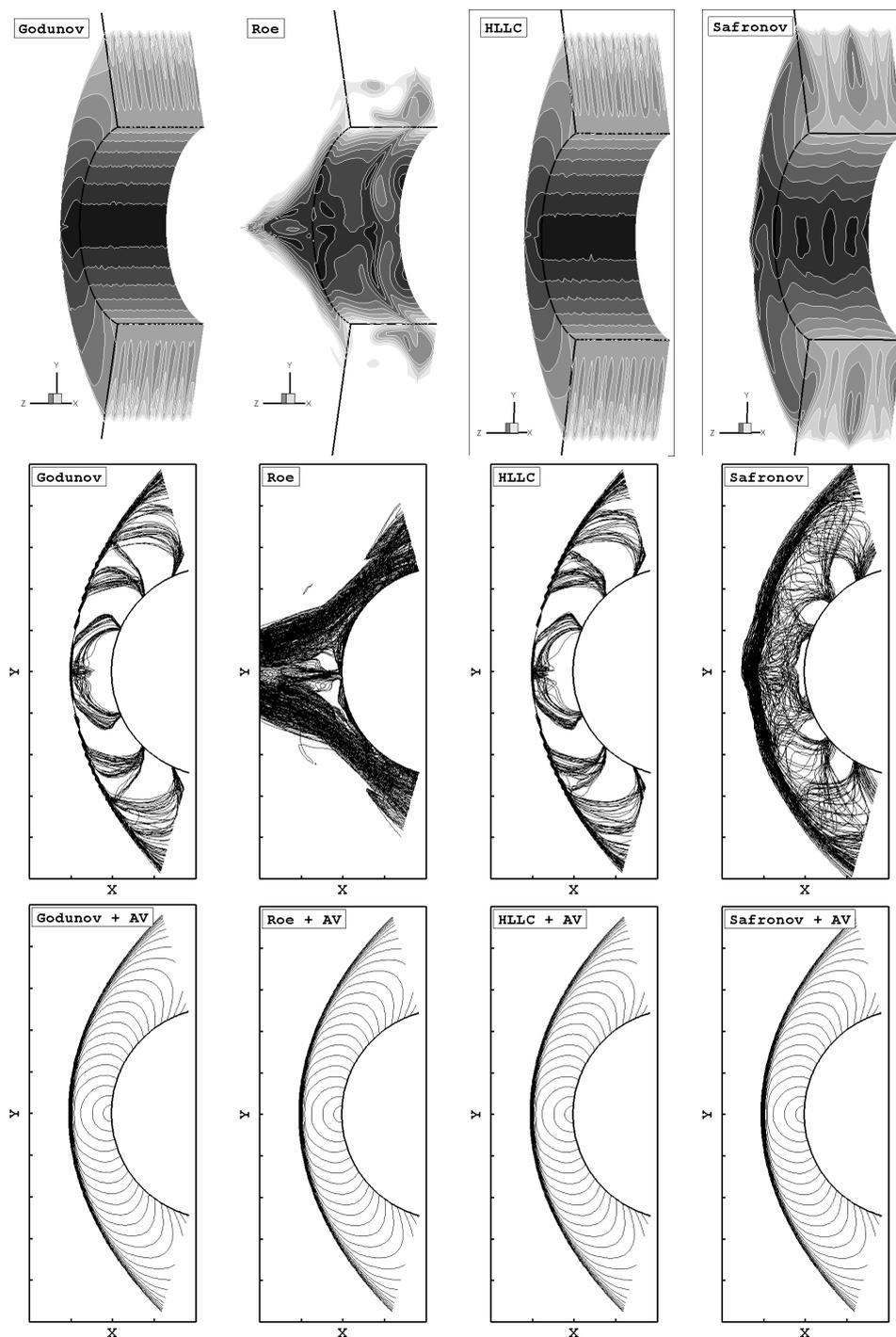


Рис. 3. Сверхзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 20$. Верхний ряд: изолинии числа Маха через 0,25 на границах расчетной области (схемы Годунова, Роу, HLLC и Сафронова); центральный ряд: изолинии числа Маха через 0,5 во всех расчетных сечениях $z = \text{const}$ (те же схемы); нижний ряд: изолинии числа Маха через 0,1 во всех расчетных сечениях $z = \text{const}$ (те же схемы с добавлением искусственной вязкости)

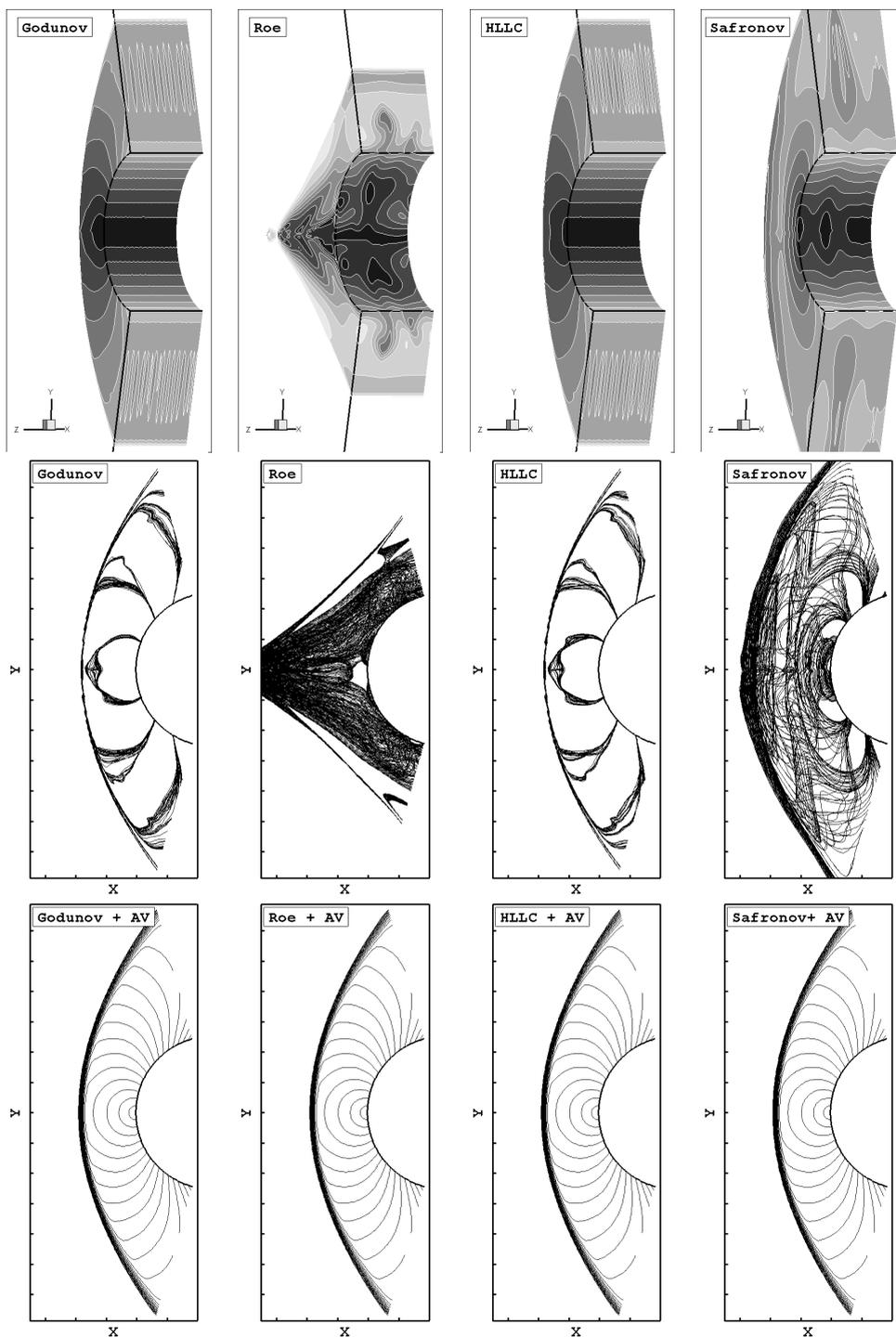


Рис. 4. Сверхзвуковое обтекание цилиндра при $M_\infty = 3$. Верхний ряд: изолинии числа Маха через 0,2 на границах расчетной области (схемы Годунова, Роу, HLLC и Сафронова); центральный ряд: изолинии числа Маха через 0,4 во всех расчетных сечениях $z = \text{const}$ (те же схемы); нижний ряд: изолинии числа Маха через 0,1 во всех расчетных сечениях $z = \text{const}$ (те же схемы с добавлением искусственной вязкости)

Нижние ряды на рис. 3 и 4 демонстрируют данные, полученные по тем же схемам, но с добавлением искусственной вязкости. Видно, что в этом случае патологическое проявление неустойчивости полностью устраняется и решения становятся двумерными; при этом все схемы демонстрируют близкие результаты.

Заключение

Новый способ подавления численной неустойчивости типа «карбункул» через добавление искусственной вязкости обобщен на случай моделирования трехмерных задач.

Как оказалось, особенности проявления карбункул-неустойчивости в трехмерном случае аналогичны тем, что наблюдались в двумерном приближении. Поэтому разработанная ранее модель искусственной вязкости была перенесена на трехмерный случай. При этом было выбрано выражение для характерного размера трехмерной ячейки и рекомендовано значение коэффициента C_{AV} для использования в расчетах трехмерных задач.

Обобщенная модель искусственной вязкости опробована на схемах первого порядка аппроксимации, таких как схемы Годунова, Роу, HLLC, AUSM+ и Сафронова, применительно к расчетам на гладких структурированных сетках. Эффективность модели продемонстрирована примерами решения известных тестовых задач.

Список литературы

1. Peery K. M., Imlay S. T. Blunt body flow simulations // AIAA Paper. 1988.
2. Quirk J. J. A contribution to the great Riemann solver debate // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 1994. Vol. 18. P. 555–574.
3. Родионов А. В., Тагирова И. Ю. Искусственная вязкость в схемах типа Годунова как метод подавления «карбункул»-неустойчивости // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 2. С. 3–11.
4. Тагирова И. Ю., Родионов А. В. Применение искусственной вязкости для борьбы с «карбункул»-неустойчивостью в схемах типа Годунова // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 10. С. 47–64.
5. Родионов А. В. Применение искусственной вязкости для борьбы с численной неустойчивостью типа «карбункул»: Препринт РФЯЦ-ВНИИЭФ № 115–2017. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2017.
6. Rodionov A. V. Artificial viscosity in Godunov-type schemes to cure the carbuncle phenomenon // J. Comput. Phys. 2017. Vol. 345. P. 308–329.
7. Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Матем. сб. 1959. Т. 47, № 3. С. 271–306.

8. Roe P. L. Approximate Riemann Solvers // J. Comput. Phys. 1981. Vol. 43. P. 357–372.
9. Toro E. F., Spruce M., Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver // Shock Waves. 1994. Vol. 4. P. 25–34.
10. Liou M.-S. A sequel to AUSM: AUSM+ // J. Comput. Phys. 1996. Vol. 129. P. 364–382.
11. Сафронов А. В. Разностный метод для уравнений газодинамики из соотношений на разрывах // Матем. моделирование. 2008. Т. 20, № 2. С. 76–84.

The Artificial Viscosity for Suppressing the «Carbuncle»-Type Numerical Instability in 3D Problem Simulations

A. V. Rodionov

Generalization of the artificial viscosity method to suppress the «Carbuncle»-type instability in the simulation of 3D problems is described. The first-order schemes (Godunov, Row, and HLLC schemes, AUSM+ and Safronov scheme) are considered as applied to the simulation of 3D problems using smooth structured grids. The efficiency of this method is demonstrated by the example of well-known test problems.

УДК 533.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_218

Использование адаптивно-встраиваемой дробной счетной сетки при численном моделировании взаимодействия воздушной ударной волны с изломом границы течения

А. Г. Иоилев, В. Ю. Колобянин,
И. А. Свиридова, А. Л. Стадник,
Ю. В. Янилкин

С помощью методики ЭГАК в двумерной плоской постановке на неподвижной четырехугольной счетной сетке с использованием алгоритмов адаптивно-встраиваемых дробных сеток проведено численное моделирование опытов по дифракции плоской воздушной ударной волны (УВ) при прохождении через угол 90° при числе Маха УВ $M_s = 1,5$ и по маховскому взаимодействию воздушной УВ с клином 46° при $M_s = 2,0$. В расчетах дифракции плоской воздушной УВ при прохождении через угол 90° получено хорошее согласие по положению проходящей и дифрагированной ударных волн, волны разрежения и ядра образовавшегося вихря как с экспериментальными результатами, так и с результатами расчетов других авторов. В расчетах взаимодействия воздушной УВ с клином 46° получено хорошее согласие по положению отраженной УВ, «ножки» Маха и тангенциального разрыва как с экспериментальными результатами, так и с результатами расчетов других авторов.

Введение

В 2018 г. в параллельной версии трехмерной методики ЭГАК [1] были реализованы алгоритмы адаптивно-встраиваемых дробных сеток, аналогичные использовавшимся ранее в последовательной двумерной версии методики ЭГАК [2]. Использование автоматического дробления счетной сетки в нужной области (адаптивно-встраиваемой счетной сетки) потенциально позволяет снизить время счета при сохранении точности. Более подробная сетка создается путем многоуровневого дробления исходной четырехугольной (в двумерном случае) или шестигранной (в трехмерном случае) сетки, называемой основной. Дробление ячеек выполняется согласно следующим принципам:

1. Способ дробления ячеек одинаковый на всех уровнях, новые (дочерние) ячейки получают отрезками, проведенными через середины сторон (в двумерном случае) или ребер (в трехмерном случае) первоначальных (материнских) более крупных ячеек. Таким образом, при дроб-

лении каждая материнская ячейка делится на четыре (в двумерном случае) или восемь (в трехмерном случае) дочерних ячеек, другие методы дробления не допускаются.

2. Число уровней должно быть не больше 5 (т. е. линейный размер минимальной ячейки может быть меньше основной в 32 раза).

3. Соседние ячейки могут отличаться не более чем на один уровень.

4. В памяти хранятся ячейки всех уровней дробления, в т. ч. и все материнские ячейки. Это позволяет каждую особенность считать на сетке своего уровня.

5. При проведении расчета на дробной сетке задается:

– тип особенности течения (контактная граница, УВ, компонент, и т. д.), в окрестности которой дробится сетка;

– максимальный уровень дробления (свой для каждой особенности);

– ширина зоны дробления.

6. Создание новых дробных ячеек в окрестности особенности и уничтожение старых производятся автоматически. При создании и уничтожении дробных ячеек из условия сохранения массы, импульса и внутренней энергии пересчитываются скорости, плотности, объемные концентрации и удельные внутренние энергии компонентов.

Верификация была проведена на двух задачах о распространении плоской воздушной УВ:

1) задача о дифракции воздушной УВ при прохождении через угол 90° [3] (рис. 1);

2) задача о маховом взаимодействии воздушной УВ с клином [4] (рис. 2).

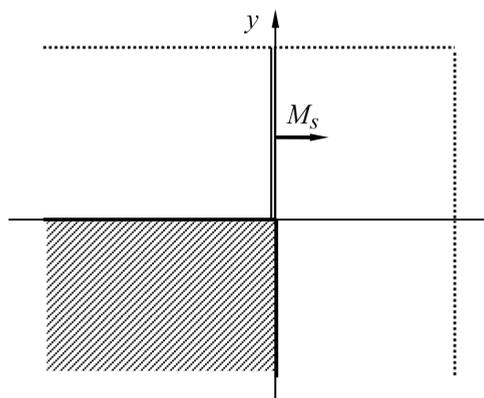


Рис. 1. Постановка задачи о дифракции УВ при прохождении через угол 90° [3]

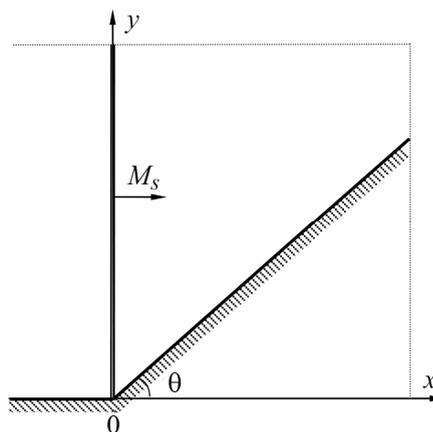


Рис. 2. Постановка задачи о маховом взаимодействии УВ с клином [4]

Обе задачи были предложены в 1990-х гг. для верификации двумерных газодинамических методик. Результаты расчетов первой задачи по 16 различным методикам опубликованы в работе [3], результаты расчетов второй задачи по 12 различным методикам – в работе [4]. Сравнение проводилось с результатами экспериментов на воздушных ударных трубах.

Расчеты проводились в плоской двумерной постановке на неподвижной эйлеровой сетке. В постановках обеих задач нет характерного размера. В расчетах за единицу длины (1 м) принималось расстояние, которое падающая УВ прошла после излома стенки (границы течения) на момент времени сравнения t^* ($t^* = t - t_0$, где t_0 – момент времени прохождения УВ излома границы течения). В задаче о прохождении УВ через угол 90° $t^* = 2$ мс, в задаче о набегании УВ на клин $t^* = 1,5$ мс.

В расчетах прохождения УВ через угол 90° фиксированная или основная счетная сетка квадратная, в расчетах набегания УВ на клин – квадратная перед клином и трапецидальная над клином. Всего проведено по пять расчетов: на фиксированной сетке с $N = 100, 200$ и 400 ячеек на единицу длины и с дроблением первого и второго уровней с основной сетки с $N = 100$. В расчетах с дроблением счетной сетки использовалось условие $P > 0,01$ МПа с одновременным выполнением условия $q > 0,05P$, где P и q – давление и счетная вязкость; ширина зоны дробления – пять ячеек.

Воздух в расчетах моделировался совершенным газом с показателем адиабаты Пуассона $\gamma = 1,4$, перед падающей УВ давление $P_0 = 0,1$ МПа и плотность $\rho_0 = 1,26$ кг/м³, скорость падающей УВ $D = 0,5$ и $0,666667$ км/с в задачах о прохождении УВ через угол 90° и о набегании УВ на клин соответственно.

На рис. 3 приведены поле давления и дробная счетная сетка первого уровня на несколько моментов времени в расчете задачи о дифракции УВ при прохождении через угол 90° , на рис. 4 – поле плотности и дробная счетная сетка первого уровня в расчете задачи о маховом взаимодействии УВ с клином $\theta = 46^\circ$. Видно, как зона дробления счетной сетки движется вместе с ударными волнами и вихревой зоной глубокого разрежения за углом 90° .

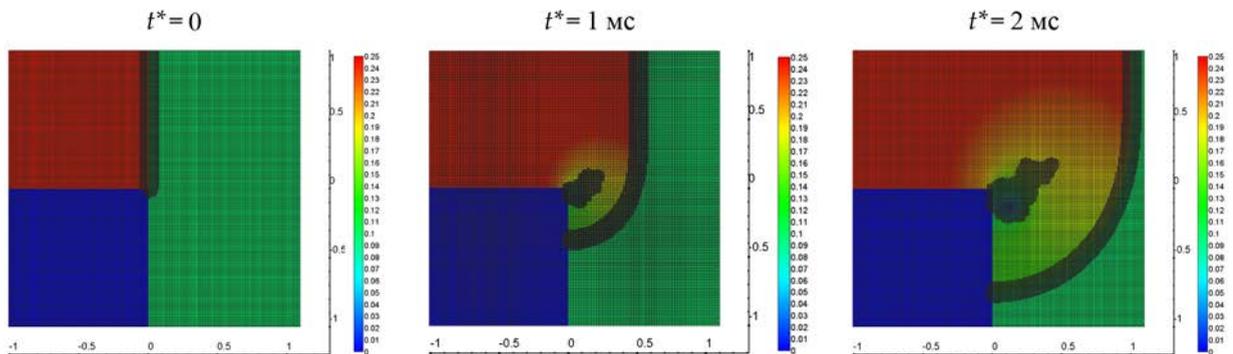


Рис. 3. Поле давления и дробная счетная сетка первого уровня в расчете задачи о дифракции УВ при прохождении через угол 90°

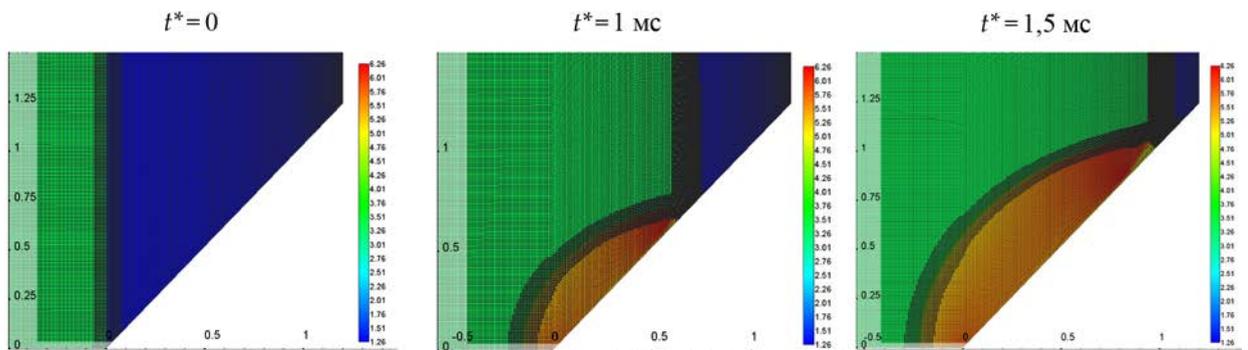
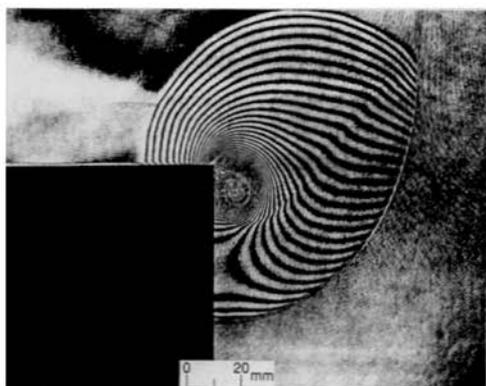
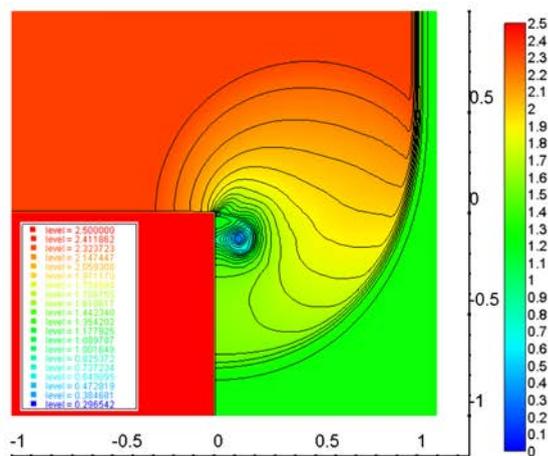


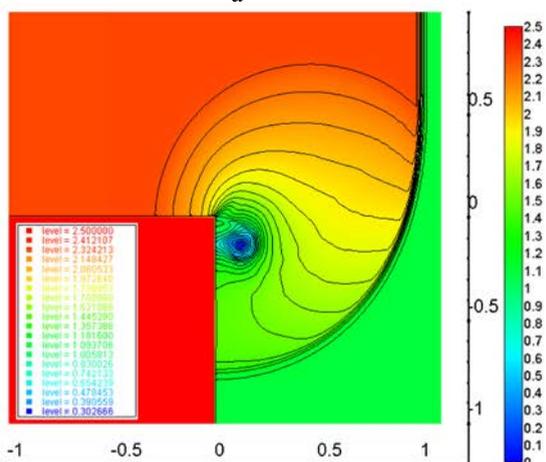
Рис. 4. Поле плотности и дробная счетная сетка первого уровня в расчете задачи о маховом взаимодействии УВ с клином $\theta = 46^\circ$



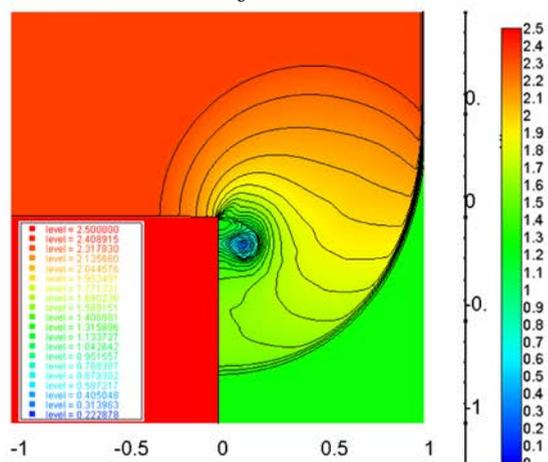
а



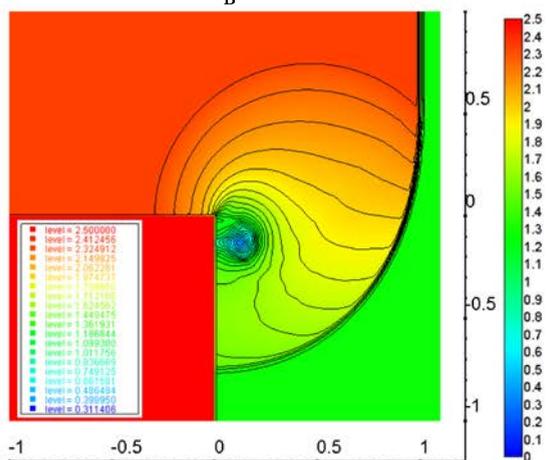
б



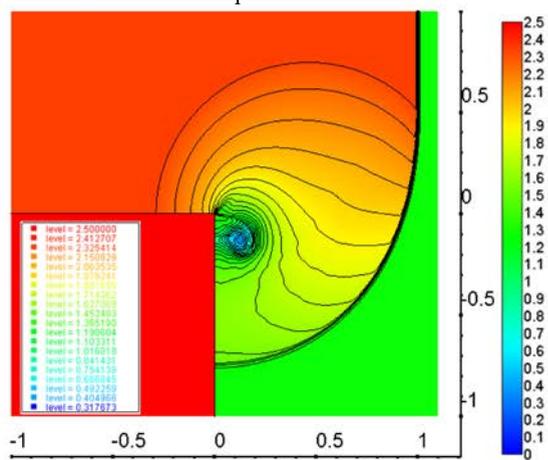
в



г



д



е

Рис. 5. Экспериментальная интерферограмма (угол 90°) [3] (а) и поля и изолинии плотности на момент времени $t^* = 2$ мс из расчетов на фиксированной счетной сетке с $N = 100$ (б), $N = 200$ (г) и $N = 400$ (е) и на дробной сетке первого (в) и второго уровней (д)

На рис. 5 приведены интерферограмма, полученная в эксперименте по прохождению УВ через угол 90° [3] (число Маха падающей УВ $M_S = 1,5$), и поля и изолинии плотности из расчетов на соответствующий момент времени $t^* = 2$ мс. Видно, что в расчетах получено хорошее согласие с результатами эксперимента не только по положению проходящей и дифрагированной УВ, волны разрежения и ядра образовавшегося вихря, но и по полю течения.

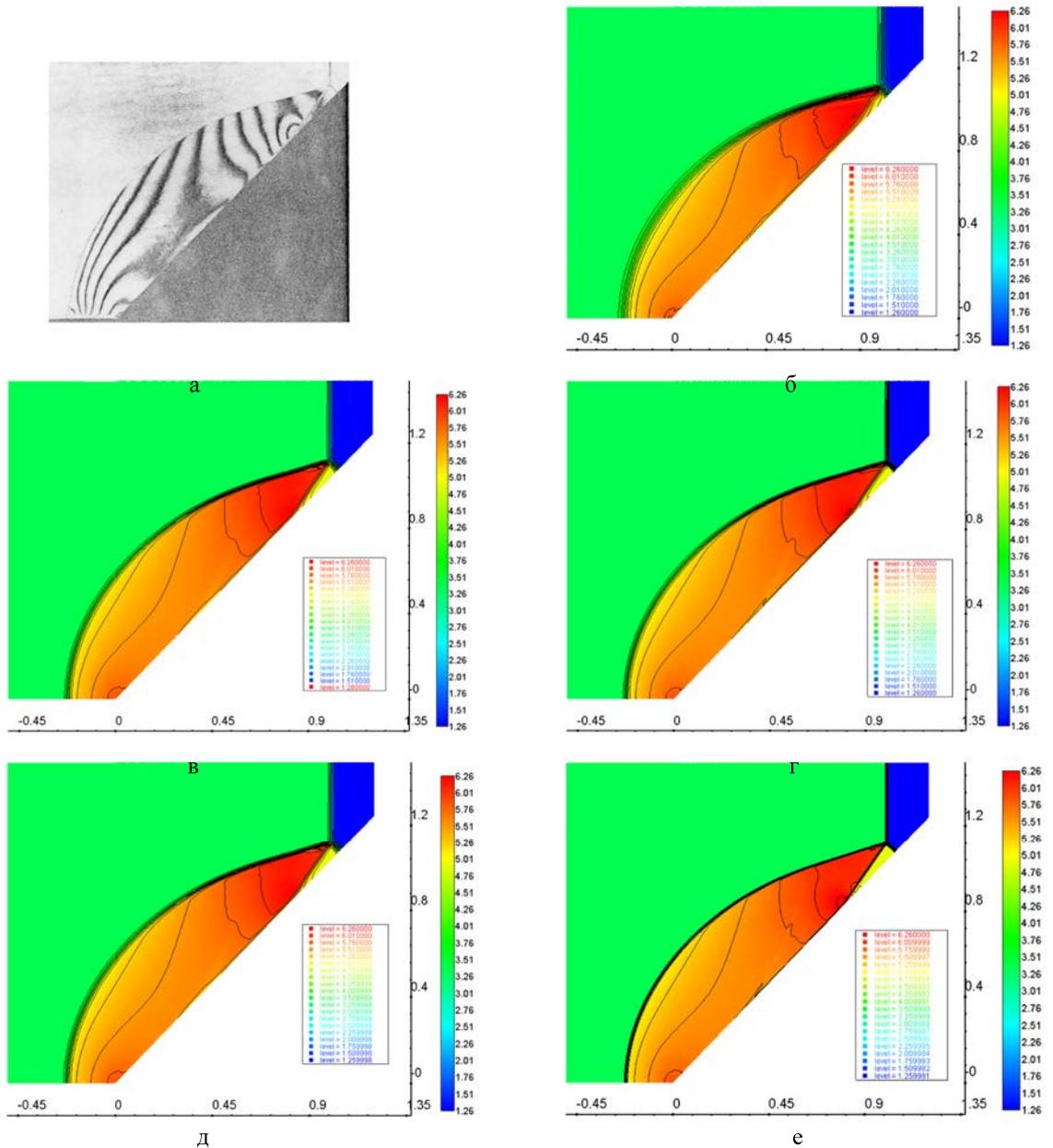


Рис. 6. Экспериментальная интерферограмма (клин $\theta = 46^\circ$) [4] (а) и поля и изолинии плотности на момент времени $t^* = 1,5$ мс из расчетов на фиксированной счетной сетке с $N = 100$ (б), $N = 200$ (г) и $N = 400$ (е) и на дробной сетке первого (в) и второго уровней (д)

На рис. 6 приведены интерферограмма, полученная в эксперименте по набеганию УВ на клин с углом $\theta = 46^\circ$ [4] (число Маха падающей УВ $M_S = 2,0$), и поля и изолинии плотности из расчетов на соответствующий момент времени $t^* = 1,5$ мс. В расчетах получено хорошее согласие с экспериментальными результатами не только по положению проходящей и отраженной УВ, «ножки» Маха и тангенциального разрыва, но и по полю течения.

Авторы благодарны И. А. Чиркиной за помощь в обработке результатов расчетов.

Список литературы

1. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А. и др. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–65.
2. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Городничев А. В. и др. Комплекс программ ЭГАК++ для моделирования на адаптивно-встраиваемой дробной счетной сетке // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 1. С. 20–28.
3. Takayama K., Inoue O. Shock wave diffraction over a 90 degree sharp corner – Posters presented at 18th ISSW // Shock Waves. 1991. Vol. 1. N 4. P. 301–312.
4. Takayama K., Jiang Z. Shock wave reflection over wedges: a benchmark test for CFD and experiments // Ibid. 1997. Vol. 7. N 4. P. 191–203.

Use of the Adaptive-Embedded Splitting Mesh in the Numerical Simulation of the Air Shock Wave Interaction with Kink of the Flow Boundary

A. G. Ioilev, V. Yu. Kolobyanin, I. A. Sviridova, A. L. Stadnik, Yu. V. Yanilkin

Numerical simulation of experiments on the planar air shock wave (SW) diffraction over a 90° sharp corner of the channel at the SW Mach number $M_s = 1.5$ and on the planar air SW irregular reflection over a 46° wedge at $M_s = 2.0$ was performed using hydrocode EGAK in 2D planar set-up at fixed quadrilateral numerical mesh with use of the adaptive-embedded cells' splitting. Results of the EGAK numerical simulations of the planar air SW diffraction over a 90° sharp corner correspond well to the reported experimental data and results of the numerical simulations in location and shape of both passing and diffracted shock waves, rarefaction wave and the vertex core. Results of the EGAK numerical simulations of the planar air SW reflection over a 46° wedge correspond well to the reported experimental data and results of the numerical simulations in location and shape of diffracted SW, the Mach stem and rarefaction wave and tangential discontinuity.

УДК 541.126

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_224

Кинетическая модель ударно-волнового инициирования детонации гетерогенных взрывчатых веществ с учетом разогрева очагов

В. Н. Князев, Р. А. Воронков, Е. Н. Богданов,
Е. В. Рычагов, А. В. Родионов

Предложена кинетическая модель детонации «ОЧАГ» конденсированного взрывчатого вещества (ВВ) на основе октогена. В модели учитывается повышение температуры локально прогретых микроскопических объемов ВВ до значений, соответствующих формированию волны стационарного горения. Численное моделирование с применением предложенной модели позволило описать результаты экспериментов по исследованию возбуждения детонации в составе на основе октогена плоскими ударными волнами (УВ) малой интенсивности.

Введение

В большинстве современных кинетических моделей детонации конденсированных ВВ полагается, что развитие реакции химического разложения происходит в форме послойного горения из сформированных на фронте УВ очагов. Однако, данные экспериментальных и теоретических исследований преддетонационных процессов в твердых ВВ при механических воздействиях невысокой интенсивности указывают на существование индукционного периода. Этот интервал времени обусловлен разогревом вещества в очаге и предшествует самоускорению реакции вследствие увеличения площади реакционной поверхности и переходу ее в детонационный режим.

В данной работе предпринята попытка учета индукционного периода с помощью новой двухстадийной кинетической модели детонации «ОЧАГ». Основные положения предложенной кинетической модели детонации сформулированы следующим образом:

1. На фронте УВ, распространяющейся по ВВ, формируются зоны локального разогрева (будем называть их горячими точками), температура в которых недостаточна для выполнения критерия Зельдовича [1] и образования волны стационарного горения. В горячих точках протекает гомогенная экзотермическая реакция в условиях теплообмена с окружающим материалом. Это положение принципиально отличает модель «ОЧАГ» от других современных кинетических моделей.

2. При выполнении критерия существования стационарной волны горения, т. е. достижения определенной температуры, горячая точка становится очагом (зародышем). Гомогенная реакция разложения сменяется гетерогенной реакцией, которая происходит в форме полойной горения из образовавшихся очагов.

В модели полагается, что на фронте УВ, в зависимости от ее интенсивности, формируются горячие точки с характерными температурой T_{spot} и радиусом r_{spot} , распределенные в объеме материала с характерным расстоянием h_{spot} между ближайшими соседями. Расчетная оценка температуры горячих точек T_{spot} , разогревающихся за счет диссипативных процессов в УВ, выполняется в предположении их равномерного распределения. На рис. 1 представлен простейший случай равномерного распределения горячих точек на плоскости.

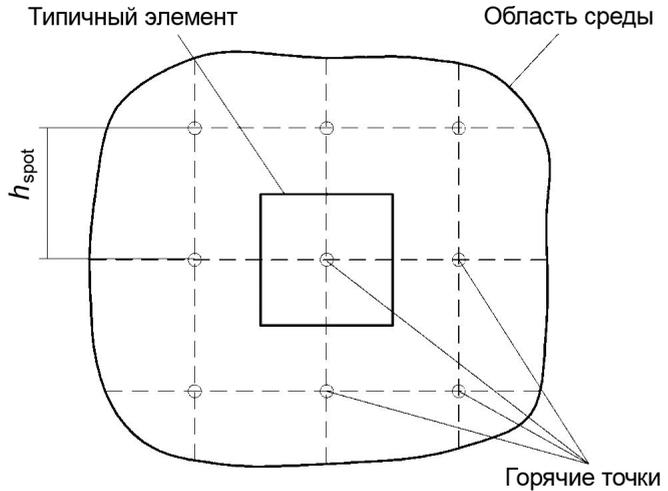


Рис. 1. Двумерная схема равномерного расположения горячих точек в материале

Характерное расстояние между горячими точками h_{spot} и их радиус r_{spot} – эмпирические функции, вид и параметры которых определены, опираясь на экспериментальные данные опытов по исследованию возбуждения детонации, представленные далее:

$$h_{spot} = \frac{a}{\left(e^{b\varepsilon_i^p} - 1 \right)}, \tag{1}$$

$$r_{spot} = ch_{spot},$$

где ε_i^p – интенсивность пластической деформации; a, b, c – константы.

Первая стадия описываемой кинетической модели детонации характеризуется разогревом горячих точек за счет работы диссипативных процессов (прочность, вязкость, схлопывание пор, и т. д.) и гомогенной экзотермической реакции разложения, протекающей в объеме горячей точки:

$$Q^+ = Q_{diss}^+ + Q_{chem}^+, \tag{2}$$

где Q_{diss}^+ – количество тепла, выделяемое в горячей точке за счет диссипативных процессов; Q_{chem}^+ – количество тепла, выделяемое в горячей точке за счет химической реакции.

При равномерном распределении горячих точек, имеющих сферическую форму, скорость выделения тепла в каждой из них за счет диссипативных процессов можно представить выражением

$$\frac{dQ_{\text{diss}}^+}{dt} = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{h_{\text{spot}}}{r_{\text{spot}}} \right)^3 \frac{dQ_{\text{diss}}^{\text{elem}}}{dt}, \quad (3)$$

где $\frac{dQ_{\text{diss}}^{\text{elem}}}{dt}$ – удельное по объему количество тепла, выделяющегося за счет диссипативных процессов в типичном элементе.

Скорость разогрева за счет гомогенной экзотермической реакции в объеме горячей точки определяется в соответствии с упрощенной формой закона действующих масс и уравнением Аррениуса

$$\frac{dQ_{\text{chem}}^+}{dt} = Q_0 \frac{d\alpha_{\text{spot}}}{dt} = Q_0 (1 - \alpha_{\text{spot}}) P A \exp\left(-\frac{E_A}{RT_{\text{spot}}}\right), \quad (4)$$

где Q_0 – удельная по объему энергия взрывчатого превращения, α_{spot} – степень превращения в горячей точке, P – давление, A – предэкспонента в уравнении Аррениуса, E_A – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная.

Кроме разогрева, в предложенной модели учитываются потери тепла в горячей точке за счет теплообмена с окружающим ее материалом. Скорость теплоотвода через поверхность горячей точки определяется с помощью эффективного коэффициента теплоотдачи и приводится к объему горячей точки V_{spot}

$$\frac{dQ^-}{dt} = \frac{\chi S_{\text{spot}} (T_{\text{spot}} - T_0)}{V_{\text{spot}}}, \quad (5)$$

где $\chi = \frac{\delta^* 2,718\lambda}{3r_{\text{spot}}}$ – эффективный коэффициент теплоотдачи, λ – коэффициент теплопроводности,

S_{spot} – площадь поверхности горячей точки, T_0 – температура среды, окружающей горячую точку.

Выражение для коэффициента теплоотдачи получено для разрабатываемой модели путем сравнительного анализа критериев зажигания Н. Н. Семенова [2] и Д. А. Франк-Каменецкого [3] с учетом критического параметра Франк-Каменецкого для сферы $\delta^* = 3,32$ [4].

Таким образом, для определения температуры T_{spot} каждой горячей точки численным образом интегрируется уравнение теплового баланса

$$c_v \rho \frac{dT_{\text{spot}}}{dt} = \frac{dQ^+}{dt} + \frac{dQ^-}{dt}, \quad (6)$$

где c_v – удельная теплоемкость при постоянном объеме, ρ – плотность, T_{spot} – текущая температура горячей точки, Q^+ – количество тепла, выделяемое в горячей точке; Q^- – количество тепла, отводимое от горячей точки в окружающий материал через ее поверхность.

В данной модели принято, что волна стационарного горения формируется в горячей точке, когда она прогревается до температуры горения ВВ (например для октогена $T_{\text{крит}} = 3000$ К).

С этого момента в модели гомогенная объемная реакция разложения сменяется гетерогенной реакцией в конденсированном ВВ, которая происходит в форме послынного горения из сформированных очагов. Эта реакция – вторая стадия в рассматриваемой модели.

В настоящее время для описания кинетики гетерогенного разложения ВВ широко применяется геометрико-вероятностный подход, заимствованный из топохимии, в котором полагается, что химическая реакция локализована на реакционной поверхности, эволюция которой обусловлена ростом и взаимодействием очагов. В предположении мгновенного образования зародышей, случайным образом распределенных по объему среды, и постоянной скорости роста очага $u = dr/dt = \text{const}$ (r – текущий радиус очага) получено уравнение Авраами–Ерофеева [5]:

$$[-\ln(1-\alpha)]^{1/n} = k(t-t_0), \quad (7)$$

где k – константа, $n=3$ – число направлений эффективного роста очага, t – время, t_0 – начальный момент времени.

Следует еще раз отметить, что расчет температуры горячих точек за счет диссипативных сил проводится в упрощающем предположении о равномерном распределении горячих точек в объеме ВВ, в то время как для моделирования процесса послынного горения используется более общее предположение о случайном распределении очагов.

В рамках предлагаемой кинетической модели уравнение Авраами–Ерофеева модифицировано и в дифференциальной форме выглядит следующим образом:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{(36\pi)^{1/3}}{h_{\text{spot}}} [-\ln(1-\alpha)]^{2/3} (1-\alpha)u. \quad (8)$$

Это уравнение в новой модели детонации «ОЧАГ» определяет скорость гетерогенного разложения. Заметим, что уравнение (8) аналогично кинетическому уравнению модели КРАКАТОА [6].

Как и во многих других кинетических моделях детонационного превращения, полагается, что линейная скорость горения является функцией только давления $u = u(P)$. Для исследуемого в настоящей работе ВВ на основе октогена, анализируя предварительные расчеты и учитывая значительный разброс результатов измерений линейной скорости горения в октогене [7, 8], в данной модели выбрана следующая зависимость скорости фронта волны горения:

$$u = \begin{cases} 50 \text{ м/с}, & \text{при } P < 10,8 \text{ ГПа}, \\ (30P - 275) \text{ м/с}, & \text{при } P \geq 10,8 \text{ ГПа}. \end{cases} \quad (9)$$

На рис. 2 представлены экспериментальные значения скорости горения и предложенная модельная зависимость уравнения (9).

Для описания деформирования среды используется простейшая модель идеального упруго-пластического тела, параметрами которой являются модуль сдвига G и предел текучести Y_d .

Для описания поведения твердой фазы ВВ и продуктов взрыва применяется широко известное уравнение состояния типа Ми–Грюнайзена JWL.

Кинетическая модель детонации «ОЧАГ» ((1)–(9)) внедрена в гидродинамический программный код.

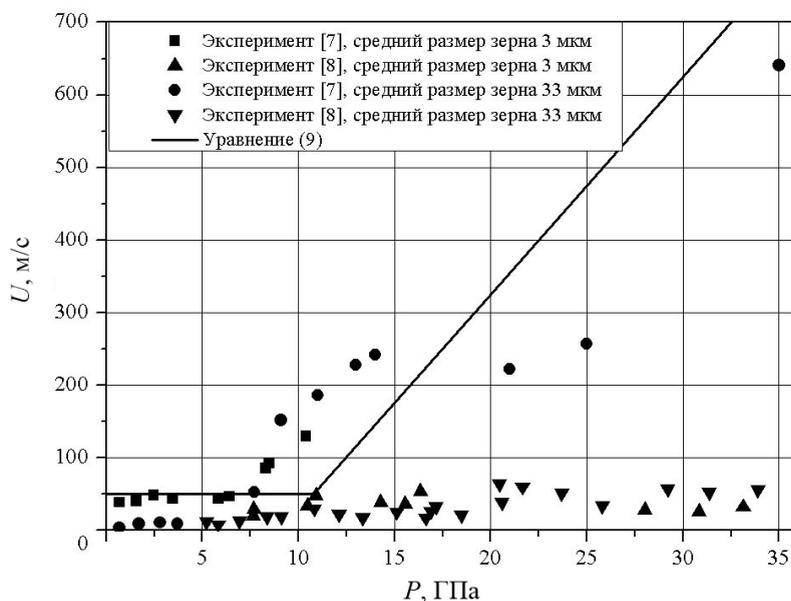


Рис. 2. Зависимость линейной скорости горения от давления

Обоснование работоспособности новой модели выполнено с использованием результатов серии экспериментов по исследованию возбуждения детонации в ВВ на основе октогена плоскими УВ малой интенсивности (рис. 3).

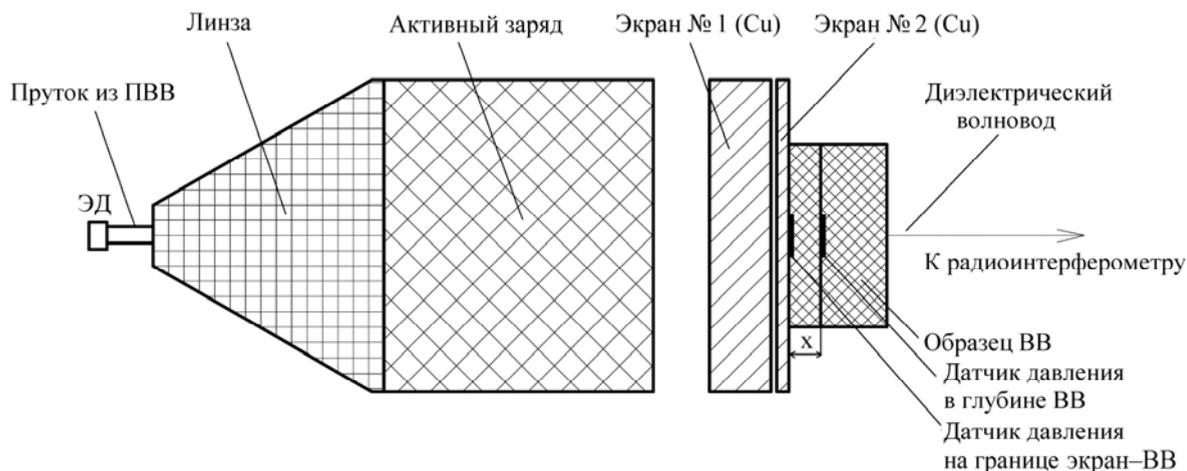


Рис. 3. Эскиз экспериментальной сборки

Для создания в образце исследуемого ВВ УВ малой интенсивности использовалось плоско-волновое нагружающее устройство разработки ИФВ. В данном устройстве УВ в экране из меди формируется при торможении продуктов взрыва активного заряда, плоская детонационная волна

в котором создается генератором с профилирующей вставкой (линзой). Важным элементом таких устройств является наличие воздушного зазора между активным зарядом и экраном. Этот зазор обеспечивает формирование в экране УВ прямоугольного профиля. Разновременность выхода ударной волны из экрана составляет 0,05–0,08 мкс в круге диаметром 80 мм. В опытах радиоинтерферометрической методикой определялись глубина и время задержки возбуждения детонации, а также с помощью манганиновых датчиков регистрировались временные зависимости давления в различных сечениях исследуемого ВВ.

С помощью модели детонации «ОЧАГ» проведено численное моделирование экспериментов в одномерном приближении по схеме, представленной на рис. 4. В качестве начального условия задавалось давление на границе медного экрана, определенное в расчете, моделировавшем работу генератора, детонацию в активном заряде ВВ и воздействие ПВ на медный экран в 2D приближении.

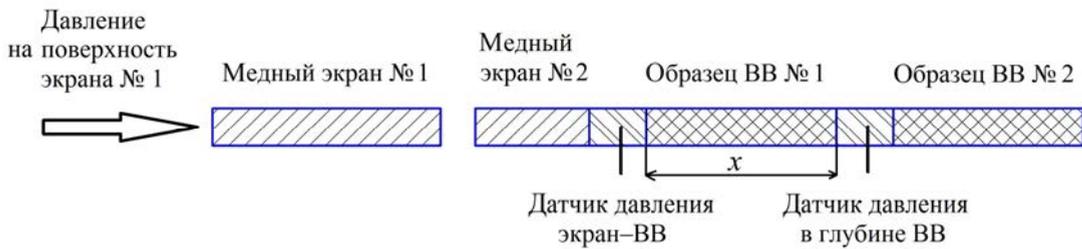


Рис. 4. Расчетная схема

На рис. 5 приведены временные зависимости давления, зарегистрированные манганиновыми датчиками, установленными на границе экран–ВВ ($x = 0$ мм) и на разной глубине в образце ВВ ($x = 6, 9, 12, 21$ мм). Там же представлены соответствующие расчетные зависимости.

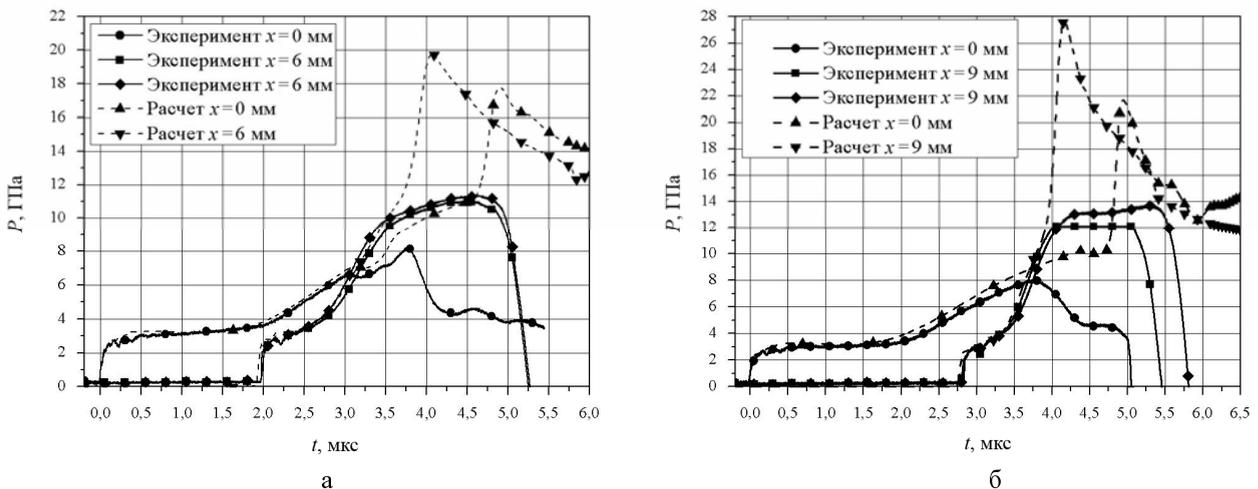


Рис. 5. Временные зависимости давления (отсчет времени – от момента входа УВ в образец ВВ): а–г – давление УВ 3 ГПа, д – давление УВ 5 ГПа, е – давление УВ 8 ГПа. Окончание рисунка на с. 230

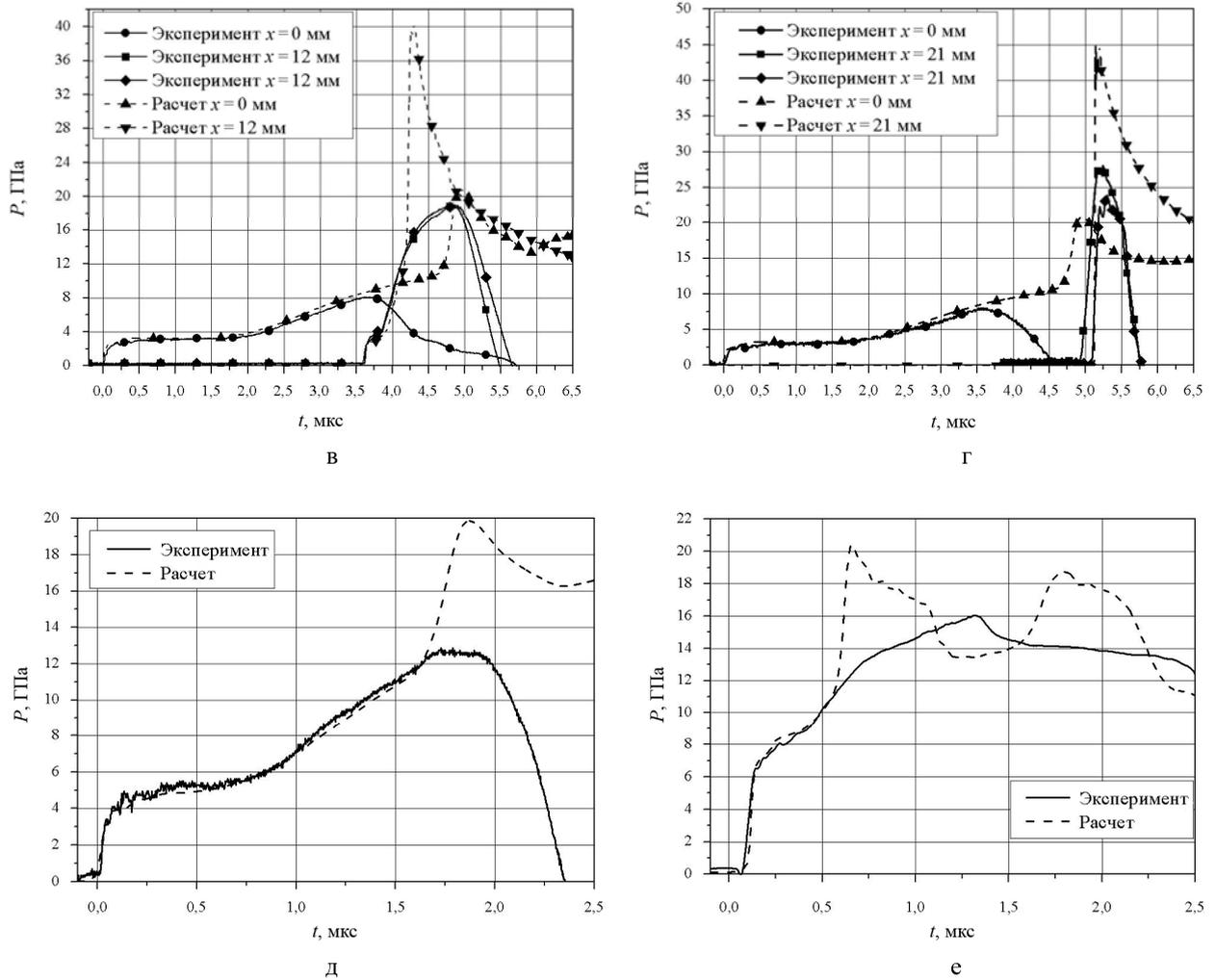


Рис. 5. Окончание

Из рис. 5 видно, что начальный участок и скорость нарастания давления в зоне интенсивного разложения у расчетных и экспериментальных кривых хорошо совпадают.

На рис. 6 представлено сравнение совокупности экспериментальных зависимостей скорости фронта инициирующей волны от времени, полученных при помощи радиоинтерферометра, с соответствующими расчетными кривыми.

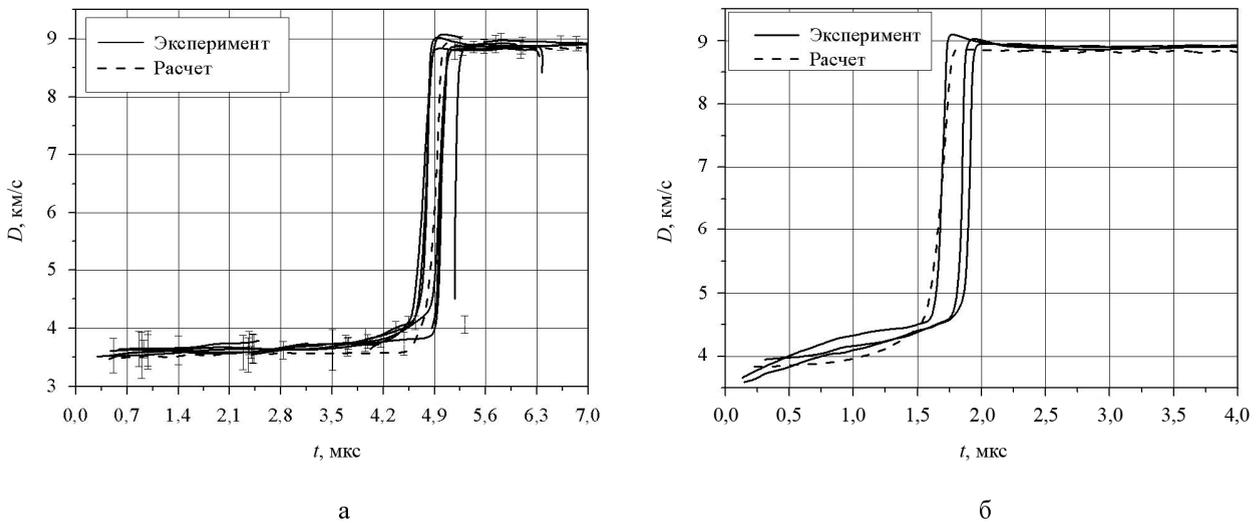


Рис. 6. Сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей скорости фронта инициирующей волны от времени (радиоинтерферометр) (отсчет времени – от момента входа УВ в образец ВВ): а – давление ударной волны 3 ГПа, б – давление ударной волны 5 ГПа

График, представленный на рис. 6, а, свидетельствует, что в экспериментах с давлением УВ 3 ГПа вошедшая в образец ВВ УВ в начальный период времени распространяется практически с постоянной скоростью. Переход к детонационному режиму сопровождается скачком скорости фронта волны. В случае амплитуды УВ 5 ГПа (см. рис. 6, б) наблюдается схожая картина. Однако, участок стационарной скорости фронта волны слабо выражен. Это связано с уменьшением времени разогрева горячих точек вследствие увеличения амплитуды входящей в ВВ УВ. Результаты численного моделирования в пределах экспериментального разброса и погрешности измерений удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Заключение

В настоящей работе предпринята попытка описания новых экспериментальных данных о возбуждении детонации в составе на основе октогена слабыми УВ посредством учета в расчетах индукционного периода с помощью двухстадийной кинетической модели детонации «ОЧАГ». На первой стадии модели рассчитывается разогрев микроскопических объемов ВВ (горячие точки) вследствие гомогенной экзотермической реакции в условиях теплообмена с окружающим материалом. При достижении определенной температуры горячая точка становится очагом, гомогенная реакция разложения сменяется гетерогенной и начинается стадия послыонного горения ВВ. Расчет разогрева горячих точек за счет объемной экзотермической реакции разложения принципиально отличает предложенную модель от прочих.

Использование этой новой модели при численном моделировании позволило корректно описать новые экспериментальные данные, полученные в рамках исследования особенностей процесса инициирования детонации в составе на основе октогена слабыми УВ.

Авторы выражают благодарность В. М. Бельскому и О. А. Тюпановой за полезные консультации и обсуждение модели.

Список литературы

1. Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А. Теория теплового распространения пламени // ЖФХ. 1938. Т. 12, № 1. С. 100–105.
2. Семенов Н. Н. К теории процессов горения // Физика. 1928. Т. 60, № 3. С. 241–250.
3. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987. С. 494.
4. Алексеев Б. В., Гришин А. М. Физическая газодинамика реагирующих сред. М.: Высшая школа, 1985. С. 464.
5. Ерофеев Б. В. Обобщенное уравнение химической кинетики и его применение к реакциям с участием твердых веществ // ДАН СССР. 1946. Т. 52. С. 515–518.
6. Damamme G. Contribution à la théorie hydrodynamique de l'onde de détonation dans les explosifs condensés // Thèse d'état présentée à l'université de Poitiers, 1987.
7. Esposito A. P., Farber D. L., Zaug J. M., Reaugh J. E. Reaction propagation rates in HMX at high pressure // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2003. 37(3). P. 83–88.
8. Zaug J. M., Yong C. E., Long G. T. et al. Deflagration rates of secondary explosives under static MPa-GPa pressure // Shock Compression of Condensed Matter. 2009. P. 420–423.

Kinetic Model of Shock-Wave Detonation Initiation of Heterogeneous He with Regard to Heating of Sites

V. N. Knyazev, R. A. Voronkov, E. N. Bogdanov, E. V. Rychagov, A. V. Rodionov

A kinetic model of detonation «OCHAG» of condensed explosive based on HMX is prosed. In the model a rise of temperature of locally heated microscopic HE explosive volumes is taken into account up to the values corresponding to wave development of stationary combustion. Numerical simulation when using a proposed model enabled the description of the results of the experiments for the study of detonation initiation in a composition on the basis of HMX by plane low-intensity shock waves.

УДК 532.517.4+519.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_234

Расчетно- экспериментальное исследование развития турбулентного перемешивания в газовой слойке при прохождении ударной волны

Е. В. Бодров, В. В. Змушко,
Н. В. Невмержицкий, А. Н. Разин,
Е. Д. Сеньковский, Е. А. Сотсков

Представлены экспериментальные данные и результаты прямого численного моделирования течения, возникающего в трубе постоянного сечения при прохождении ударной волны (УВ) через трехслойную газовую систему. Трехслойная система сформирована в результате постановки в трубе двух тонких пленок и заполнения пространства между ними газами различной плотности. Первая контактная граница (КГ) (тонкая пленка) наклонена под углом 45° к фронту УВ, вторая расположена параллельно фронту. УВ формируется на левом конце трубы и движется в сторону первой КГ с числом Маха $M = 2,4$. Выполнено сравнение результатов моделирования задачи с экспериментальной информацией.

Введение

В исследованиях по физике высоких концентраций энергии (в частности, в задачах по управляемому термоядерному синтезу и в ряде других прикладных научно-технических задач) существует проблема устойчивого сжатия слоистых систем. В процессе сжатия системы перемешивание контактирующих слоев препятствует достижению оптимальных параметров разрабатываемых устройств. Одним из наиболее перспективных направлений исследований процессов, происходящих при обжатии слоистых систем, является проведение вычислительного эксперимента. Такой подход позволяет еще на стадии проектирования нового устройства оценить правильность принимаемых решений и исключить заведомо неприемлемые решения.

Существует ряд подходов и более десятка физических моделей для расчета турбулентных течений. К широко используемым подходам можно отнести прямое численное моделирование (методы ПЧМ) с использованием уравнений Эйлера или Навье–Стокса; методы крупных вихрей

(LES методы); моделирование с применением полуэмпирических моделей турбулентности (RANS методы) и ряд других методов и их комбинаций ([1–6] и ссылки в них). Однако, используемые в них алгоритмы и математические модели далеки от совершенства. Каждый подход имеет свои достоинства и недостатки, а область их эффективного применения изучена недостаточно хорошо.

Значительную трудность для моделирования представляют задачи, в которых турбулентное перемешивание (ТП) возникает на КГ слоев разноплотных газов под действием УВ. Из проблем математического моделирования подобных течений, прежде всего, отметим отсутствие сходимости решения на фронте конечно-разностной УВ [7, 8]: при интегрировании уравнений Эйлера градиенты газодинамических величин на фронте УВ неограниченно растут при измельчении размера ячейки счетной сетки. Сходимость решения на фронте УВ важна для методик расчета ТП с использованием полуэмпирических моделей, поскольку генерационные члены уравнений ТП определяются градиентами средних газодинамических величин. Неизученной остается задача взаимодействия УВ с турбулентным потоком. При прохождении УВ по турбулентному полю однородного вещества или смеси разноплотных веществ внутренняя структура скачка может меняться [9]. Если пульсации газодинамических величин перед фронтом превышают некоторый порог, фронт скачка становится неустойчивым, деформируется под действием пульсаций давления и вихрей и, как результат, величины на фронте перестают быть разрывными.

Использование уравнений Навье–Стокса в расчетах взамен уравнений Эйлера не решает проблему взаимодействия УВ с турбулентным потоком. Внутренняя структура фронта волны при ее движении по турбулентному потоку не только определяется молекулярной вязкостью потока, но и зависит также от турбулентной вязкости и интенсивности турбулентности потока перед фронтом. При моделировании практических задач в лагранжевой постановке разностная сетка может значительно деформироваться. Если для расчета течения используются разностные схемы, обладающие значительными диссипативными и дисперсионными погрешностями, в численном решении либо появляется ложная турбулентность там, где ее не должно быть по физическому смыслу, либо газодинамические величины выглаживаются, подавляя мелкомасштабную турбулентность. В подобной ситуации обеспечить необходимую точность расчета всего поля течения в практических задачах и описать взаимодействие УВ с турбулентным потоком становится проблематичным.

Аналізу точности математического моделирования практических задач могли бы способствовать информативные экспериментальные данные о структуре течения при взаимодействии УВ с турбулентным потоком и новой информации по развитию ТП на КГ трехслойных газовых систем. Однако, на сегодняшний день в литературе наиболее широко представлены результаты исследования эволюции зоны ТП, возникающей на КГ двухслойных газовых систем при доминирующей роли неустойчивости Рихтмайера–Мешкова (см., например, работу [5]). В большинстве опытов с двухслойными системами развитие ТП происходит после прохождения УВ через КГ. В ряде опытов прошедшая через КГ УВ отражается от жесткой стенки (торца ударной трубы) и вновь проходит КГ, взаимодействуя с зоной ТП, сформировавшейся к этому моменту времени на КГ. В опытах с трехслойными системами (по сравнению с двухслойными системами) ТП развивается не только под действием падающей на КГ УВ, но и под действием волн (ударных или разрежения), циркулирующих в центральном слое, что обычно характерно для слоистых систем, используемых в задачах по получению высоких концентраций энергии. Следовательно, информация, полученная в опытах с трехслойными системами, наиболее точно отражает характер течения, формирующегося в многослойных системах под влиянием УВ.

Таким образом, сложность решаемых практических задач и нерешенные математические проблемы, присущие современным численным методикам, выдвигают на первый план задачи повышения точности вычислений и обоснования результатов математического моделирования.

Полномасштабную проверку адекватности физических и математических моделей и подходов, используемых при описании развития неустойчивости и ТП на КГ многослойных систем, можно осуществить при сопоставлении результатов вычислительного эксперимента с экспериментальными данными. В работах [5, 10] на основе аналитического решения задачи о взаимодействии УВ с наклонной КГ и анализа результатов вычислительного эксперимента сформулирована математическая постановка опытов с трехслойными системами и приведены некоторые результаты моделирования. Результаты выполненных в РФЯЦ-ВНИИЭФ экспериментов [11–13] продемонстрировали, что полученная в опытах информация является чрезвычайно полезной для тестирования численных методик, ориентированных на моделирование течений, формирующихся в газовых слоях под действием УВ.

Цель работы состоит в сравнении экспериментальных данных и результатов прямого численного моделирования опыта, в котором на первой КГ трехслойной газовой системы ТП развивается при доминирующей роли неустойчивости Кельвина–Гельмгольца, на второй КГ – под влиянием неустойчивости Рихтмайера–Мешкова. Моделирование задачи выполнено по методике МИД, являющейся дальнейшим развитием методики МИМОЗА [14].

Методика экспериментальных исследований

Эксперименты проведены на ударной трубе, составленной из камер высокого (драйвер) и низкого давления, канала и измерительной секции. Камера высокого давления и камера низкого давления разделяются мембраной, изготовленной из целлофана. В камеру высокого давления закачивается сжатый воздух до избыточного давления $\approx 2,7 \cdot 10^5$ Па. Мембрана разрушается при помощи электровзрыва наклеенной на нее нихромовой проволоочки. После разрыва мембраны по камере низкого давления распространяется стационарная УВ, которая затем проходит канал и входит в измерительную секцию.

Измерительная секция состоит из нескольких отсеков, скрепленных непрозрачными шпильками. Отсеки секции изготовлены из оптически прозрачного оргстекла. Внутреннее сечение секции (40×40) мм. Для формирования КГ в измерительной секции устанавливаются две разделительные полимерные пленки толщиной $\tau = (1-3)$ мкм, которые предотвращают взаимодиффузию газов до начала проведения опыта. Выходной торец секции соединяется с атмосферой. Объем измерительной секции между полимерными пленками (центральный слой) заполняется ксеноном, между второй полимерной пленкой и открытым концом трубы – воздухом. В камере низкого давления и канале (перед первой пленкой) находится воздух при атмосферных условиях. Контроль чистоты газов перед проведением опытов выполнен с помощью интерферометра с погрешностью ~ 3 %. Описание экспериментальной установки и принцип ее работы изложены в работе [13].

В экспериментах специальные начальные возмущения на КГ не задавались, ими служили кусочки разрушающейся под действием проходящей УВ пленки. Их характерный размер зависит от свойств пленки и по оценкам изменяется от 0,1 до 2 мм. Регистрация течения производилась многокадровой кинокамерой СФР-7 или двухкадровой видеокамерой ССD шпирен-методом через теньевую установку ИАБ-451. При регистрации течения видеокамерой ССD для подсветки исполь-

зовался двухимпульсный лазер с длительностью импульса 7 нс, длиной волны 532 нм. При этом в каждом опыте получалось два видеокadra на определенные (заданные) моменты времени. При регистрации течения кинокамерой СФР-7 для подсветки использовалась лампа ИФК-120 (длительность светового импульса ≈ 3 мс), экспозиция кинокадра составляла ≈ 2 мкс.

На стенки измерительной секции наносились тонкие реперные линии, расположенные вдоль и поперек ударной трубы на некотором расстоянии друг от друга. Реперные линии предназначены для определения пространственного положения характерных особенностей течения, зафиксированных на фотокадрах. По положению реперных линий осуществлялась «привязка» результатов численного расчета к экспериментальной информации.

Выполнено несколько опытов в одной и той же постановке. При сравнении полученной в различных опытах картины течения выявлено, что они отличаются друг друга некоторыми деталями, что и должно быть, поскольку турбулентность – статистический процесс. Поэтому при тестировании численных методик данные представленных экспериментов следует считать ориентировочными. Отметим, что на всех экспериментальных фотокадрах течение (пограничный слой) не просматривается вблизи стенок измерительной секции из-за низкой оптической прозрачности ее стыков.

Ключевые моменты численного метода

Математическое моделирование задачи выполняется с использованием уравнений Эйлера без привлечения каких-либо моделей учета ТП (прямое численное моделирование). Расчетная методика основана на лагранжево-эйлеровом подходе при решении уравнений газовой динамики, выделении веществ концентрациями [15, 16]. Такой подход является эффективным при моделировании задач механики сплошной среды с большими деформациями.

Расчет счетного шага состоит из двух этапов: на первом выполняется интегрирование уравнений газовой динамики в лагранжевых координатах, на втором производится пересчет полученных сеточных значений на первоначальную прямоугольную сетку [16]. Пересчет величин осуществляется при помощи алгоритма, основанного на расщеплении по координатным направлениям и использовании одномерного алгоритма повышенного порядка точности.

На лагранжевом этапе расчета границы ячеек сетки перемещаются со скоростью вещества, массы ячеек не изменяются. Интегрирование системы уравнений выполняется на разнесенной разностной сетке. Термодинамические параметры задачи относятся к центру счетной ячейки, координаты и компоненты скорости – к узлам. Используется полностью консервативная разностная схема «предиктор–корректор», аналогичная схеме в работе [17]. С целью предотвращения размытия КГ между веществами применяется алгоритм их выделения с помощью концентраций. Для подавления паразитических осцилляций численного решения в окрестности больших градиентов газодинамических величин вводится искусственная вязкость, являющаяся суммой квадратичной и линейной вязкостей. В смешанных ячейках (ячейках, содержащих несколько веществ) давление вычисляется покомпонентно, а затем усредняется с учетом объемных концентраций веществ.

Постановка расчета и результаты моделирования

Схема математической постановки задачи приведена на рис. 1. Труба заполнена разноплотными газами, которые находятся в состоянии покоя при атмосферном давлении и разделяются двумя тонкими пленками (КГ). Первая контактная граница (КГ1) наклонена под углом 45° к фронту УВ, вторая (КГ2) – расположена параллельно фронту. Центральный слой системы заполняется «тяжелым» газом (ксеноном – Xe), перед первой и за второй контактными границами располагается воздух (air). УВ формируется на левом конце трубы и движется в сторону первой КГ. Число Маха УВ $M \approx 2,4$. Геометрия задачи плоская. Правая граница – вытекающий в атмосферу поток. Граничные условия на стенках трубы – скольжение потока. Уравнение состояния газов – «идеальный газ».

Начальные параметры воздуха: $\rho = 0,00125 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$ – плотность, $\gamma = 1,4$ – показатель адиабаты, $P = 1,01325 \text{ г} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{мс}^{-2}$ – давление, $E = 2026,5 \text{ см}^2 \cdot \text{мс}^{-2}$ – удельная внутренняя энергия, $c = 33,7 \text{ см} \cdot \text{мс}^{-1}$ – скорость звука. Начальные параметры ксенона: $\rho_2 = 0,0055 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$, $\gamma = 1,667$, $P = 1,01325 \text{ г} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{мс}^{-2}$, $E = 276,2 \text{ см}^2 \cdot \text{мс}^{-2}$, $c = 17,52 \text{ см} \cdot \text{мс}^{-1}$. Параметры сжатого воздуха за фронтом УВ: $P_2 = 6,64 \text{ г} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{мс}^{-2}$, $\rho_2 = 0,004015 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$, $u_2 = 55,7 \text{ см} \cdot \text{мс}^{-1}$.

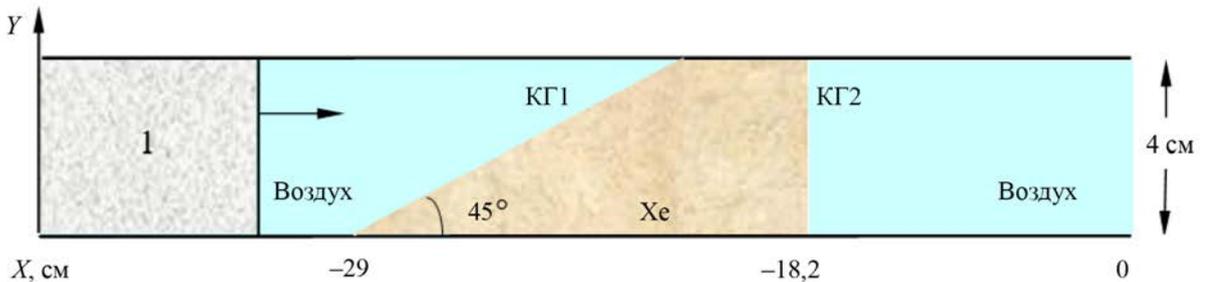
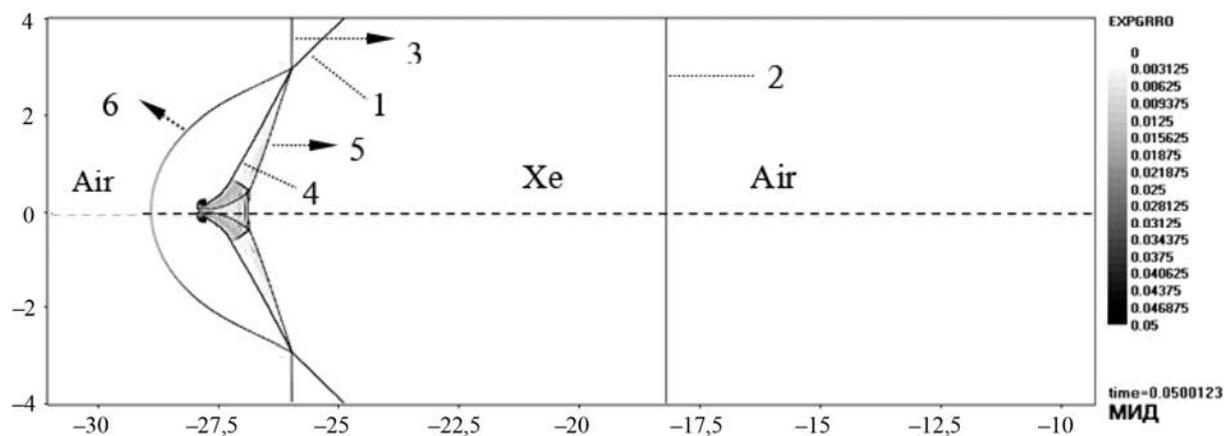


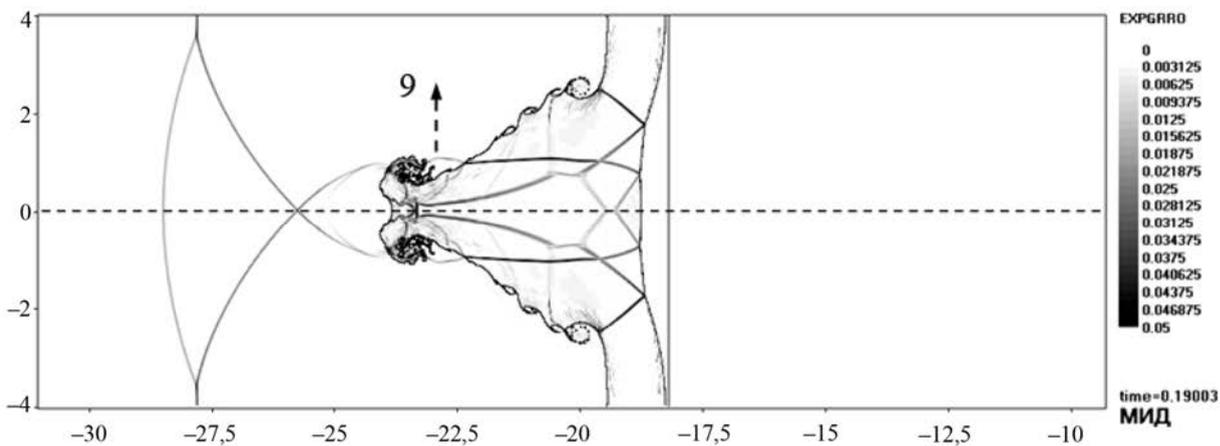
Рис. 1. Схема постановки расчета: 1 – воздух за УВ

Моделирование задачи выполнено на сетках с различным числом точек: 1N, 2N, 3N, 4N. Наибольшее число точек (22×10^6) содержала сетка 4N. Расчет начинается при $t = 0$, когда УВ находится на расстоянии $X = 0,6 \text{ см}$ от точки пересечения КГ1 с нижней стенкой трубы.

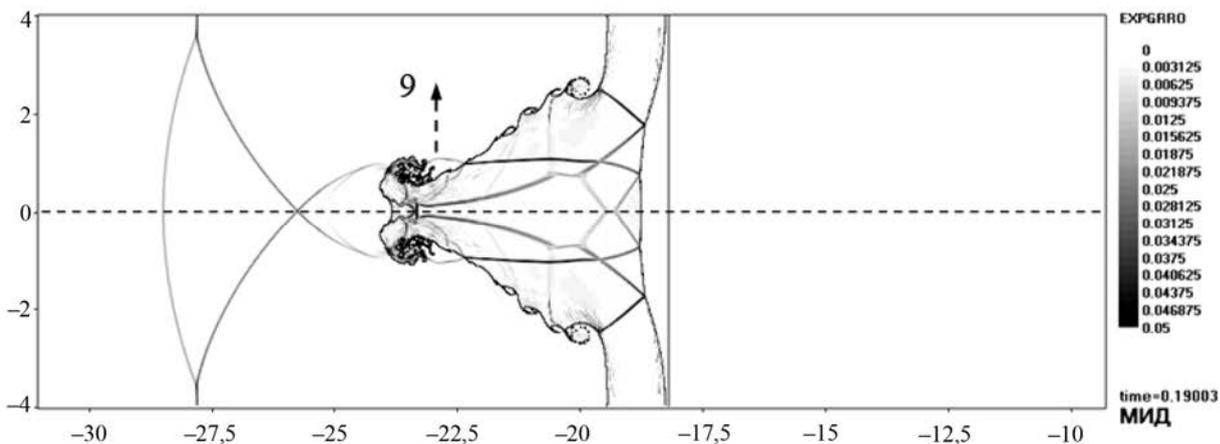
Для визуализации течения использовалась функция $F = \exp(\nabla \rho)$. Картина течения, полученная в численном расчете на ряд моментов времени, показана на рис. 2. На графике пунктирной линией отмечено положение нижней стенки трубы. Ниже пунктирной линии приводится зеркальное отражение области решения задачи. Характерные особенности течения, формирующегося на момент времени $t \approx 0,05$ при взаимодействии УВ с КГ1, можно наблюдать на рис. 2, а.



а



б



в

Рис. 2. Визуализация течения с помощью функции F : а – $t = 0,05$ мс; б – $t = 0,1$ мс; в – $t = 0,19$ мс; г – $t = 0,21$ мс; д – $t = 0,3$ мс; е – $t = 0,35$ мс. На графике используются обозначения: 1 – невозмущенная часть КГ1, 2 – положение КГ2, 3 – падающая (основная) УВ, 4 – возмущенная часть КГ1, 5 – прошедшая через КГ УВ, 6 – отраженная от КГ1 УВ. Окончание рисунка на с. 240

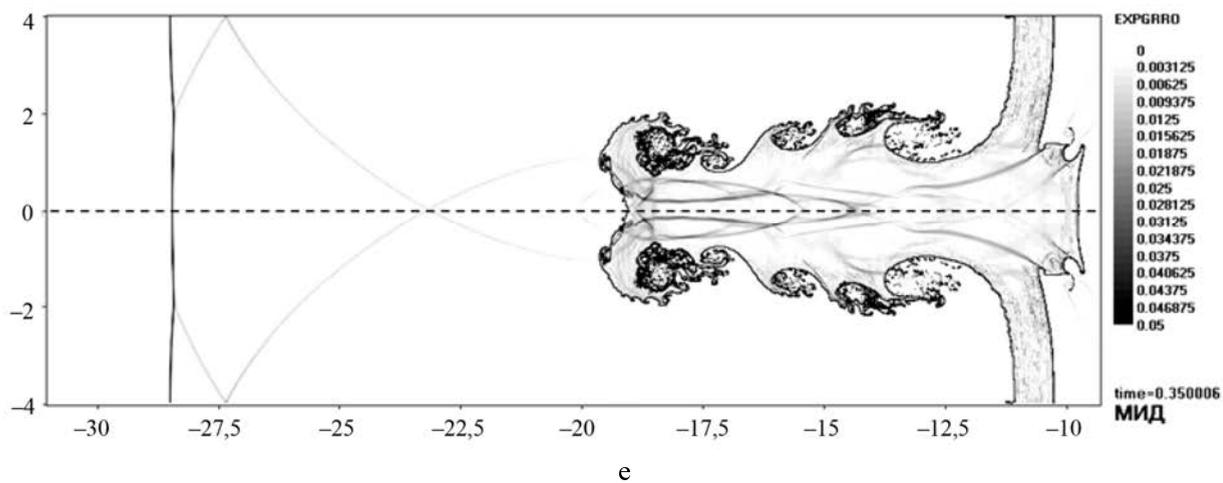
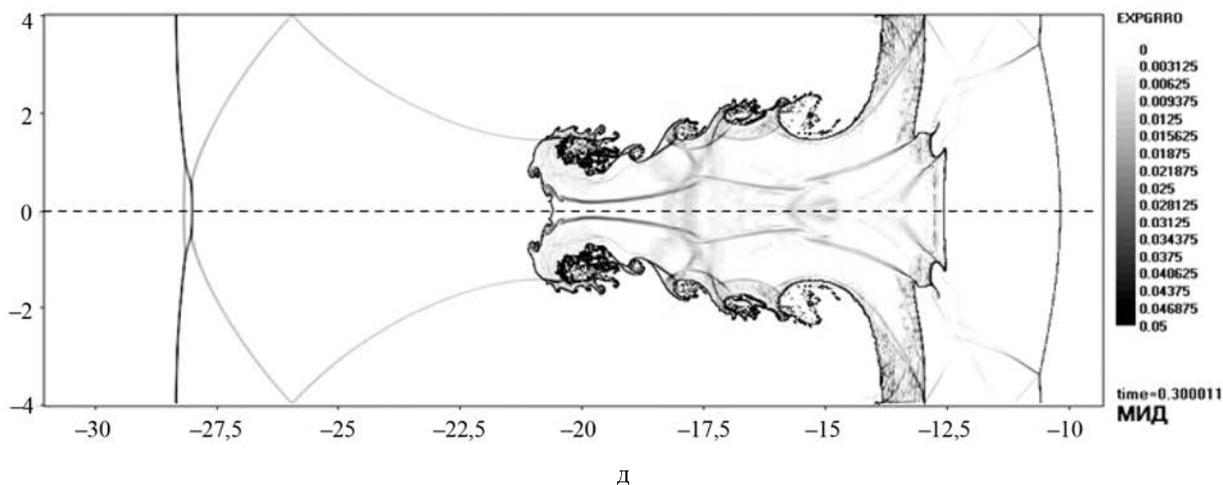
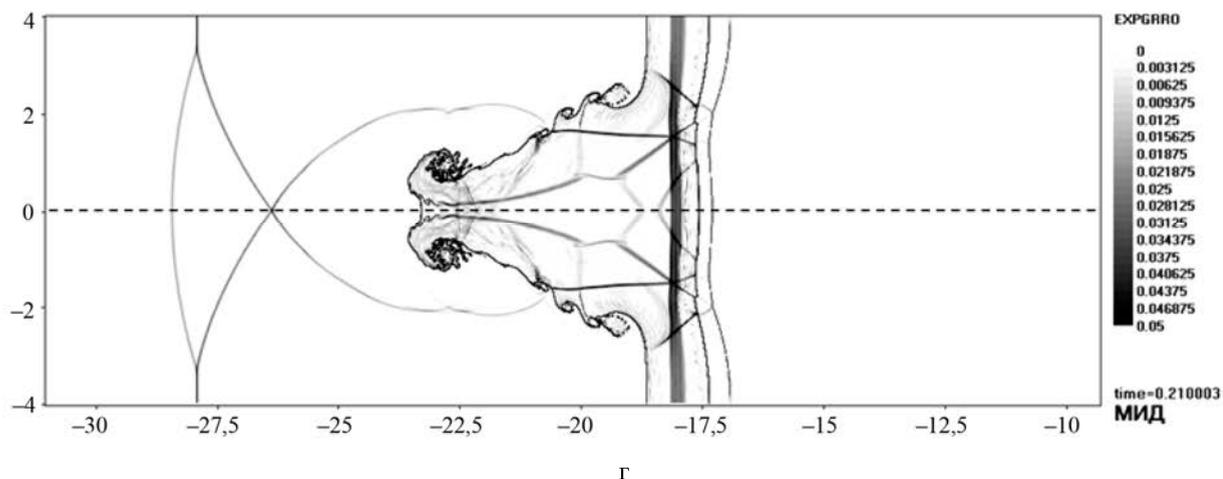


Рис. 2. Окончание

В зависимости от параметров задачи процесс взаимодействия основной УВ с КГ1 может быть регулярным (все волны пересекаются в одной точке на КГ – узле) или нерегулярным. Чтобы определить, какой тип взаимодействия реализуется в нашей задаче, решалась система уравнений из работы [5]. При получении системы уравнений использовалась связь между величинами перед и за фронтом УВ (условия Гюгонио). Кроме того, учитывалось, что слева и справа от КГ непрерывны давление и нормальная компонента скорости. Представленная в работе [5] система после ряда преобразований сводится к уравнению относительно Z_2

$$f(Z_2) = \frac{H_2}{H_6} \sqrt{\frac{H_5}{H_7}} + \operatorname{tg}(b_0) \frac{H_2}{H_6} \frac{H_8}{H_1} \sqrt{\frac{H_4}{H_3} \frac{H_5}{H_7}} - \operatorname{tg}(b_0) + \frac{H_8}{H_1} \sqrt{\frac{H_4}{H_3}} = 0,$$

где $H_1 = a_1 Z_1 - Z_2$, $H_2 = Z_2 - 1$, $H_3 = c_1 Z_1 + Z_2$, $H_4 = d_1 Z_1 - Z_2$, $H_5 = d_2 - Z_2$, $H_6 = a_2 - Z_2$,

$H_7 = c_2 + Z_2$, $H_8 = Z_2 - Z_1$, $a_1 = 1 + \gamma_0 M_1^2$, $a_2 = 1 + \gamma_z M_z^2$, $d_1 = \frac{2\gamma_0}{\gamma_0 + 1} M_1^2 - c_1$, $c_1 = \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0 + 1}$,

$c_2 = \frac{\gamma_z - 1}{\gamma_z + 1}$, $d_2 = \frac{2\gamma_z}{\gamma_z + 1} M_z^2 - c_2$, $Z_1 = \frac{P_1}{P_0} = 1 + \frac{2\gamma_0}{\gamma_0 + 1} (M^2 - 1)$, $Z_2 = \frac{P_2}{P_0}$, $M_0 = \frac{M}{\sin \alpha}$, $M_z = \frac{M}{\sin \alpha} \sqrt{\frac{\gamma_0 \rho_z}{\gamma_z \rho_0}}$,

M – число Маха падающей на наклонную КГ УВ; M_1 – число Маха за фронтом падающего скачка; α – угол между фронтом УВ и КГ, P_2 – давление за фронтом отраженной УВ; P_1 – давление за фронтом падающей УВ; P_0 – давление в ксеноне; ρ_0, ρ_z – плотности воздуха и ксенона; γ_0, γ_z – показатели адиабаты воздуха и ксенона; b_0 – угол разворота потока в падающей УВ. Детальная информация по анализу взаимодействия УВ с наклонной КГ приведена в работе [5].

В результате решения уравнения установлено, что при заданных параметрах задачи регулярное взаимодействие УВ с КГ1 происходит при углах наклона КГ1 $\alpha < 51,4$ (в нашей задаче $\alpha = 45^\circ$). При регулярном взаимодействии в окрестности узловой точки все фронты являются прямолинейными, что позволяет выписать точное решение задачи. На рис. 3 расчетные профили давления и плотности вдоль линии $y \approx 3,1$ сопоставляются с точными значениями, полученными при решении уравнения. Как следует из графика на рисунке, решения на сетках 2N, 3N удовлетворительно согласуются между собой и с точным решением.

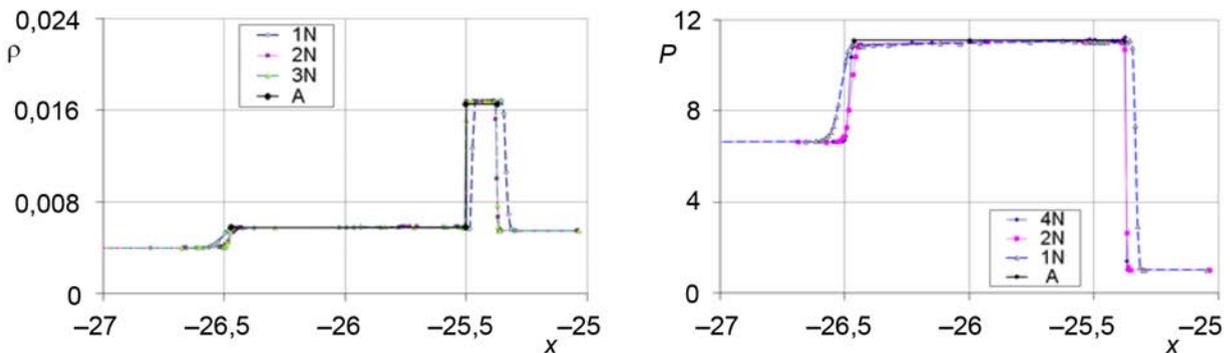


Рис. 3. Сравнение численного решения с точным (А): профили плотности (слева) и давления (справа); $y = 3,1$; $t = 0,06$ мс

После окончания взаимодействия УВ с КГ1 ($t \approx 0,063$) основная УВ распространяется по ксенону (см. рис. 2, б) в направлении КГ2, а волна 6 отражается от верхней стенки трубы и движется в направлении нижней стенки (волна 7 на рис. 2). В результате взаимодействия прошедшей через наклонную КГ УВ (5 на рис. 2, а) с нижней стенкой трубы образуется прямая маховская конфигурация, состоящая из ножки Маха (8 на рис. 2, б), тангенциального разрыва и скачка. Поскольку касательные скорости слева и справа от КГ1 различны, на КГ развивается неустойчивость Кельвина–Гельмгольца. Первый вихрь на КГ образуется в окрестности нижней стенки трубы (см. рис. 2, а). После отражения падающей УВ от верхней стенки трубы в верхней части наклонной КГ1 формируется второй вихрь (см. рис. 2, б), который движется вдоль КГ в направлении нижней стенки трубы (сравни рис. 2, б и 2, в). Впоследствии между первым и вторым вихрями на КГ1 формируются новые (см. рис. 2, в).

В момент времени $t \approx 0,19$ основная УВ выходит на КГ2 (см. рис. 2, в), а волна 7, отразившись от нижней стенки трубы, движется вверх (волна 9 на рис. 2) и взаимодействует с первым вихрем. На графике рис. 4 на четыре момента времени приведены профили давления вдоль линии $x = -23,5$, проходящей через центр вихря. Согласно данным рисунка, при $t \approx 0,175$ фронт скачка отстоит от нижней стенки на расстоянии $y \approx 0,4$, а при $t \approx 0,18$ – на расстоянии $y \approx 0,56$, т. е. еще не достиг ядра вихря. При взаимодействии скачка 9 с вихрем ($t \approx 0,185$) фронт скачка разрушается (газодинамические величины перестают быть разрывными), а после прохождения вихря ($t \approx 0,19$) начинает восстанавливаться.

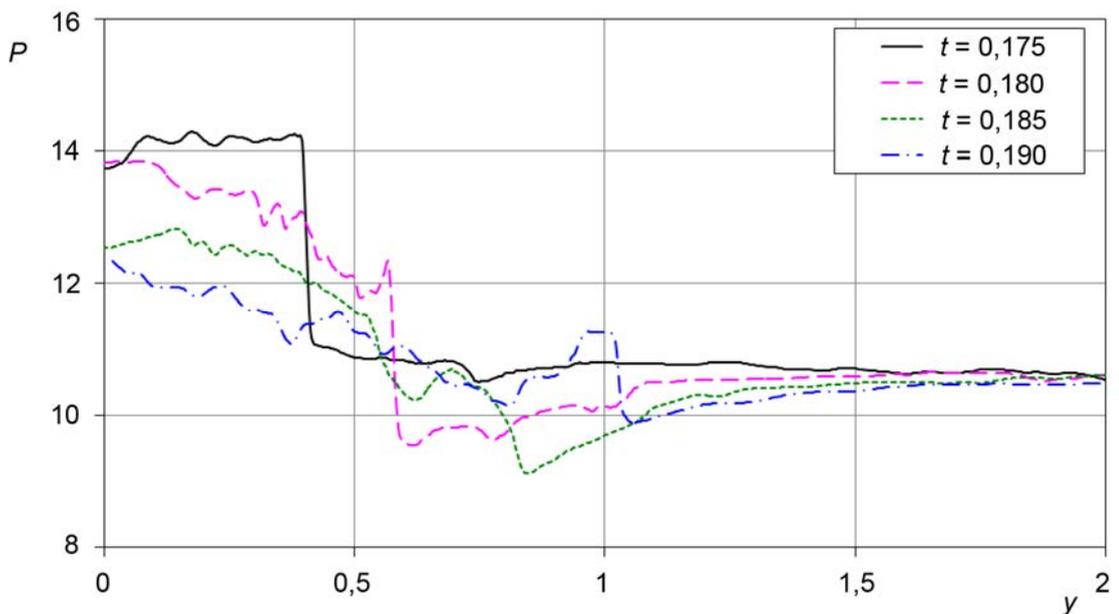


Рис. 4. Профили давления на четыре момента времени вдоль линии $x = -23,5$

На рис. 2, г показана картина течения на момент времени $t \approx 0,21$, когда после взаимодействия основной УВ с КГ2 в воздух распространяется УВ, а по ксенону – волна разрежения. По профилям плотности, приведенным на рис. 5 на три момента времени вдоль линии $y = 3,5$, заключаем, что при $t \approx 0,19$ ширина ксенона составляет $\Delta X \approx 1,24$ см, на момент $t \approx 0,35$ – $\Delta X \approx 0,82$ см. Интенсивность волны разрежения в ксеноне можно оценить по профилю плотности для $t \approx 0,21$.

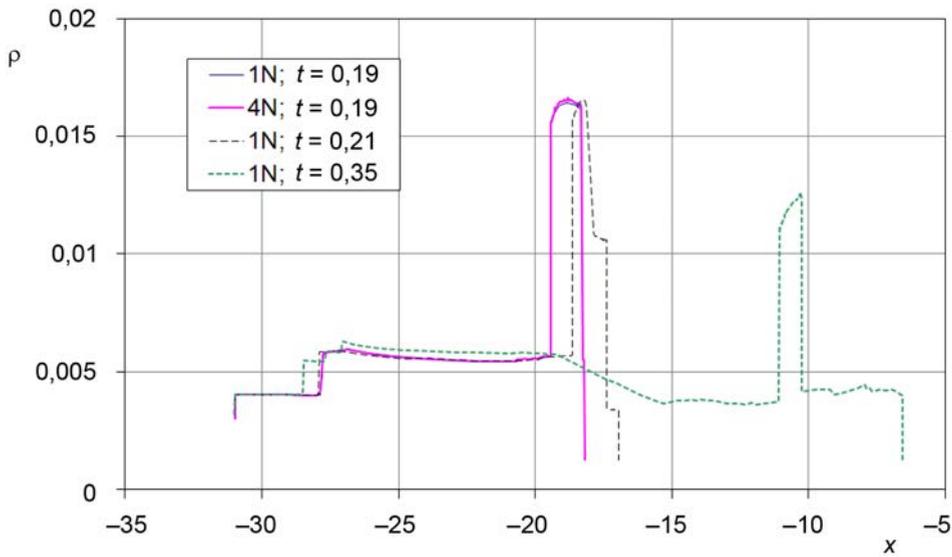


Рис. 5. Профили плотности вдоль линии $y = 3,5$

На рис. 6 приведены линии уровня модуля ротора скорости на момент времени $t \approx 0,24$. Согласно данным, приведенным на рисунке, максимальные значения модуль ротора скорости принимает внутри вихревых образований на КГ1. Завихренность потока также значительна на скачках и тангенциальных разрывах.

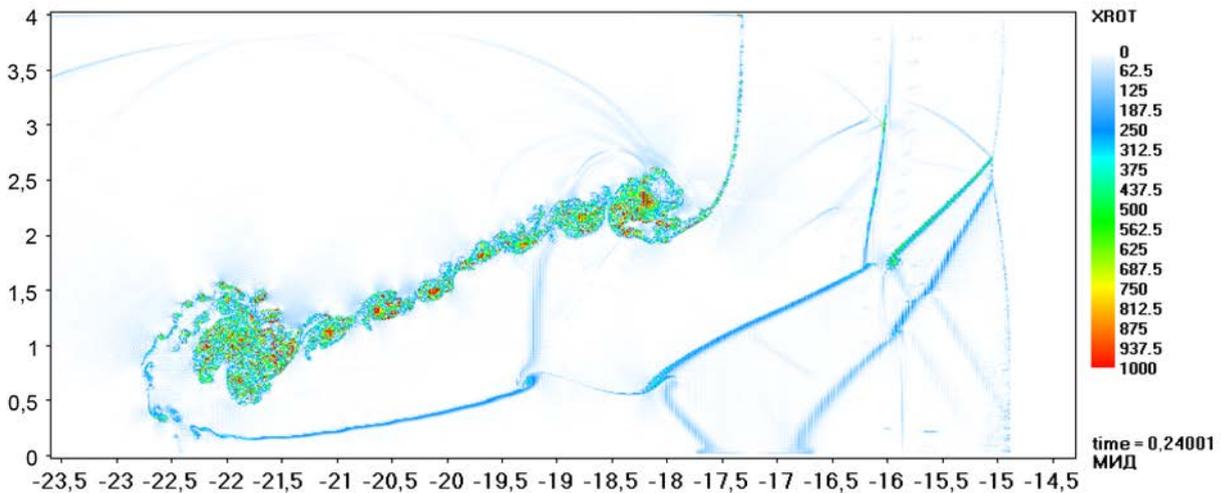


Рис. 6. Модуль ротора скорости; $t = 0,24$ мс

На рис. 2, *d* и *e* показаны мгновенные поля течений на моменты времени $t \approx 0,3$ и $0,35$, когда КГ2 прошла расстояние $\Delta X \approx 5,7$ см и $\Delta X \approx 8,4$ см, соответственно. На КГ1 наблюдается ряд устойчивых когерентных вихрей. Сложный вид КГ2 в значительной степени сформировался под действием скачков и поверхностей тангенциального разрыва.

Сравнение экспериментальной картины поля течения с данными численного моделирования приведено на рис. 7 на два момента времени. Рис. 7, *a* соответствует времени $t \approx 0,27$, когда

КГ₂ прошла расстояние $\Delta X \approx 4$ см. Рис. 7, б соответствует времени $t \approx 0,345$, когда КГ₂ прошла расстояние $\Delta X \approx 8$ см. Расчетное положение основной УВ и форма КГ₂ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

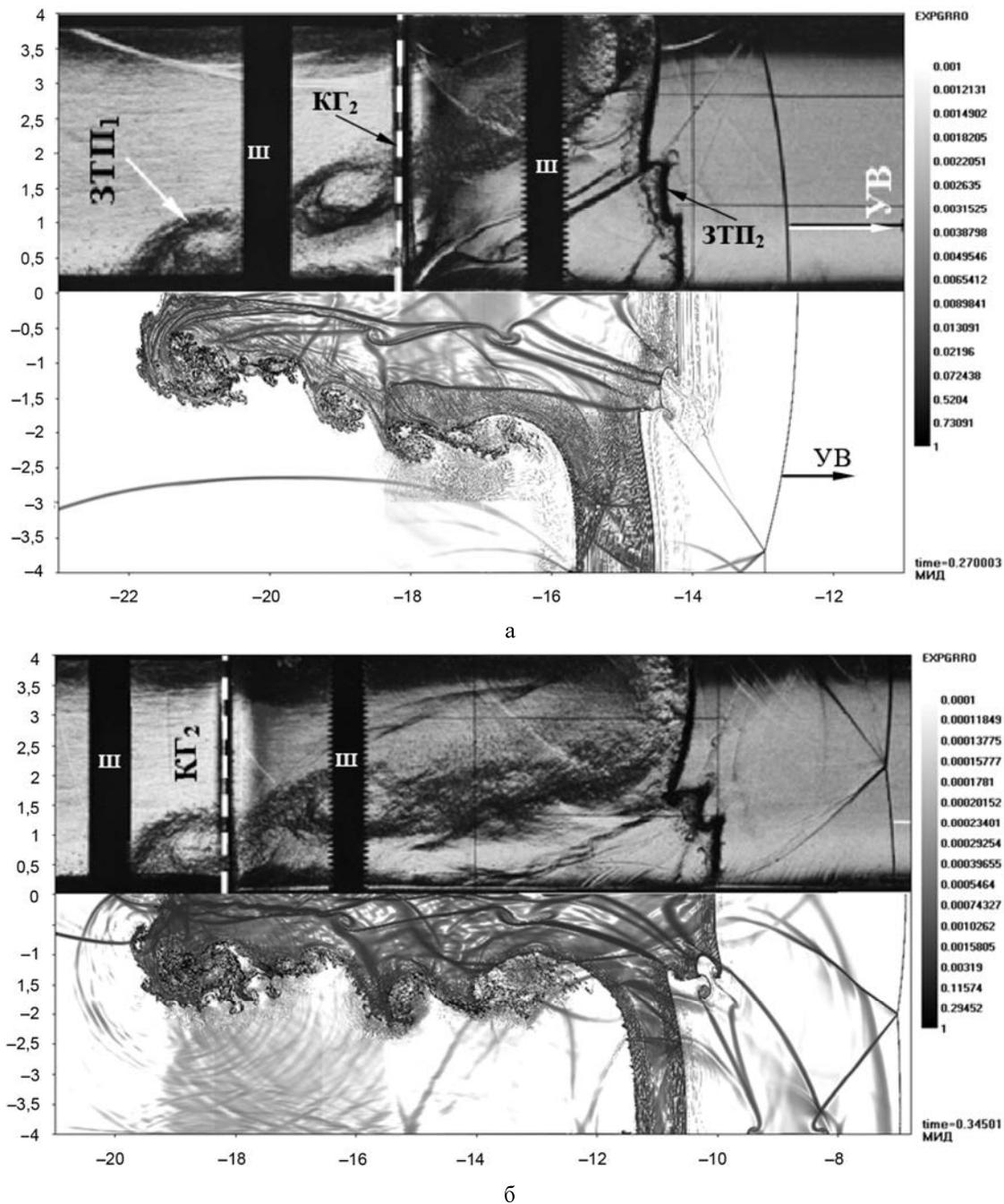


Рис. 7. Поле течения в эксперименте (верхняя половина) и в расчете (нижняя половина – зеркальное отражение области расчета): а – $t = 0,27$ мс; б – $t = 0,345$ мс; на экспериментальных кадрах: Ш – шпилька крепления, КГ₂ – начальное положение прямой контактной границы (КГ₂), ЗТП₁, ЗТП₂ – зоны турбулентного перемешивания на КГ₁ и КГ₂

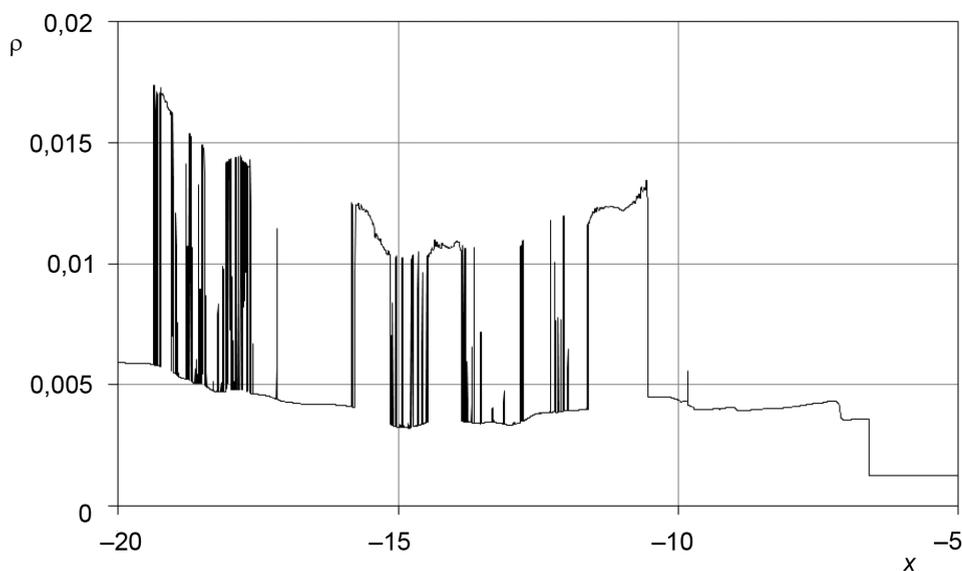


Рис. 8. Профиль плотности вдоль линии $y = 1,5$; $t = 0,35$ мс

К наиболее важным целям исследования структуры течения, формирующегося в слоистых системах под действием УВ, относится определение степени перемешивания контактирующих газов. Для этих целей необходимо знать распределение концентраций (или плотностей) в зонах смешения газов. При проведении экспериментов этот вопрос не изучался. Однако, по экспериментальным данным, представленным на рис. 7, можно заключить, что в окрестности наклонной КГ наблюдаются области гетерогенного и гомогенного перемешивания воздуха и ксенона.

Из результатов численного моделирования задачи, представленных на рис. 5, 7 и 8, следует отсутствие гомогенного перемешивания на обеих КГ. Гетерогенное перемешивание наблюдается в сечении $y = 1,5$, где сосредоточены вихревые структуры. Насколько это соответствует эксперименту, оценить невозможно из-за отсутствия опытных данных. В сечении $y = 3,5$ перемешивание на границах ксенона и воздуха не наблюдается.

Заключение

Проведено прямое численное моделирование течения, развивающегося под действием УВ в трехслойной газовой системе, составленной из разноплотных газов. Моделирование задачи выполнено с использованием уравнений Эйлера по методике МИД на последовательности сгущающихся сеток.

Анализ экспериментальных данных позволяет предположить, что в окрестности первой (наклонной) КГ наблюдаются области гетерогенного и гомогенного перемешивания воздуха и ксенона. На второй (прямой) КГ под влиянием неустойчивости Рихтмайера–Мешкова ТП развито слабо.

Результаты моделирования показали, что на первой (наклонной) КГ в результате развития неустойчивости Кельвина–Гельмгольца формируется вихревая дорожка с гетерогенным переме-

шиванием газов между первым и вторым вихрями. Перемешивание между вторым вихрем и верхней стенкой трубы отсутствует. Рассчитанное положение фронта основной УВ и форма второй КГ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

В дальнейших экспериментальных исследованиях необходимо изучить распределение концентраций (или плотностей) в зонах смешения газов. Такая информация позволит определить степень намешивания контактирующих газов и будет способствовать более детальному тестированию численной методики. Остается неизученным вопрос задания начальной шероховатости КГ.

Список литературы

1. Лебо И. Г., Тишкин В. Ф. Исследование гидродинамической неустойчивости в задачах лазерного термоядерного синтеза методами математического моделирования. М.: Физматлит, 2006.
2. Иногамов Н. А., Демьянов А. Ю., Сон Э. Е. Гидродинамика перемешивания. М.: МФТИ, 1999.
3. Неуважаев В. Е. Математическое моделирование турбулентного перемешивания. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2007.
4. Янилкин Ю. В., Стаценко В. П., Козлов В. И. Математическое моделирование турбулентного перемешивания в сжимаемых средах: Курс лекций. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009.
5. Разин А. Н. Моделирование неустойчивости и турбулентного перемешивания в слоистых системах: Монография. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010.
6. Волков К. Н., Емельянов В. Н. Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. М.: Физматлит, 2008.
7. Разин А. Н., Большаков И. В. Расчеты неустойчивости и турбулентного перемешивания по модели Никифорова // Теплофизика и аэромеханика. 2014. Т. 21, № 4. С. 425–438.
8. Бобровский Д. И., Большаков И. В., Разин А. Н. О сходимости разностного решения уравнений турбулентного перемешивания при взаимодействии зоны перемешивания с ударной волной // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 2. С. 16–24.
9. Разин А. Н., Невмержицкий Н. В., Сотсков Е. А. и др. Экспериментальное исследование взаимодействия ударных волн с контактной границей и зоной турбулентного перемешивания различных газов // ПМТФ. 2017. Т. 58, № 2. С. 16–25.
10. Разин А. Н. Взаимодействие ударной волны с наклонной контактной границей // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 2. С. 3–11.
11. Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сеньковский Е. Д. и др. Исследование турбулентного перемешивания в трехслойных газовых системах лазерным методом // Там же. 2009. Вып. 3. С. 44–54.
12. Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сеньковский Е. Д. и др. Развитие зон турбулентного перемешивания в трехслойных газовых системах в условиях регулярного и нерегулярного взаимодействия ударной волны с контактной границей // Труды 17-х Харитоновских тематических

чений (Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны). Саров, 2015. С. 722–734.

13. Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сеньковский Е. Д. и др. Экспериментальное и численное исследование процесса турбулентного перемешивания на контактных границах трехслойных газовых систем // ПМТФ. 2015. Т. 56, № 2. С. 32–42.

14. Змушко В. В., Плетенев Ф. А., Сараев В. А., Софронов И. Д. Методика решения трехмерных уравнений газовой динамики в смешанных лагранжево-эйлеровых координатах // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1988. Вып. 1. С. 22–27.

15. Софронов И. Д., Афанасьева Е. А., Винокуров О. А. и др. Комплекс программ МИМОЗА для решения многомерных задач механики сплошной среды на ЭВМ «Эльбрус-2» // Там же. 1990. Вып. 2. С. 3–9.

16. Zmushko V. V. Computation of convective flows and their realization in MIMOZA code // International Workshop «New Models of Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media». Oxford. September 15–19. 1997.

17. Ладагин В. К., Пастушенко А. М. Об одной схеме расчета газодинамических движений // Численные методы механики сплошной среды. 1977. Т. 8, № 2. С. 66–72.

Numerical Simulation and Experimental Study of Turbulent Mixing Development in Gas Layers Caused by a Passing Shock Wave

**E. V. Bodrov, V. V. Zmushko, N. V. Nevmerzhitskiy, A. N. Razin,
E. D. Senkovskiy, E. A. Sotskov**

The experimental data and the results of direct numerical simulation of the flow developed in a constant-cross-section tube in passage of a shock wave through a three-layer gas system are presented. The three-layer system is formed as a result of mounting two thin films in the tube and filling the space between them with gases of different densities. The first interface (thin film) makes an angle of 45° with the shock front and the second interface is located in parallel to the front. The shock wave is formed at the left tube end and moves towards the first interface at the Mach number $M = 2.4$. The results of simulation of the problem are compared with the experimental data.

УДК 621.382.22

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_248

Моделирование образования каскада смещений и переходных ионизационных процессов в кремниевых полупроводниковых структурах при нейтронном воздействии

При помощи метода молекулярной динамики проведено моделирование формирования разупорядоченной области дефектов в объемном кремнии для различных энергий первичного атома отдачи. Рассчитаны изменения объема и числа радиационных дефектов в кластере в процессе его формирования. Теоретически получены скорости генерации неравновесных носителей заряда и амплитудно-временные зависимости импульсов ионизационных токов в тестовых диодах Шоттки гипервысоких частот.

И. Ю. Забавичев^{1,2}, А. А. Потехин^{1,2},
А. С. Пузанов^{1,2}, С. В. Оболенский^{1,2},
В. А. Козлов^{2,3}

Введение

Основной тенденцией развития микро- и нанoeлектроники является уменьшение размеров рабочих областей полупроводниковых структур [1], что, в конечном счете, обусловлено улучшением параметров интегральных схем и дискретных элементов (быстродействия и производительности, объема памяти, предельных рабочих частот, усиливаемой мощности, уровня шумов, и т. д.) при сохранении или даже уменьшении стоимости их разработки и производства. Аналогичные процессы (с некоторой задержкой во времени) идут и в области разработки специализированной элементной базы, предназначенной для применения в военных и космических системах.

¹ Филиал РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю. Е. Седакова», г. Н. Новгород; ² Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, г. Н. Новгород; ³ Институт физики микроструктур РАН, г. Н. Новгород.

© Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 58, № 9.

Перенос носителей заряда в нанометровых объемных [2] и квантово-размерных [3] структурах при радиационном воздействии имеет ряд особенностей, обусловленных усилением влияния неоднородности дефектообразования [4] и ионизации, а также возможностью полного перекрытия канала полевого транзистора или базы биполярного транзистора [5] одиночным кластером радиационных дефектов.

Экспериментально процесс формирования кластера радиационных дефектов на начальной стадии еще не изучен [6], хотя существуют предпосылки для решения данной задачи на основе анализа спектра излучения в терагерцевом диапазоне частот [7] или при помощи фемтосекундной съемки в режиме реального времени [8]. Таким образом, теоретическое рассмотрение процесса формирования разупорядоченной области радиационных дефектов в настоящее время остается единственной возможностью и представляет значительный интерес для построения математических моделей реакции субмикронных полупроводниковых приборов на радиационное воздействие.

В настоящее время существует широкий спектр методов моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе [6], которые можно разделить на четыре класса: квантово-механические методы «из первых принципов», методы классической молекулярной динамики, методы парных столкновений на базе алгоритмов Монте-Карло и континуальные методы, основанные на законах тепломассопереноса в сплошной среде. В основе квантово-механических методов лежит численное решение многочастичного уравнения Шредингера. В силу вычислительной сложности данный метод ограничен системами, состоящими из нескольких сотен атомов, чья динамика моделируется в течение нескольких фемтосекунд [9]. Поэтому в настоящее время квантово-механический метод на практике для моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе не применяется.

Метод классической молекулярной динамики, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов отслеживается интегрированием их уравнений движения, впервые применен для анализа дефектообразования в материалах при радиационном воздействии в работе [10]. В данной работе помимо расчета эволюции точечных дефектов – их кластеризации в устойчивые скопления, а также рекомбинации части вакансий и междоузельных атомов – рассмотрена задача ионизации микрообъема первичным атомом отдачи и генерации импульсов тока в полупроводниковых структурах.

1. Методика моделирования

Упругое взаимодействие быстрых нейтронов с энергией свыше 0,1 МэВ с полупроводниковыми структурами приводит к тому, что частица выбивает из кристаллической решетки один из атомов вещества [11], называемый первичным атомом отдачи. Этот атом с достаточно высокой энергией (до сотен кэВ), тормозясь в среде за счет потерь на возбуждение и ионизацию электронной подсистемы кристалла, периодически упруго рассеивается на атомах среды, что, в свою очередь, выбивает их из занимаемого положения, в результате чего каскад смещений разветвляется наподобие дерева. Таким образом, в результате взаимодействия нейтрона со средой образуется импульс ионизационного тока, а движение носителей заряда в полупроводниковой структуре меняется из-за дополнительного рассеяния на формирующемся кластере радиационных дефектов. Ввиду существенно разных энергий и масс атомов отдачи и носителей заряда процессы формиро-

вания кластера радиационных дефектов и генерации импульса ионизационного тока можно рассматривать независимо.

1.1. Методика расчета образования кластера радиационных дефектов

Для моделирования процесса образования кластера радиационных дефектов использовался пакет прикладных программ LAMMPS [12]. В качестве межатомного потенциала взаимодействия был выбран потенциал Стиллера–Вибера (Stillinger-Weber) [13]

$$U(r) = \sum_i \sum_{j>i} U_2(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq j \neq i} U_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}),$$

$$U_2(r_{ij}) = \begin{cases} A_{ij} \varepsilon_{ij} \left[B_{ij} \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{p_{ij}} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{q_{ij}} \right] \exp\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij} \sigma_{ij}} \right), & r_{ij} \leq a_{ij} \sigma_{ij}, \\ 0, & r_{ij} \geq a_{ij} \sigma_{ij}, \end{cases} \quad (1)$$

$$U_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}) = \lambda_{ijk} \varepsilon_{ijk} \left[\cos(\theta_{ijk}) + \cos(\theta_{0ijk}) \right]^2 \exp\left(\frac{r_{ij} \sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij} \sigma_{ij}} \right) \exp\left(\frac{\gamma_{ik} \sigma_{ik}}{r_{ik} - a_{ik} \sigma_{ik}} \right),$$

где A, B, p, q, a, λ и γ – безразмерные параметры модели; $a\sigma$ – расстояние отсечки, ε – размерный коэффициент. Значения параметров модели представлены в табл. 1. Использование данного потенциала обусловлено тем, что полученные с его помощью данные хорошо согласуются с теоретическими результатами моделирования и экспериментом [14].

Таблица 1

Значения параметров потенциала Стиллера–Вибера [13]

| Параметр | Значение |
|--------------------|----------|
| A | 7,049 |
| B | 0,602 |
| p | 4 |
| q | 0 |
| a | 1,8 |
| λ | 21 |
| γ | 1,2 |
| σ , нм | 0,209 |
| ε , эВ | 2,168 |

Для учета электронных потерь движущихся атомов использовалась двухтемпературная модель [15], которая основана на уравнении тепловой диффузии

$$C_e \rho_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla (K_e \nabla T_e) - g_p (T_e - T_a) + g_s T_a, \quad (2)$$

где C_e – теплоемкость электронного газа, ρ_e – электронная плотность, K_e – электронная проводимость, g_p – коэффициент электрон-фононного взаимодействия, g_s – коэффициент электронных потерь, T_a и T_e – температуры атомной и электронной подсистем соответственно. Решив уравнение (2) относительно T_a и T_e , можно вычислить обмен энергией между атомной и электронной подсистемами. Значения параметров модели, выбранные для проведения расчетов в данной работе, представлены в табл. 2 [14].

Таблица 2

Значения параметров двухтемпературной модели [14]

| Название параметра | Значение |
|--|-------------------------|
| $C_e, \text{эВ}/(e^- \cdot K)$ | $5,11511 \cdot 10^{-6}$ |
| $\rho_e, e^-/\text{А}^3$ | 0,05 |
| $D_e, \text{А}^2/\text{пс}$ | 20000 |
| $\gamma_p, \text{Г}/(\text{моль} \cdot \text{пс})$ | 1,741 |
| $\gamma_s, \text{Г}/(\text{моль} \cdot \text{пс})$ | 39,23 |
| $\nu_0, \text{А}/\text{пс}$ | 79,76 |

Размер расчетной области составил $500 \times 500 \times 500$ А (8000000 атомов), в ней моделировалась эволюция разупорядоченной области атомных смещений в течение 100 пс, образованной первичным атомом отдачи кремния с начальной кинетической энергией 3, 12 и 50 кэВ. Для определения местоположения дефектов в моделируемой системе использовался метод, основанный на построении ячеек Вигнера–Зейтца. К полученному множеству точечных дефектов применялся алгоритм k -средних [16], выделяющий отдельные субкластеры в общем объеме каскада смещений, расстояние между которыми не превышает размеры области пространственного заряда в полупроводнике при заданном уровне легирования примесью. Каждый получившийся субкластер аппроксимировался эллипсоидом вращения в соответствии с алгоритмом [17], и вычислялся его объем.

1.2. Методика расчета переходных ионизационных процессов в полупроводниковых структурах

Для расчета реакции субмикронных полупроводниковых приборов на воздействие одиночных нейтронов использовалась модифицированная локально-неравновесная диффузионно-дрейфовая модель переноса носителей заряда, ранее предложенная в работе [18]. Радиационно-чувствительными параметрами модели являются времена жизни, подвижности и коэффициенты диффузии электронов и дырок, значения которых уменьшаются с ростом флюенса или дозы дефектообразующих излучений. Учет ионизационной компоненты осуществляется через пространственно-временное изменение скорости генерации неравновесных носителей заряда.

Точный расчет пространственно-временного распределения неравновесных носителей заряда в процессе прохождения заряженной частицы через вещество представляет собой отдельную, до конца не решенную задачу [19]. Традиционно для расчета переходных ионизационных процессов в полупроводниковых структурах при воздействии протонов, α -частиц и тяжелых заряжен-

ных частиц космического пространства в системах автоматизированного проектирования изделий микро- и нанoeлектроники используется представление скорости генерации неравновесных носителей заряда в виде произведения трех сомножителей [20, 21]

$$G(l, r, t) = G_{\text{LET}}(l)R(r, l)T(t), \quad (3)$$

где $G_{\text{LET}}(l)$ – амплитудный коэффициент, определяемый величиной линейной передачи энергии вдоль трека частицы; $R(r, l)$ – нормированный пространственный множитель, описываемый экспоненциальной или гауссовой функцией, $T(t)$ – нормированный временной множитель, описываемый гауссовой функцией; r – радиус, определяемый как перпендикулярное расстояние к треку; l – расстояние вдоль трека. Трек частицы предполагается прямолинейным.

В данной работе использовалось более точное нормированное пространственное распределение неравновесных носителей заряда [19], которое в нормированном виде записывается как

$$R(r, l) = \frac{1}{2\pi r_c^2} \left(1 + \frac{1}{1 + 2 \ln \left(\frac{r_p}{r_c} \right)} \right), \quad r < r_c, \quad (4)$$

$$R(r, l) = \frac{1}{2\pi r} \left(1 + \frac{1}{1 + 2 \ln \left(\frac{r_p}{r_c} \right)} \right), \quad r_c \leq r \leq r_p,$$

где r_c – радиус ядра, определяемый как отношение скорости частицы к плазмонной частоте (равной 16,7 эВ в случае кремния), r_p – радиус оболочки, определяемый длиной пробега δ -электронов.

Изменение энергии электронной подсистемы моделируемого объема определяется двумя конкурирующими механизмами: возбуждением электронной подсистемы атомами отдачи и релаксацией энергии в кристаллическую решетку. Таким образом, получаем уравнение

$$\frac{dE_{\text{el}}}{dt} = 2\pi E_{\text{ch}} \int_0^\infty \int_0^\infty r G(l, r, t) dr dl - \frac{E_{\text{el}}}{\tau_E}, \quad (5)$$

где E_{el} – энергия электронной подсистемы за вычетом равновесной тепловой составляющей, V – объем кластера радиационных дефектов, τ_E – среднее время релаксации энергии электронной подсистемы, полагавшее равным 0,1 пс; E_{ch} – средняя энергия, необходимая для образования электронно-дырочной пары (равная 3,6 эВ в случае кремния). Зависимость энергии электронной подсистемы от времени была получена при помощи расчета методом классической молекулярной динамики.

2. Результаты расчетов и их обсуждение

При помощи метода молекулярной динамики была рассчитана пространственно-временная эволюция области разупорядочения, образованная первичным атомом отдачи: временные зависимости числа пар Френкеля (рис. 1), объема области структурных повреждений и ионизации (рис. 2), а также энергии, передаваемую в электронную подсистему (рис. 3). Полученные результаты были использованы для расчета скорости генерации неравновесных носителей заряда (рис. 4) и переходных ионизационных процессов в тестовой полупроводниковой структуре (рис. 5).

В процессе формирования кластера радиационных дефектов можно выделить четыре характерные стадии: баллистический участок (до 0,04 пс), в течение которого первичный атом отдачи движется практически без столкновений; участок термического расширения (от 0,04 до 0,2 пс), на протяжении которого число дефектов в кластере стремительно нарастает; стадия первичной стабилизации (от 0,2 до 0,5 пс), которая характеризуется резким уменьшением числа дефектов за счет рекомбинации близких пар Френкеля, и стадия быстрого отжига (от 0,5 пс), которая может длиться несколько наносекунд, сопровождаясь при этом плавным по сравнению со стадией первичной стабилизации уменьшением числа дефектов за счет отжига. Медленный темп рекомбинации дефектов на последней стадии объясняется термостимулированной диффузией дефектов в остывающем объемном полупроводнике, поэтому для адекватного описания последующего отжига необходим больший промежуток времени физического моделирования (от единиц секунд до нескольких часов). Стоит отметить, что объем кластера радиационных дефектов на стадии быстрого отжига практически не меняется, в то время как число дефектов в нем медленно уменьшается, что связано с рекомбинацией пар дефектов, расположенных в центре, а не на периферии разупорядоченной области.

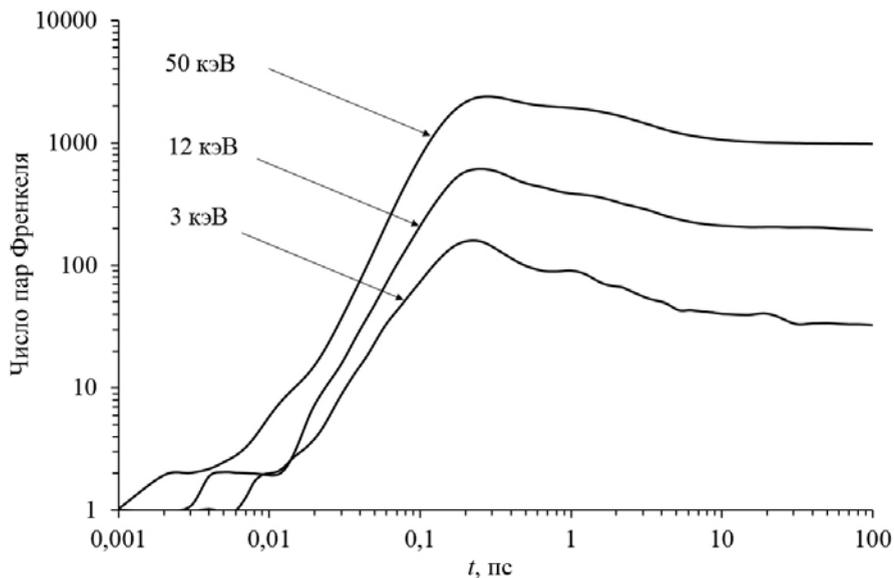


Рис. 1. Временная зависимость числа пар Френкеля для различных энергий первичного атома: 50, 12 и 3 кэВ

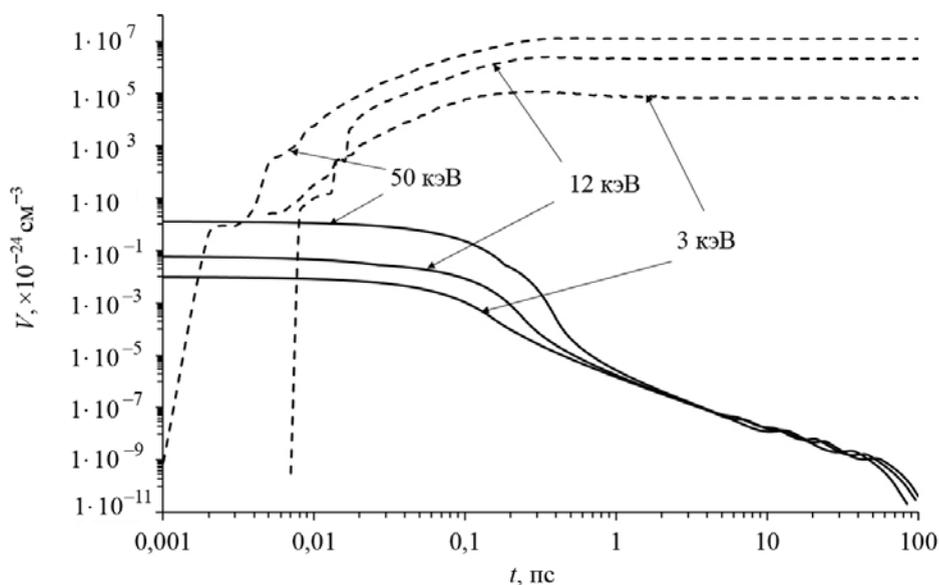


Рис. 2. Временная зависимость объема кластера радиационных дефектов (---) и объема области ионизации (—) для различных энергий первичного атома: 50, 12 и 3 кэВ

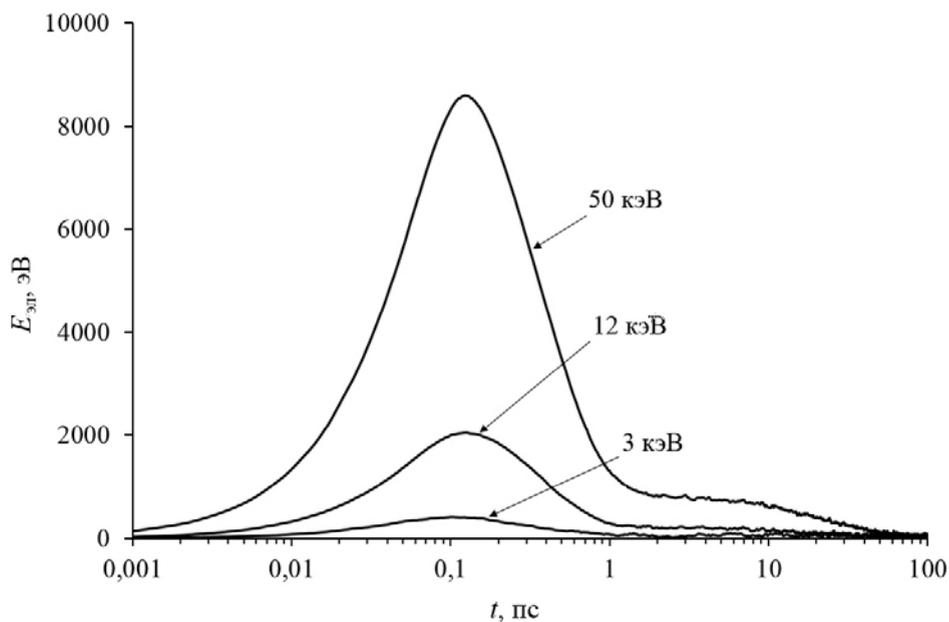


Рис. 3. Временная зависимость энергии электронной подсистемы для различных энергий первичного атома: 50, 12 и 3 кэВ

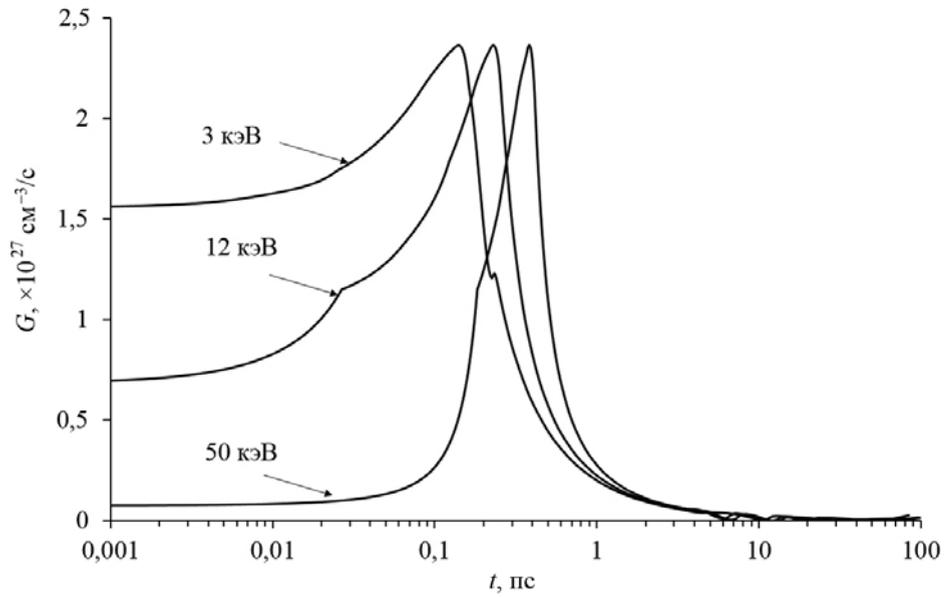


Рис. 4. Временная зависимость скорости генерации неравновесных носителей заряда для различных энергий первичного атома: 50, 12 и 3 кэВ

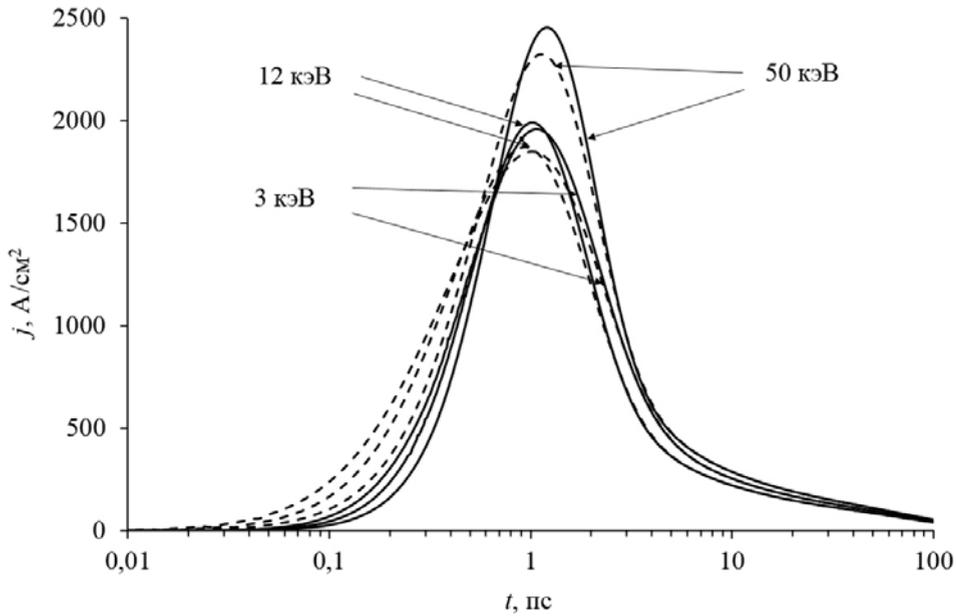


Рис. 5. Временная зависимость импульсов ионизационных токов, образованных первичными атомами отдачи различных энергий: 3, 12 и 50 кэВ; (—) – локально-неравновесная диффузионно-дрейфовая модель; (- - -) – локально-равновесная диффузионно-дрейфовая модель

В отличие от временной зависимости объема структурных повреждений зависимость объема области ионизации от времени носит монотонно убывающий характер, что обусловлено выносом носителей заряда внешним электрическим полем из области генерации. При этом зависимость энергии, передаваемой электронной подсистеме, от времени имеет максимум в диапазоне времен 0,1–0,2 пс в зависимости от начальной энергии первичного атома отдачи, что обуславливает экстремальную форму зависимости скорости генерации неравновесных носителей заряда от времени. Время достижения максимума скорости генерации неравновесных носителей заряда увеличивается с ростом начальной энергии первичного атома отдачи и составляет: 0,14 пс для энергии 3 кэВ; 0,23 пс для энергии 12 кэВ и 0,38 пс для энергии 50 кэВ. При этом максимальная скорость генерации неравновесных носителей заряда не зависит от энергии в рассматриваемом диапазоне и составляет $2,4 \cdot 10^{27} \text{ см}^{-3}/\text{с}$.

В качестве тестовой структуры был рассмотрен кремниевый диод Шоттки [18]. Концентрация примеси *n*-типа в рабочей области принималась равной 10^{17} см^{-3} , длина структуры 1 мкм, высота барьера Шоттки 0,55 В. На данную структуру в отсутствие внешнего приложенного напряжения моделировалось воздействие импульса ионизирующего излучения с параметрами, приведенными на рис. 4.

Результаты моделирования переходных ионизационных процессов приведены на рис. 5 для начальной энергии первичного атома отдачи 3, 12 и 50 кэВ. Несмотря на одинаковую максимальную скорость генерации неравновесных носителей заряда, максимальная амплитуда импульса ионизационного тока зависит от начальной энергии первичного атома отдачи и составляет: 1,96 кА/см² для 3 кэВ; 1,99 кА/см² для 12 кэВ и 2,46 кА/см² для 50 кэВ. Расчет по локально-равновесной диффузионно-дрейфовой модели дает заниженную оценку максимальной амплитуды ионизационного тока [18] и составляет: 1,85 кА/см² для 3 кэВ; 1,87 кА/см² для 12 кэВ и 2,32 кА/см² для 50 кэВ. Это различие может оказаться важным для расчета одиночных событий в ячейках памяти интегральных схем, так как вероятность сбоя зависит не только от интегрального значения заряда, но и от формы импульса ионизационного тока [22]. Время достижения максимальной амплитуды ионизационного тока лежит в пределах 0,94–1,21 пс, что существенно больше времени достижения максимальной скорости генерации неравновесных носителей заряда (0,14–0,38 пс) и слабо зависит от применяемой для расчета модели, что обусловлено большой длительностью переднего фронта импульса возбуждения по сравнению со средним временем между рассеяниями электронов и дырок, которое полагалось равным 0,1 пс.

Заключение

Результаты проведенных расчетов показывают возможность применения комплекса программ для расчета: формирования разупорядоченной области дефектов и ионизации микрообъема полупроводниковых структур первичными атомами отдачи при взаимодействии потоков нейтронов с веществом на основе метода классической молекулярной динамики и переходных ионизационных процессов при помощи локально-неравновесных моделей переноса носителей заряда.

Дальнейшее развитие предложенного подхода может быть связано с учетом переноса горячих носителей заряда, возникающих в треке первичного атома отдачи. Это потребует разработки локально-неравновесной квазигидродинамической модели переноса электронов и дырок в полупроводниковых структурах, а также методики расчета пространственно-временных распределений температуры неравновесных носителей заряда.

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда (проект № 18-13-00066). Работа выполнена с использованием ресурсов Суперкомпьютера «Лобачевский» ННГУ им. Н. И. Лобачевского. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

1. International Roadmap for Devices and Systems. 2017 Edition, Copyright @ 2018 IEEE
2. Оболенский С. В., Павлов. Г. П. Влияние нейтронного и космического излучения на характеристики полевого транзистора с затвором Шоттки // Физика и техника полупроводников. 1995. Т. 29, № 3. С. 413–420.
3. Демарина Н. В., Оболенский С. В. Электронный транспорт в нанометровых GaAs структурах при радиационном воздействии // Журнал технической физики. 2002. Т. 72, № 1. С. 66–71.
4. Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Влияние случайных неоднородностей в пространственном распределении кластеров радиационных дефектов на перенос носителей заряда через тонкую базу гетеробиполярного транзистора при нейтронном воздействии // Физика и техника полупроводников. 2016. Т. 50, № 12. С. 1706–1712.
5. Забавичев И. Ю., Потехин А. А., Пузанов А. С. и др. Деградация характеристик биполярных транзисторов на основе GaAs с тонкой базой при возникновении в них нанометровых кластеров радиационных дефектов под действием нейтронного облучения // Там же. 2017. Т. 51, № 11. С. 1520–1524.
6. Калинин Б. А. Физическое материаловедение. Т. 4. Физические основы прочности. Радиационная физика твердого тела. Компьютерное моделирование М.: МИФИ, 2008.
7. Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. и др. Высокочастотное детектирование процессов формирования и стабилизации кластера радиационных дефектов в полупроводниковых структурах // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49, № 12. С. 1585–1592.
8. Liang J., Zhu L., Wang L.V. Single-shot real-time femtosecond imaging of temporal focusing // Light: Science & Applications. 2018. Vol. 7, N 42. P. 1–10.
9. Vvedensky D. D. Multiscale modelling of nanostructures // Journal of Physics: Condensed Matter. 2004 Vol. 16, N 50. P. 1537–1576.
10. Gibson J. B., Goland A. N., Milgram M., Vineyard G. H. Dynamics of Radiation Damage // Physical Review. 1960. Vol. 120, N 4. P. 1229–1253.
11. Дремлин И. М., Иванов О. В., Нечитайло В. А. и др. Каскады атомных смещений в твердых телах. Динамическая стадия // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2004. Т. 125, № 2. С. 362–376.
12. Plimton S. Fast parallel algorithms for short range molecular dynamics // Journal Computational Physics. 1995. Vol. 117, N 1. P. 1–19.

13. Stillinger F. H., Weber T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Physical Review B*. 1985. Vol. 31, N 8. P. 5262–5271.
14. Jay A., Raine M., Richard N. et al. Simulation of single particle displacement damage in silicon. P. II: Generation and Long-Time Relaxation of Damage Structure // *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 2017. Vol. 64, N 1. P. 141–148.
15. Duffy D., Rutherford A. Including the effects of electronic stopping and electron–ion interactions in radiation damage simulations // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007. Vol. 19, N 1. P. 1–10.
16. Steinhaus H. Sur la division des corps materiels en parties // *Bulletin de l'academie polonaise des sciences Cl. III*. 1956. Vol. 4, N 12. P. 801–804.
17. Khachiyan L. G. Rounding of Polytopes in the Real Number Model of Computation // *Mathematics of Operations Research*. 1996. Vol. 21, N 2. P. 307–320.
18. Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Применение локально-неравновесной диффузионно-дрейфовой модели Каттанео–Вернотта для описания релаксации фототока в диодных структурах при воздействии субпикосекундных импульсов ионизирующих излучений // *Физика и техника полупроводников*. 2018. Т. 52, № 11. С. 1295–1299.
19. Комаров Ф. Ф. Нано- и микроструктурирование твердых тел быстрыми тяжелыми ионами // *Успехи физических наук*. 2017. Т. 187, № 5. С. 465–504.
20. Электронный ресурс <https://www.synopsys.com>
21. Электронный ресурс <https://www.silvaco.com>
22. Петросянц К. О., Харитонов И. А., Орехов Е. В. и др. Исследование стойкости к воздействию отдельных ядерных частиц ячеек КНИ КМОП ОЗУ методами смешанного 3D TCAD-SPICE моделирования // *Сб. трудов 5-й Всероссийской научно-технической конференции «Проблемы разработки перспективных микро- и нанoeлектронных систем – 2012»*. 2012. С. 413–418.

Simulation of the Formation of a Cascade of Displacements and Transient Ionization Processes in Silicon Semiconductor Structures Under Neutron Exposure

Zabavichev I. Yu., Potehin A. A., Puzanov A. S., Obolenskiy S. V., Kozlov V. A.

Using the method of molecular dynamics, we simulated the formation of a disordered region of defects in bulk silicon for different energies of the primary recoil atom. The changes in the volume and number of radiation defects in a cluster in the process of its formation are calculated. The rates of generation of nonequilibrium charge carriers and the amplitude – time dependences of the pulses of ionization currents in test Schottky diodes of hyperhigh frequencies are obtained theoretically.

УДК 621.3.084.2/621.3.032.5

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_260

Способ минимизации механических напряжений в чувствительном элементе микромеханических устройств при монтаже в корпус

Рассматриваются результаты исследований механических напряжений, возникающих в чувствительном элементе (ЧЭ) при его монтаже в корпус, и влияние механических напряжений на выходные характеристики на примере микродатчика давления (МДД). Приводятся данные численного моделирования деформаций кристалла ЧЭ, вызванных термическим расширением–сжатием при монтаже кристалла ЧЭ в системе опорный кристалл–корпус. Осуществляется поиск конструкции опорного кристалла, который при температурных изменениях позволяет минимизировать механические напряжения, обеспечивая механическую развязку между самим ЧЭ и корпусом прибора.

Е. И. Волкова*, П. А. Манин*, С. А. Попков*

Введение

На протяжении многих лет особое внимание уделяется операции по корпусированию ЧЭ микроэлектромеханических систем ввиду важной роли, которую она играет в конечных параметрах готового прибора [1]. Среди многих предложенных концепций по развязке первичного преобразователя или ЧЭ наиболее устойчивые решения получило направление, согласно которому упаковка ЧЭ может быть выполнена гораздо эффективнее, если требуемые параметры по механической развязке уже заложены в кремниевом промежуточном слое или опорном кристалле. Одной из таких функций опорного кристалла является минимизация механических напряжений, возникающих, например, как следствие термического линейного расширения основания корпуса прибора, на котором установлен ЧЭ.

* Филиал РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю. Е. Седакова», г. Н. Новгород.
© Наноиндустрия. 2018. № 9. С. 544–551.

На сегодняшний день существует несколько фундаментальных направлений в области микросистемной техники, наиболее чувствительных к проблемам корпусирования. Одно из таких направлений включает в себя интегральные преобразователи давления, принцип работы которых в ряде случаев базируется на тензорезистивном эффекте. Использование данного эффекта как основного принципа работы преобразователя получило широкое распространение благодаря относительно высокой точности измеряемых характеристик ЧЭ [2] и простоте конструкции, в которой используются тензорезисторы. Однако, ряд факторов может ухудшать выходные характеристики. Наиболее остро обстоят дела с механическими напряжениями, которые приносят свой вклад в зависимость выходного сигнала от прикладываемого внешнего давления среды. Вклад от механических напряжений может приводить к смещению и дрейфу нуля зависимости, появлению гистерезиса в рабочем цикле, изменению времени отклика при резком изменении температуры. Таким образом, для разработки МДД, обладающего высокой точностью, требуется, чтобы все составляющие элементы проектируемого ЧЭ МДД были согласованы между собой с минимальным количеством механических напряжений на переходных интерфейсах в системе мембрана ЧЭ–корпус прибора или действие отрицательных факторов можно было бы компенсировать.

В данной работе рассматривается задача по поиску оптимальной конструкции опорного кристалла. Проводится сравнительный анализ среди приведенных вариантов по развязке с корпусом прибора, и предлагается вариант конструкции опорного кристалла, который позволяет сократить передачу паразитных воздействий на ЧЭ МДД и, тем самым, уменьшить нежелательные составляющие в выходной характеристике.

Теоретическая часть

Несомненно, что в борьбе за максимально достижимый результат проявляются как положительные, так и отрицательные стороны в разработке конечного продукта. Если принять за основной параметр точность ЧЭ, то вторым по важности критерием является простота в технологии его изготовления. Поэтому дальнейшее рассмотрение и выбор опорных кристаллов как части ЧЭ среди наиболее распространенных видов велось на основе этих двух критериев. Конструкция поддерживающего кристалла должна обеспечивать минимальный вклад от нежелательных составляющих в выходной сигнал, и сам опорный кристалл можно изготовить в едином цикле на базе технологической линии микроэлектронных устройств.

Наибольшую популярность среди сравнительно недорогих ЧЭ МДД получила механическая развязка с корпусом в виде массивного опорного кристалла, высота которого в несколько раз превышает толщину кристалла ЧЭ (модель I на рис. 1, а) [3] или такого же основания, но уже закрепленного на керамической трубочке (модель II на рис. 1, б). Установка мембраны ЧЭ подобным образом в первом приближении позволяет частично снять механические напряжения, связанные с корпусированием ЧЭ.

Монтаж мембраны ЧЭ на опорный кристалл (модели I и II) осуществляется путем склеивания, пайки и легирования (см. работу [1]). Наряду с различными способами наиболее часто опорный кристалл типа модели I получают при помощи электростимулированного (анодного) соединения нескольких пластин кремния или боросиликатных стекол, которые, в свою очередь, объединяют с кристаллом ЧЭ [4]. Однако, механическая развязка такого вида в технологическом ключе не всегда является эффективной и оправданной из-за возрастающего количества операций и используемого оборудования по сравнению с циклом обработки стандартной кремниевой пластины. К тому же существенным недостатком этой концепции является требование, что все вхо-

дящие в ЧЭ и опорный кристалл слои должны иметь согласование между тепловыми коэффициентами расширения материала. При этом операция анодного соединения двух кристаллов приводит к преднапряженному состоянию в мембране ЧЭ, что негативно сказывается на характеристиках тензорезисторов и приводит к начальной разбалансировке моста в электрической схеме, в которую включается ЧЭ. Указанное обстоятельство будет продемонстрировано далее на примере зависимости выходного сигнала ЧЭ МДД от приложенного внешнего давления (рис. 8).

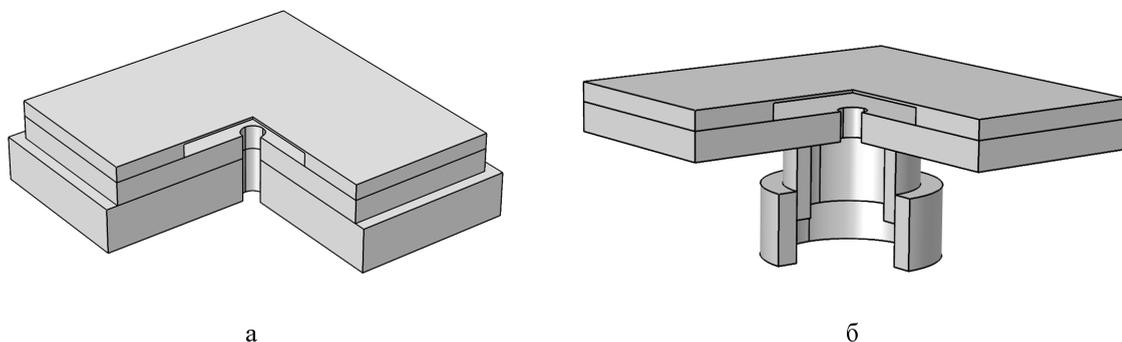


Рис. 1. ЧЭ МДД: а – расположение мембраны ЧЭ на массивном, опорном кристалле (модель I); б – расположение опорного кристалла на керамической трубке (модель II)

Альтернативным подходом к разработке формы опорного кристалла стало использование в его конструкции заранее предусмотренных планарных и объемных термокомпенсационных элементов [5, 6]. Среди имеющихся разновидностей конструкций опорных кристаллов были представлены те, с помощью которых возможно минимизировать механические напряжения и конструкция которых не привносит дополнительный отрицательный функционал, например, появление зависимости ЧЭ от действующего на него ускорения. На рис. 2 представлены два типа опорных кристаллов (модели III и IV), имеющие в своей геометрии термокомпенсаторы упругих напряжений, а на рис. 3 – модель V, предложенная в рамках исследований данной работы.

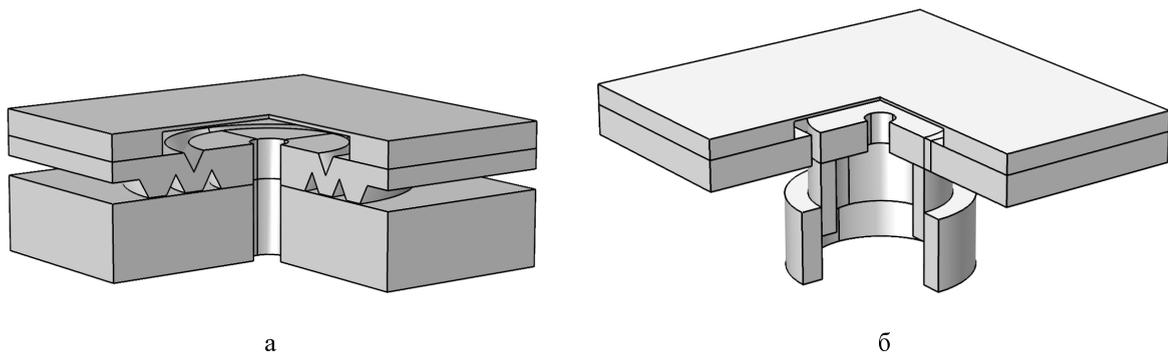


Рис. 2. ЧЭ МДД: а – опорный кристалл ЧЭ имеет форму гофрированной поверхности (модель III); б – закрепление опорного кристалла и мембраны ЧЭ осуществляется через подвес (модель IV)

Поддерживающие кристаллы, в конструкцию которых входят термокомпенсаторы упругих напряжений, формально можно разделить на два класса. В первый класс попадают кристаллы, способные компенсировать механические напряжения, действующие вдоль плоскости OXY (см. рис. 2, б и 3) (декартовой системы координат), во втором находятся те, которые также минимизируют напряжения в плоскости OXY с возможным задействованием направления вдоль оси OZ (см. рис. 2, а).

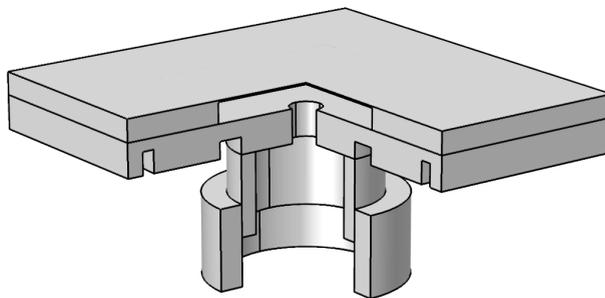


Рис. 3. Опорный кристалл ЧЭ имеет планарные термокомпенсаторы, закрепление осуществляется через керамическую трубку (модель V)

Экспериментальная часть

Расчет механических напряжений в опорном кристалле

При проведении расчетов механических напряжений в рассмотренных вариантах конструкций габаритные размеры и материалы, из которых они изготовлены, были взяты из описания действующих ЧЭ МДД (см. работу [3]). Чтобы учесть ряд тонких моментов математической модели, в итоговую конструкцию вошли следующие рабочие слои: кристалл с мембраной МДД, опорный кристалл, основание корпуса или керамическая трубка, которая является частью корпуса ЧЭ. Считалось, что ЧЭ изготовлен из монокристаллического кремния, как и опорный кристалл с термокомпенсаторами для моделей II–V. Для модели I кристалл с мембраной располагался на боросиликатном стекле. Основания корпусов у моделей I и III выполнены из ковара. У моделей II, IV и V закрепление в корпусе осуществляется через керамическую и медную трубочки, последняя вваривается в корпус.

Для выбора оптимальной конструкции среди образцов из разных классов расчет проводился для нескольких схожих моделей. Далее приведены результаты моделирования методом конечных элементов для опорных кристаллов, обладающих наиболее оптимальными функциональными возможностями среди представителей из каждого класса.

Как показано на рис. 4, а если ЧЭ расположен на опорном кристалле из боросиликатного стекла, при изменении температуры (осуществляется разогрев основания, на котором располагается опорный кристалл) наблюдаются механические деформации мембраны, в результате которых мембрана испытывает отрицательный прогиб, направленный против действия потока газа. Подобное поведение мембраны наблюдается и у модели II, когда массивное основание из кремния располагается на керамической трубочке в отсутствие термокомпенсаторов. Итогом такого совместного воздействия со стороны механических напряжений, имеющих противоположные направления, станет падение уровня выходного сигнала, и у внешнего наблюдателя может возникнуть неверное предположение, что измеряемое давление потока газа снизилось. Ситуация повторяется и в области отрицательной температуры, но прогиб мембраны и действие механических напряжений в этом случае уже совпадают по направлению.

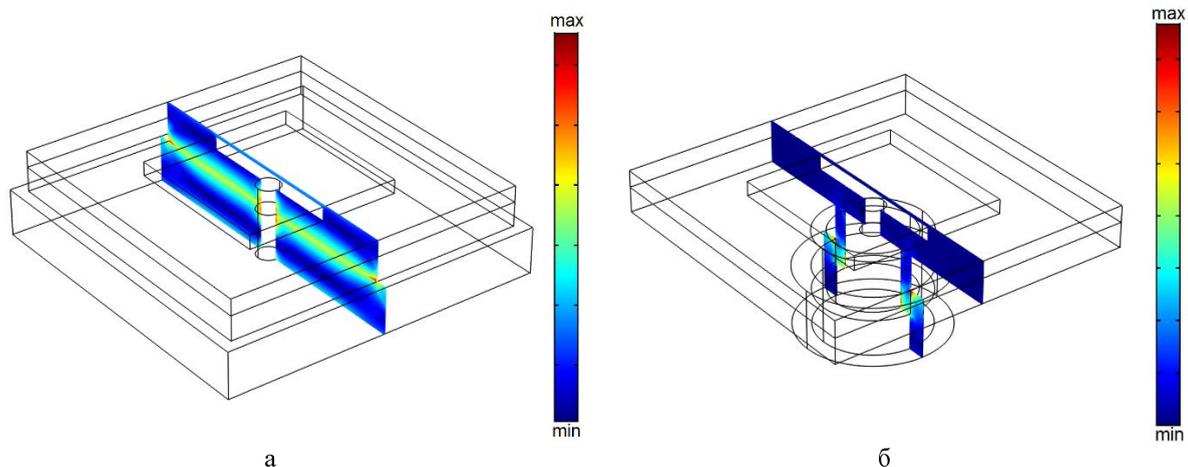


Рис. 4. Распределение механических напряжений в ЧЭ МДД для моделей I (а) и II (б)

В отличие от опорного кристалла, выполненного из стекла, где площадь соприкосновения кристалла мембраны максимальна, у модели III область контакта занимает не более 30 % от нижней грани основания, а у моделей II, IV и V первоначальное взаимодействие осуществляется через керамическую трубочку, которая далее закрепляется в медной трубке, жестко сваренной с корпусом. При этом область контакта с керамической трубочкой для моделей II, IV и V также не превышает 30 % от площади. Таким образом, уменьшение области контакта опорного кристалл с корпусом, как продемонстрировано на рис. 5 и 6, способствует снижению области распространения деформаций, что справедливо и для модели II. Однако, температурное расширение керамической трубки в случае модели II, на которой располагается опорный кристалл, в силу симметрии задачи приведет к начальной деформации мембраны ЧЭ, что, в свою очередь, также повлияет на выходные характеристики ЧЭ.

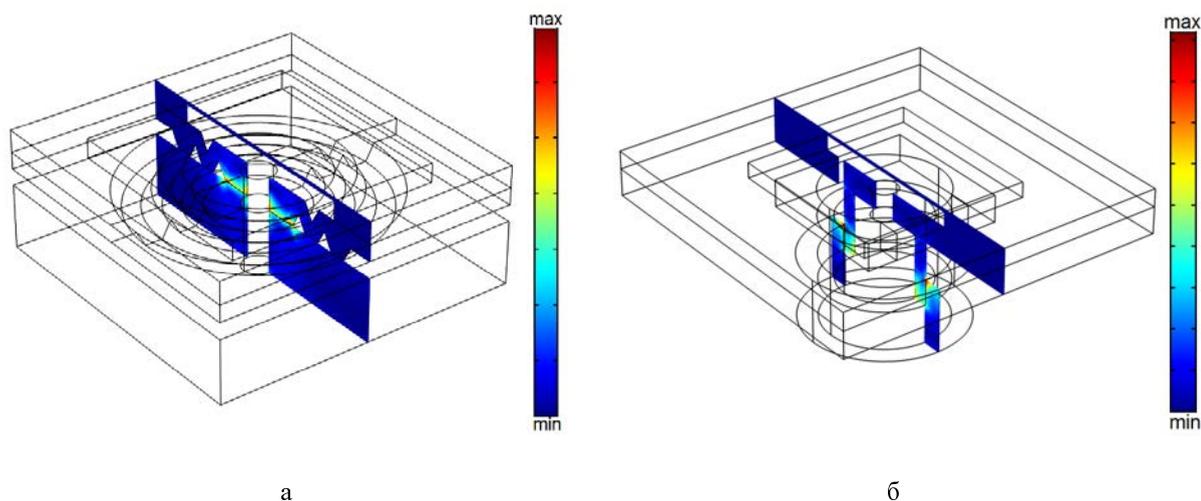


Рис. 5. Распределение механических напряжений в ЧЭ МДД для моделей III (а) и IV (б)

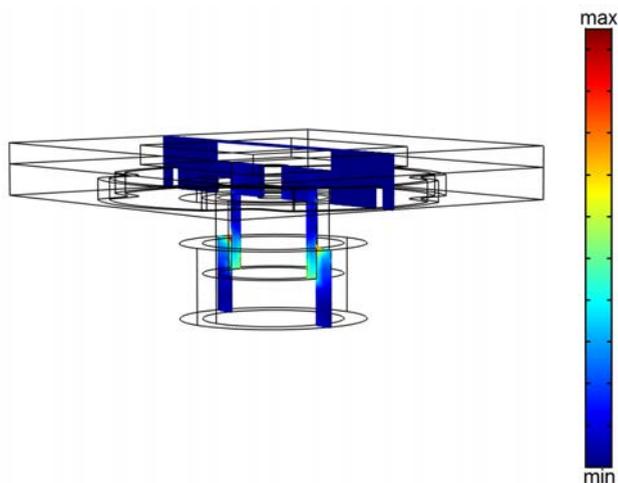


Рис. 6. Распределение механических напряжений в ЧЭ МДД для модели V

Опорный кристалл в форме гофрированной поверхности (модель III) обладает радиальной симметрией, и с увеличением расстояния относительно центра кристалла механические напряжения практически полностью релаксируют. Преимущество подобной конструкции заключается в том, что среди исследованных аналогов данный тип опорного кристалла наименее подвержен действию механических напряжений, связанных с температурными перепадами, ввиду того что вся гофрированная поверхность выступает в роли объемного термокомпенсатора. Согласно работе [7], вариация латеральных параметров опорного кристалла и толщины стенки гофрированной поверхности позволяет снизить напряженные состояния в материале до 95%. Помимо этого в конструкциях моделей III и V не требуется дополнительной герметизации и такой вариант ЧЭ подходит для датчика как абсолютного, так и дифференциального давления. Недостатками опорных кристаллов с гофрированной формой являются сложность в их изготовлении в части получения заданных кристаллографических плоскостей с помощью жидкостного травления с обеих сторон кристалла, их хрупкость при монтаже [3] и в областях высокой дефектности.

В сравнении с конструкцией модели III, в опорном кристалле модели IV, где связь с корпусом осуществляется через закрепленный подвес и трубочку, деформации, вызванные аналогичными температурными колебаниями, также минимальны и не влияют на работу ЧЭ. Все температурные изменения, связанные с внешней средой, на первом этапе поглощаются керамической трубкой, а уже затем подвесом, на конце которого имеется основание для закрепления на трубке. Достоинство такой конструкции заключено в простоте изготовления опорного кристалла, главными элементами которого являются основание крепления керамической трубки и плоский подвес, объединяющий основание с остальной частью кристалла. Радиальная симметрия основания и область, где оно располагается, позволяют выполнить механическую развязку с корпусом с минимальным взаимодействием через подвес. Сложности, обременяющие данный вид опорного кристалла и сам ЧЭ, связаны с тем, что для ЧЭ датчика абсолютного давления при такой конструкции необходимо будет изготовить дополнительную защитную крышку для герметизации мембраны ЧЭ. К тому же система, обладающая подвесом, даже с большой степенью жесткости, как в данном варианте, может выступать в качестве концентратора механических колебаний, что является отрицательным свойством конструкции.

Предложенная модель V опорного кристалл, исходя из его геометрических свойств, достаточно проста в изготовлении ввиду того, что модификация рельефа поверхности пластины потребует только с одной стороны. С точки зрения кремниевой технологии и его производства, подобное техническое решение имеет ряд преимуществ, поскольку минимизируются возможные технологические уходы и неточности. Геометрический вид термокомпенсаторов у кристалла представляет собой набор из концентрических колец сложной формы, конструкция не является сквозной, поэтому, как было указано выше, для данной модели не потребуется дополнительная герметизация.

Получение выходной характеристики ЧЭ МДД в условиях температурного колебания среды

Для определения вклада от механических напряжений, которые могут передаваться на мембрану ЧЭ, и получения его выходной характеристики при температурных изменениях среды были выполнены следующие этапы по расчетам:

1) с помощью среды Comsol Multiphysics выполнена модель мембраны ЧЭ толщиной 20 мкм (рис. 7, а);

2) используя расчет областей наибольших деформаций мембраны, исходя из полученных данных, были выбраны области расположения тензорезисторов (рис. 7, б);

3) далее тензорезисторы ЧЭ были включены в мостовую схему, благодаря чему была получена выходная характеристика – зависимость выходного сигнала U_{out} от приложенного давления на мембрану;

4) получив выходную характеристику ЧЭ для случая, когда мембрана не испытывает механические напряжения, нами были учтены условия температурного разогрева–охлаждения, в результате чего построены характеристики, показанные на рис. 8.

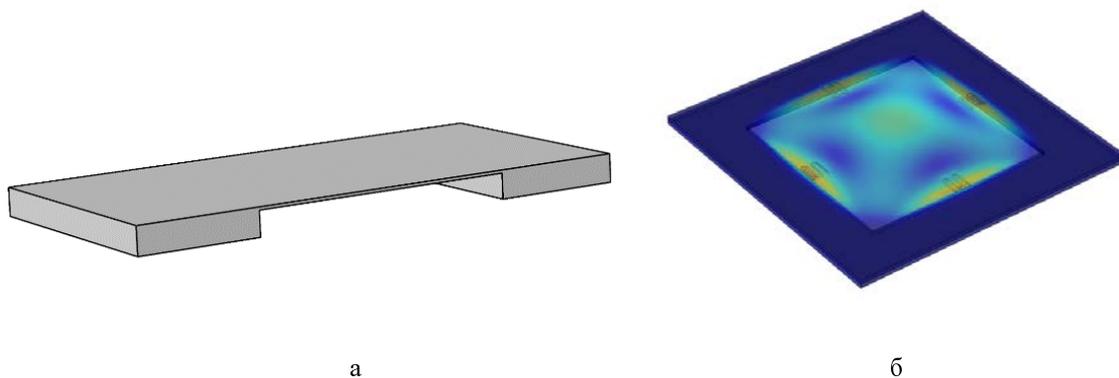
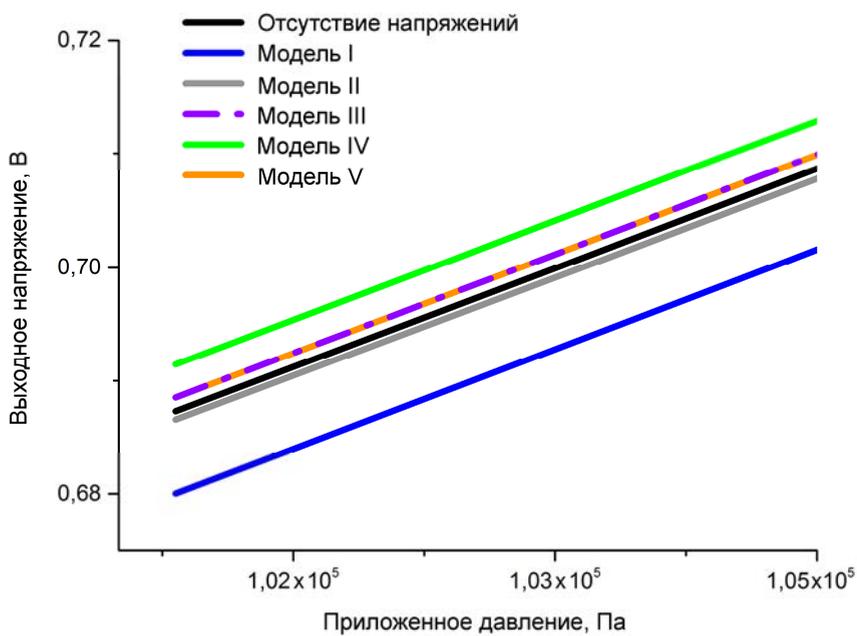
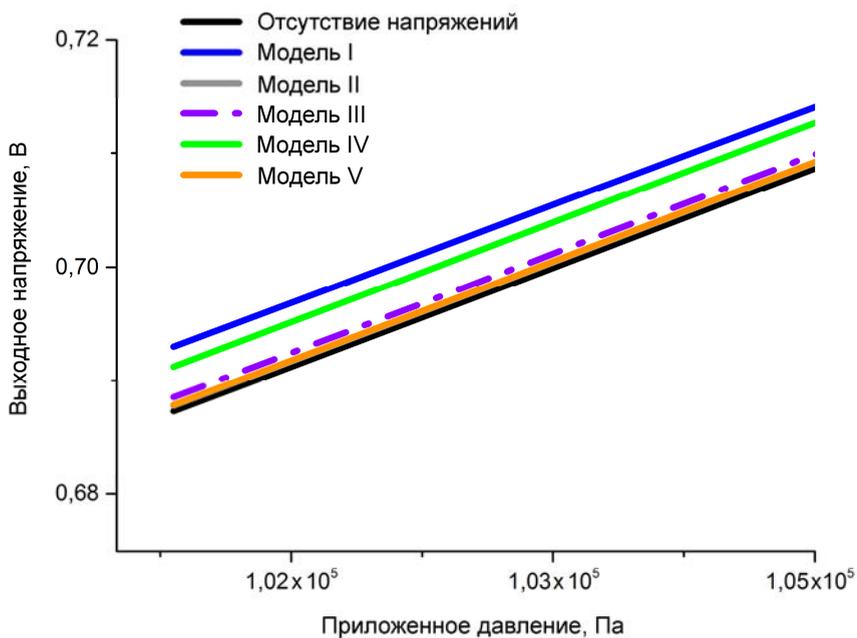


Рис. 7. Мембрана ЧЭ МДД: а – модель рассматриваемой мембраны ЧЭ; б – распределение механических деформаций и расположение тензорезисторов (тип меандр) в мембране



а



б

Рис. 8. Зависимость выходного сигнала U_{out} от приложенного давления на мембрану в условиях напряженного состояния опорного кристалла: а – система испытывает температурный разогрев; б – система испытывает температурное охлаждение

Согласно приведенным графикам (см. рис. 8) зависимость выходного сигнала для разных опорных кристаллов испытывает линейное смещение вдоль оси U_{out} , что связано с механическими напряжениями, вызванными температурными изменениями среды. Для моделей I и II в области положительной температуры наблюдается смещение вниз (см. рис. 8, а), что, как отмечалось ранее, является следствием противодействия двух типов механических напряжений. При отрицательной температуре уровень сигнала возрастает, что объясняется совпадением направлений действия внутренних и внешних напряжений (см. рис. 8, б). В случае модели III зависимость не изменяется на всем температурном диапазоне, что еще раз доказывает высокую эффективность опорных кристаллов ЧЭ, имеющих форму гофрированной поверхности. Характеристики моделей IV и V опорного кристалла испытывают незначительное смещение, что также подтверждает их эффективность в минимизации упругих полей при развязке ЧЭ с корпусом изделия.

Выводы

В ходе работы было проведено исследование пяти типов опорных кристаллов. Анализ с помощью метода конечных элементов при температурном расширении–сжатии основания корпуса прибора показал, что для моделей I и II опорного кристалла необходимо строгое согласование тепловых коэффициентов расширения материалов между всеми слоями, входящими в систему мембрана–опорный кристалл–корпус, при этом выходной сигнал ЧЭ МДД для модели I в значительной степени зависит от температуры даже при небольших ее изменениях.

Среди всех предложенных моделей опорных кристаллов модель III показала наилучшие выходные характеристики, полученные от ЧЭ МДД, в которой наблюдается наименьшее механическое напряжение, передаваемое от основания корпуса к мембране ЧЭ. Минимальное значение передаваемых механических напряжений достигается через утонение стенки гофрированной поверхности опорного кристалла, что подробно рассмотрено в работе [6]. При этом особенности развитого рельефа опорного кристалла и используемый материал накладывают ряд технологических трудностей на его изготовление.

Проанализировав результаты расчетов и простоту конструкции моделей IV и V с точки зрения технологии производства, сделан вывод в пользу развития данного класса опорных кристаллов, имеющих в своей конструкции планарные термокомпенсационные элементы, поскольку данный вариант модели наименее емкий в производстве и наделен наилучшими прочностными характеристиками. Зависимости выходного сигнала U_{out} от приложенного давления ЧЭ на базе этих моделей находятся в слабой зависимости от температуры окружающей среды, что удовлетворяет выдвинутому требованию о минимизации нежелательных вкладов в выходную характеристику. Предложенная авторами модель V опорного кристалла применима для ЧЭ датчика как абсолютного, так и дифференциального давления, что делает ее более удачным решением среди рассмотренных опорных кристаллов.

Список литературы

1. Offereins H. L., Sandmier H. Novel stress free assembly technique for micromechanical devices // Proc. of the Micro system technologies. 1990. 90. P. 515–520.
2. Hsieh C.-C., Hung C.-C., Li Y.-H. Investigation of a pressure sensor with temperature compensation using two concentric wheatstone-bridge circuits // Modern mechanical engineering. 2013. Vol. 3. P. 104–113.
3. Beeby S., Ensel G., Kraft M., White N. MEMS mechanical sensors. Norwood: Artech house, 2004.
4. Mirza A., Ayon A. Silicon wafer bonding: key to MEMS high-volume manufacturing // Sensors. 1998. P. 24–33.
5. Vaganov V. L. Construction Problems in Sensors // Sensors and Actuators. 1991. Vol. A28. P. 161–172.
6. Spiering V. L., Bouwstra S., Spiering R. M. E. J. On-Chip decoupling zone for package-stress reduction // IEEE. 1991. P. 982–985.
7. Spiering V. L., Bouwstra S., Burger J. F. Membranes Fabricated with a Deep Single Corrugation for Package Stress Reduction and Residual Stress Relief // J. Micromech. Microeng. 1993. Vol. 3. P. 243–246.

Method to Minimize Mechanical Stresses in a Sensitive Element of Micromechanical Devices Under Packaging

E. I. Volkova, P. A. Manin, S. A. Popkov

Examines research results of mechanical stresses occurred in a sensitive element (SE) under package and mechanical stresses effect on output characteristics based on an exemplary pressure microsensors (PMS). The paper gives data on digital simulation of SE chip strain caused by thermal expansion – compression at packaging SE chip in the support chip-package system. It is being performed a search of a support chip structure which enables to diminish mechanical stresses under temperature variations assuring mechanical decoupling between SE itself and a device package.

УДК 624.074.432(539.374)

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_270

Концепция построения алгоритмов оценки вероятности безотказной работы конструкций на основе линеаризации функции многих случайных аргументов

С. А. Пименов*

Рассматриваются методы оценки вероятности безотказной работы конструкций. Приведена концепция построения алгоритмов оценки вероятности безотказной работы конструкций на основе линеаризации функции многих случайных аргументов. Определяющие параметры (случайные аргументы) могут быть независимы или иметь корреляционные связи. Исходя из этого построены два базовых алгоритма: алгоритм для определения вероятности безотказной работы конструкции в случае отсутствия корреляции определяющих параметров; алгоритм для определения вероятности безотказной работы конструкции в случае корреляции определяющих параметров. В основе предлагаемых алгоритмов лежит модель «нагрузка – несущая способность», учитывающая: стохастичность механических свойств материалов конструкции; случайность геометрических характеристик; нагрузки вероятностного характера. Предложенные алгоритмы оценки вероятности безотказной работы применимы для любого рода конструкций и независимо от физического аспекта инженерного анализа. Основное условие – нормальное распределение нагрузки и несущей способности.

Введение

Инженерный расчет конструкции проводится с целью получения гарантии того, что за время эксплуатации не наступит ни одно из недопустимых предельных состояний (отказов). Под предельным состоянием здесь понимается предельное состояние по прочности.

Рассмотрим некоторую абстрактную конструкцию (например, консольная балка длиной L с прямоугольным сечением шириной b , высотой h), нагруженную сосредоточенной силой F .

* Филиал РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю. Е. Седакова», г. Н. Новгород.

© Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2019. № 2 (125).

Расчет на прочность в классической постановке сводится к определению уровня напряжений σ в опасной точке конструкции и дальнейшему сравнению его с допускаемыми напряжениями $[\sigma]$, полученными на базе основных механических характеристик материала с учетом коэффициента запаса прочности. Уровень напряжений σ есть функция основных определяющих параметров. Для случая консольной балки $\sigma = f(F, L, b, h)$, при этом $\sigma \leq [\sigma]$.

В общем случае, согласно работе [1], условие прочности или условие безотказной работы конструкции можно записать в виде

$$Q \leq R, \quad (1)$$

где Q – нагрузка, действующая на конструкцию, усилие в элементах конструкции, напряжения; R – несущая способность, выраженная в тех же единицах, что и величина нагрузки.

Нагрузка и несущая способность являются изменчивыми, случайными величинами, законы распределения которых можно установить, систематически накапливая и изучая опытные факты, реализующиеся в однородных условиях. Характер этой изменчивости таков, что в большинстве случаев не существует вполне определенного и имеющего практический смысл верхнего предела для нагрузок, равно как и нижнего предела для несущей способности. Поэтому условие (1) не может быть заменено условием (2)

$$Q_{\max} \leq R_{\min}. \quad (2)$$

Абсолютное требование, чтобы выполнялось неравенство (1), лишено смысла. Можно лишь поставить условие, чтобы в течение срока службы конструкции это требование было выполнено с той или иной вероятностью, достаточно близкой к единице. Таким образом, инженерные расчеты на прочность следует трактовать с вероятностной точки зрения. Исходя из этого, рассмотрим метод оценки вероятности безотказной работы конструкции.

Общий подход на основе линеаризации аналитических функций

Запишем условие прочности в виде (3)

$$\psi = R - Q > 0. \quad (3)$$

Функцию ψ принято называть функцией неразрушимости. Значения ψ являются случайными ввиду того, что значения R и Q также случайны. Необходимо отметить, что в общем случае как Q , так и R может иметь различные законы распределения (нормальный, логарифмически нормальный, Рэлея, Вейбулла, экспоненциальный, и др.). Поэтому и функция ψ в каждом конкретном случае также будет иметь различные законы распределения. Для случая нормального распределения R и Q функция ψ также распределена по нормальному закону (рис. 1), так как является линейной их комбинацией [2].

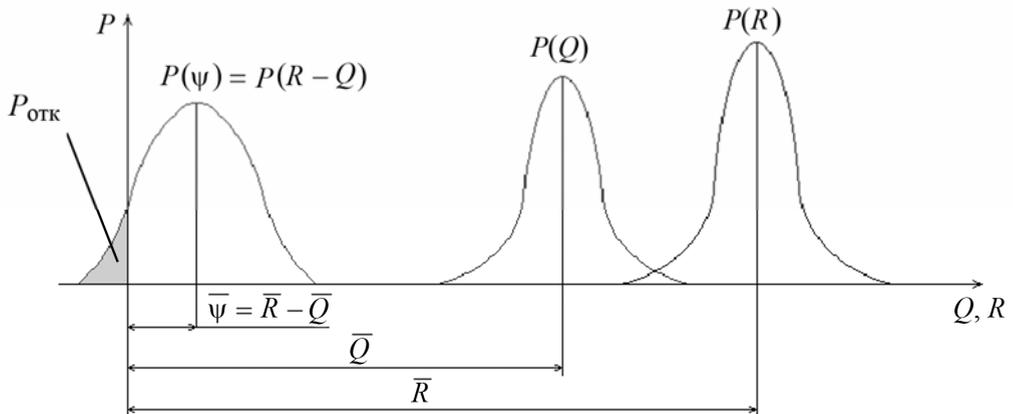


Рис. 1. Распределение функции неразрушимости и вероятность отказа

Так же запишем выражение для определения вероятности безотказной работы конструкции (4)

$$N = 1 - P_{\text{отк}}, \quad (4)$$

где $P_{\text{отк}} = P(\psi \leq 0) = \int_{-\infty}^0 p(\psi) d\psi$ – есть вероятность разрушения (отказа) конструкции (см. рис. 1).

Если параметры нагрузки и прочности не коррелированы между собой и распределены по нормальному закону, то для квантили $U_{P_{\text{отк}}}$ и вероятности отказа $P_{\text{отк}}$ получаем выражения (5)

$$U_{P_{\text{отк}}} = \frac{\bar{R} - \bar{Q}}{\sqrt{S_R^2 + S_Q^2}} = \frac{\eta - 1}{\sqrt{\eta^2 v_R^2 + v_Q^2}}, \quad P_{\text{отк}} = \frac{1}{2} - \Phi(U_{P_{\text{отк}}}), \quad (5)$$

где $\Phi(U_{P_{\text{отк}}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{U_{P_{\text{отк}}}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt$ – нормированная функция [2, 3]; $S_\psi = \sqrt{S_R^2 + S_Q^2}$ – среднее квадратичное значение ψ ; $\bar{\psi} = \bar{R} - \bar{Q}$ – среднее значение ψ ; S_R, S_Q – среднеквадратичные отклонения

R и Q соответственно; $\eta = \frac{\bar{R}}{Q}$ – условный коэффициент запаса; $v_R = \frac{S_R}{R}$ – коэффициент вариации несущей способности; $v_Q = \frac{S_Q}{Q}$ – коэффициент вариации нагрузки.

Тогда для определения вероятности безотказной работы конструкции N получаем

$$N = \frac{1}{2} + \Phi(U_{P_{\text{отк}}}). \quad (6)$$

Вернемся к рассмотренной ранее конструкции (консольная балка), безотказная работа которой, с вероятностной точки зрения, может быть представлена системой пяти случайных величин: $F, L, b, h, [\sigma]$. Здесь в качестве случайных величин выступают определяющие параметры конструкции, часть которых является аргументами функции R , а часть – аргументами функции Q .

В общем случае имеется система n случайных величин: (a_1, a_2, \dots, a_n) . Путем статистической обработки вариационных рядов определяющих параметров a_1, a_2, \dots, a_n могут быть получены характеристики такой системы: математические ожидания $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n$ и корреляционная матрица

$$\|K_{i,j}\| = \begin{vmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1n} \\ & K_{22} & \dots & K_{2n} \\ & & \dots & \\ & & & K_{nn} \end{vmatrix}.$$

Пусть величина ψ есть функция случайных аргументов a_1, a_2, \dots, a_n (7)

$$\psi = \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n), \quad (7)$$

причем, функция ψ не линейна, но мало отличается от линейной в области практически возможных значений всех аргументов. Следует заметить, что для большинства конструкций это справедливо [1]. Поэтому найдем характеристики величины ψ , применяя метод линеаризации [2, 3].

Рассмотрим функцию $\psi = \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)$ в достаточно малой окрестности точки $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n$ (в окрестности математических ожиданий определяющих параметров конструкции). Так как функция в этой окрестности почти линейна, то ее можно приближенно заменить линейной. Это равносильно тому, чтобы в разложении функции в ряд Тейлора около точки $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n$ сохранить только члены первого порядка, а все высшие отбросить (8):

$$\psi = \psi(a_1, a_2, \dots, a_n) \approx \psi(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n) + \sum_{i=1}^n \psi'_{a_i}(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n)(a_i - \bar{a}_i). \quad (8)$$

Тогда среднее значение $\bar{\psi}$ и дисперсия S_{ψ}^2 определяются следующим образом (9):

$$\begin{aligned} \bar{\psi} \cong \psi(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_i, \dots, \bar{a}_n); \quad S_{\psi}^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 S_{a_i}^2 + \\ + 2 \sum_{i < j} \left[\frac{\partial \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i} \left[\frac{\partial \psi(a_1, a_2, \dots, a_j, \dots, a_n)}{\partial a_j} \right]_{\bar{a}_j} k_{ij} S_{a_i} S_{a_j}. \end{aligned} \quad (9)$$

В случае когда определяющие параметры конструкции a_i не коррелированы ($k_{ij} = 0$ при $i \neq j$) выражение для дисперсия S_{ψ}^2 примет вид (10)

$$S_{\psi}^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 S_{a_i}^2, \quad (10)$$

а коэффициент вариации v_{ψ} определяется следующим образом (11):

$$v_{\psi}^2 = \left(\frac{S_{\psi}}{\bar{\psi}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 \frac{S_{a_i}^2}{\bar{\psi}^2} \cdot \frac{\bar{a}_i^2}{\bar{a}_i^2}. \quad (11)$$

Далее введем следующие обозначения: $v_{a_i} = \frac{S_{a_i}}{\bar{a}_i}$ – коэффициент вариации i -го определяющего

параметра; $\lambda_i^2 = \left[\frac{\partial \varphi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 \frac{\bar{a}_i^2}{\varphi^2}$ – коэффициент влияния i -го определяющего параметра.

Запишем (11) в следующем виде (12):

$$v_{\psi}^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 v_{a_i}^2 . \quad (12)$$

В обозначениях и терминах нагрузки Q , несущей способности R , определяющих параметров соответственно q_j и r_i запишем

$$U_{P_{отк}} = \frac{\eta - 1}{\sqrt{\eta^2 v_R^2 + v_Q^2}}; \quad v_R^2 = \sum_{j=1}^m \lambda_{jr}^2 v_{r_j}^2; \quad v_Q^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_{iq}^2 v_{q_i}^2, \quad (13)$$

где $\lambda_{jr}, \lambda_{iq}$ – коэффициенты влияния определяющих параметров; v_{r_i}, v_{q_i} – коэффициенты вариации определяющих параметров.

Построение алгоритмов оценки вероятности безотказной работы конструкций

Таким образом, с учетом ранее изложенного, можно построить общую структурную схему определения вероятности безотказной работы конструкции в случае отсутствия корреляции определяющих параметров (рис. 2).

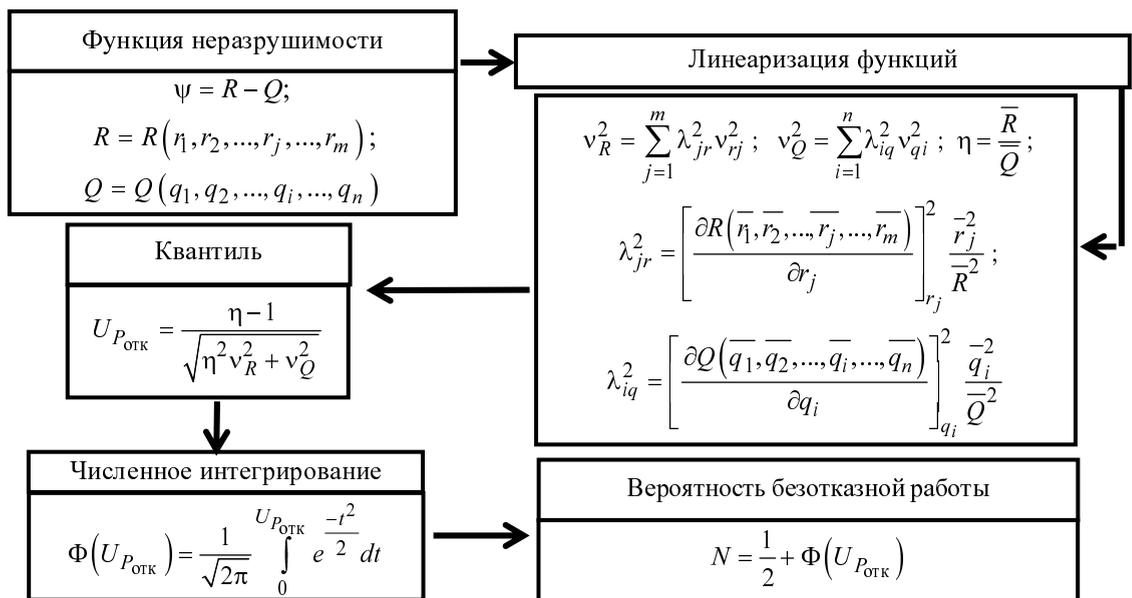


Рис. 2. Определение вероятности безотказной работы конструкции в случае отсутствия корреляции определяющих параметров

Рассмотрим частный случай, когда имеет место корреляция двух определяющих параметров. Обозначим эти параметры как $a_{i+1} = \Delta$ и $a_{i+2} = C$, а коэффициент корреляции этих параметров $k_{\Delta C}$. С учетом введенных обозначений и допущений выражение для дисперсии S_{Ψ}^2 примет вид (14)

$$S_{\Psi}^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 S_{a_i}^2 + 2 \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial \Delta} \right]_{\bar{\Delta}} \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial C} \right]_{\bar{C}} S_{\Delta} S_C k_{\Delta C}. \quad (14)$$

Тогда коэффициент вариации v_{Ψ} определяется следующим образом (15):

$$v_{\Psi}^2 = \left(\frac{S_{\Psi}}{\bar{\Psi}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 \frac{S_{a_i}^2}{\bar{\Psi}^2} \cdot \frac{\bar{a}_i}{\bar{a}_i} + 2 \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial \Delta} \right]_{\bar{\Delta}} \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial C} \right]_{\bar{C}} \cdot \frac{S_{\Delta}}{\bar{\Psi}} \cdot \frac{\bar{\Delta}}{\bar{\Delta}} \cdot \frac{S_C}{\bar{\Psi}} \cdot \frac{\bar{C}}{\bar{C}} k_{\Delta C}. \quad (15)$$

Введем следующие обозначения: $v_{\Delta} = \frac{S_{\Delta}}{\bar{\Delta}}$, $v_C = \frac{S_C}{\bar{C}}$ – коэффициенты вариации определяющих параметров Δ и C соответственно; $\lambda_{\Delta} = \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial \Delta} \right]_{\bar{\Delta}} = \frac{\bar{\Delta}}{\bar{\Phi}}$ – коэффициент влияния определяющего параметра Δ ; $\lambda_C = \left[\frac{\partial \Psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial C} \right]_{\bar{C}} = \frac{\bar{C}}{\bar{\Phi}}$ – коэффициент влияния определяющего параметра C . Запишем (15) в следующем виде (16):

$$v_{\Psi}^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 v_{a_i}^2 + 2 \lambda_{\Delta} \lambda_C v_{\Delta} v_C k_{\Delta C}. \quad (16)$$

В общем случае выражение (16) примет вид (17)

$$v_{\Psi}^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 v_{a_i}^2 + 2 \sum_{i < j} \lambda_i \lambda_j v_{a_i} v_{a_j} k_{ij}, \quad (17)$$

где $k_{ij} = \frac{\sum_{\gamma=1}^x (a_{i_{\gamma}} - \bar{a}_i)(a_{j_{\gamma}} - \bar{a}_j)}{\sqrt{\sum_{\gamma=1}^x (a_{i_{\gamma}} - \bar{a}_i)^2 \sum_{\gamma=1}^x (a_{j_{\gamma}} - \bar{a}_j)^2}}$ – коэффициент корреляции параметров a_i, a_j ; x – объем

выборки.

Аналогично (13) запишем выражения для нагрузки Q , несущей способности R и определяющих параметров соответственно q_j, r_i с учетом корреляции (18)

$$v_R^2 = \sum_{j=1}^m \lambda_{jr}^2 v_{rj}^2 + 2 \sum_{j < z} \lambda_{jr} \lambda_{zr} v_{rj} v_{rz} k_{jz};$$

$$v_Q^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_{iq}^2 v_{qi}^2 + 2 \sum_{i < z} \lambda_{iq} \lambda_{zq} v_{qi} v_{qz} k_{iz};$$

$$k_{jz} = \frac{\sum_{\gamma=1}^x (a_{j\gamma} - \bar{a}_j)(a_{z\gamma} - \bar{a}_z)}{\sqrt{\sum_{\gamma=1}^x (a_{j\gamma} - \bar{a}_j)^2 \sum_{\gamma=1}^x (a_{z\gamma} - \bar{a}_z)^2}}; \quad k_{iz} = \frac{\sum_{\gamma=1}^x (a_{i\gamma} - \bar{a}_i)(a_{z\gamma} - \bar{a}_z)}{\sqrt{\sum_{\gamma=1}^x (a_{i\gamma} - \bar{a}_i)^2 \sum_{\gamma=1}^x (a_{z\gamma} - \bar{a}_z)^2}};$$

$$\lambda_{jr}^2 = \left[\frac{\partial R(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_m)}{\partial r_j} \right]_{r_j}^2 \frac{-2}{\bar{R}^2}; \quad \lambda_{iq}^2 = \left[\frac{\partial Q(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_n)}{\partial q_i} \right]_{q_i}^2 \frac{-2}{\bar{Q}^2}. \quad (18)$$

По аналогии с рис. 2 построим общую структурную схему определения вероятности безотказной работы конструкции в случае корреляции определяющих параметров (рис. 3).

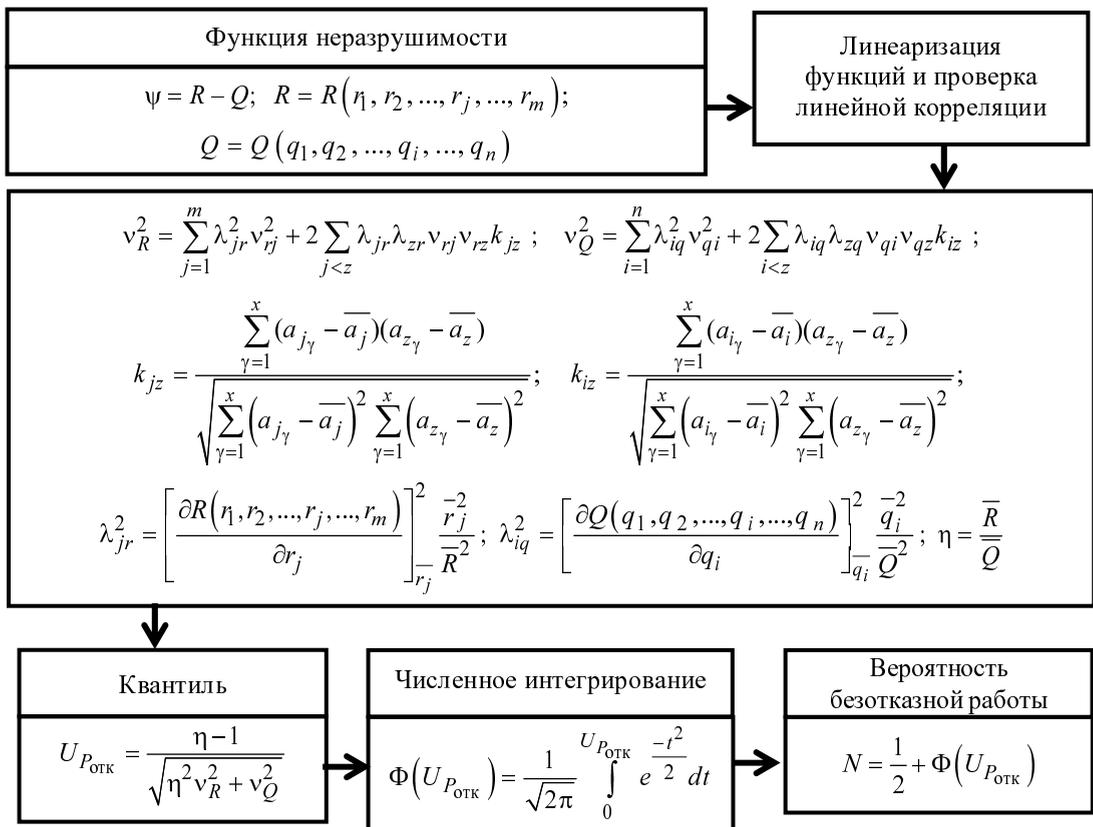


Рис. 3. Определение вероятности безотказной работы конструкции в случае корреляции определяющих параметров

О погрешности линеаризации

В целях уточнения результата можно при разложении функции неразрушимости в ряд Тейлора в окрестности математических ожиданий определяющих параметров конструкции сохранить члены второго порядка (19)

$$\begin{aligned} \psi = \varphi(a_1, a_2, \dots, a_n) \approx & \psi(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n) + \sum_{i=1}^n \psi'_{a_i}(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n)(a_i - \bar{a}_i) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \psi''_{a_i}(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n)(a_i - \bar{a}_i)^2 + \sum_{i < j} \psi'_{a_i}(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n) \psi'_{a_j}(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_n) \times \\ & \times (a_i - \bar{a}_i)(a_j - \bar{a}_j). \end{aligned} \quad (19)$$

В этом случае, когда определяющие параметры конструкции a_i имеют нормальное распределение и не коррелированы ($k_{ij} = 0$ при $i \neq j$), выражения для среднего значения $\bar{\psi}$ и дисперсии S_{ψ}^2 изменяют вид (20)

$$\begin{aligned} \bar{\psi} \cong & \psi(\bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_i, \dots, \bar{a}_n) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial^2 \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i^2} \right]_{\bar{a}_i} S_{a_i}^2; \\ S_{\psi}^2 = & \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, a_{i+1}, a_{i+2}, \dots, a_n)}{\partial a_i} \right]_{\bar{a}_i}^2 S_{a_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial^2 \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i^2} \right]_{\bar{a}_i} S_{a_i}^2 + \\ & + \sum_{i < j} \left[\frac{\partial^2 \psi(a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_n)}{\partial a_i \partial a_j} \right]_{\bar{a}_{ij}} S_{a_i} S_{a_j}. \end{aligned} \quad (20)$$

Сопоставляя расчеты по выражениям (20) и (10), можно оценить погрешность линеаризации. Последние два члена в выражении для дисперсии (20) представляют собой поправку на нелинейность и могут служить для оценки точности метода линеаризации при вычислении дисперсии.

Определение корреляционных связей

При решении практических задач необходимо выяснить существование корреляционных связей между определяющими параметрами конструкции и, исходя из этого, выбрать соответствующий расчетный алгоритм (алгоритмы показаны на рис. 2 и 3).

Таким образом, следует определить, существенно ли отличается от нуля рассчитанный по ряду измерений объема x эмпирический коэффициент корреляции k_{ij} или, иными словами, взята ли выборка из двумерной нормально распределенной генеральной совокупности с коэффициен-

том корреляции равным нулю, что позволяет сделать вывод о независимости случайных величин a_i, a_j .

Проверим следующую статистическую гипотезу $H_0: k_{ij} = 0$. Опровержение гипотезы H_0 означает, что между определяющими параметрами a_i, a_j существует корреляционная зависимость. В данном случае выборочная функция имеет вид (21)

$$T = K_{ij} \frac{\sqrt{x-2}}{\sqrt{1-K_{ij}^2}}, \quad (21)$$

с реализацией (22)

$$t = k_{ij} \frac{\sqrt{x-2}}{\sqrt{1-k_{ij}^2}}. \quad (22)$$

Выборочная функция T удовлетворяет распределению Стьюдента с $K = n - 2$ степенями свободы. Критическое значение статистики $t_{\alpha,k}$ распределения Стьюдента определяют по таблице справочника [3].

Если окажется, что $|t| \geq t_{\alpha,k}$, то эмпирический коэффициент корреляции k_{ij} существенно отличен от нуля. В этом случае можно принять, что случайные величины a_i, a_j являются зависимыми.

Если $|t| < t_{\alpha,k}$, то отклонения эмпирического коэффициента корреляции k_{ij} от нуля носят случайный характер (за счет объема выборки). В этом случае можно принять, что случайные величины a_i, a_j являются независимыми и $k_{ij} = 0$.

Заключение

В статье изложена концепция построения алгоритмов оценки вероятности безотказной работы конструкций. В основе лежит модель, учитывающая: стохастичность механических свойств материалов конструкции; случайность геометрических характеристик; нагрузки вероятностного характера.

Предложенные алгоритмы оценки вероятности безотказной работы применимы для любого рода металлических конструкций при условии нормального распределения нагрузки и несущей способности.

Список литературы

1. Болотин В. В. Статистические методы в строительной механике. М.: Стройиздат, 1965.
2. Вентцель Е. С. Теория вероятностей. М.: Наука, 1969.
3. Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М.: Наука, 1966.

The Concept of Building Algorithms for Assessment of Reliability of Designs on the Basis of Linearization of Function of Many Random Arguments

S. A. Pimenov

Reliability assessment methods for designs are considered. The concept of creation of algorithms for assessment of reliability for designs is provided on the basis of linearization of function of many random arguments. The defining parameters (casual arguments) can be independent or have correlation communications. Proceeding from it two basic algorithms are constructed: algorithm for determination of reliability of a design in case of lack of correlation of the defining parameters; algorithm for determination of reliability of a design in case of correlation of the defining parameters. The «loading-bearing strength» model considering is the cornerstone of the offered algorithms: stochasticity of mechanical properties of materials of a design; stochasticity of geometrical characteristics; loadings of probabilistic character. The offered algorithms of assessment of reliability are applicable for any sort of designs and irrespective of physical aspect in the engineering analysis. The main condition – a condition of normal distribution for load and bearing strength.

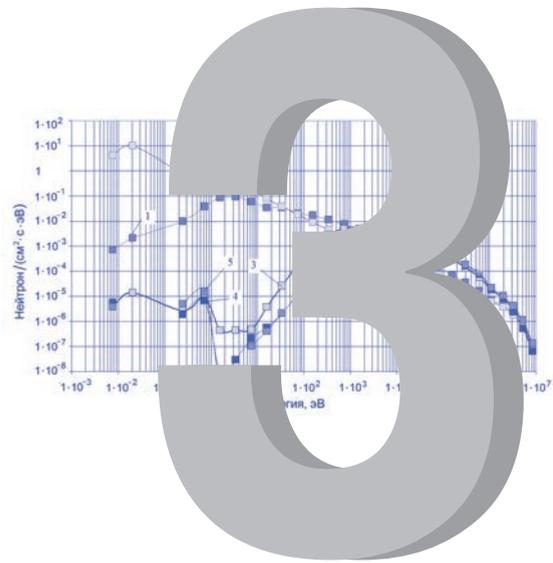
СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 3

Маршалкин В. Е.

Концепция замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла
ядерной энергетики 282

РАЗДЕЛ

ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ



УДК 621.039.52

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_282

Концепция замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла ядерной энергетики

В. Е. Маршалкин

Использование ^{232}Th вместо ^{238}U в качестве сырьевого изотопа, основного делящегося изотопа ^{233}U вместо ^{239}Pu , тяжелой воды – вместо легкой в качестве теплоносителя и ее разбавления легкой водой во время кампании реактора типа ВВЭР делают возможным самообеспечение топлива активными изотопами, в т. ч. и после достижения равновесного изотопного состава актиноидов, и обеспечивают замыкание торий-уран-плутониевого топливного цикла. Это позволяет: повысить на ~два порядка топливный ресурс; качественно упростить обращение с радиоактивными отходами; понизить ядерную опасность реактора типа ВВЭР; создать технологический барьер на пути распространения расщепляющихся материалов и ядерных технологий.

Введение

Распределение основных ископаемых энергетических ресурсов России (рис. 1) оценивается [1] следующим образом: энергия деления тория составляет ~42,72 %; энергия деления урана ~16,23 %; энергия сжигаемого в термоядерной (t, d) реакции трития, получаемого из ^6Li , составляет ~39,07 %, изотопа урана ^{235}U ~0,12 %. При этом интенсивно используемые в настоящее время ископаемые энергетические ресурсы углеводородов составляют всего ~1,86 %, и они распределяются следующим образом: нефть ~0,16 %, газ ~0,3 %, уголь ~1,31 %. Отсюда видны ограниченность возможности использования энергетического ресурса углеводородов в длительной перспективе и целесообразность наращивания мощностей, поставляющих энергию деления ядер тория и урана.

В настоящее время углеводороды являются основным источником тепла и электричества, а также сырьем на химических производствах. Ограниченный ресурс, выделение CO_2 и других экологически вредных продуктов сжигания, а также целесообразность использования углеводородов для производства товаров народного потребления уже в настоящее время обуславливают

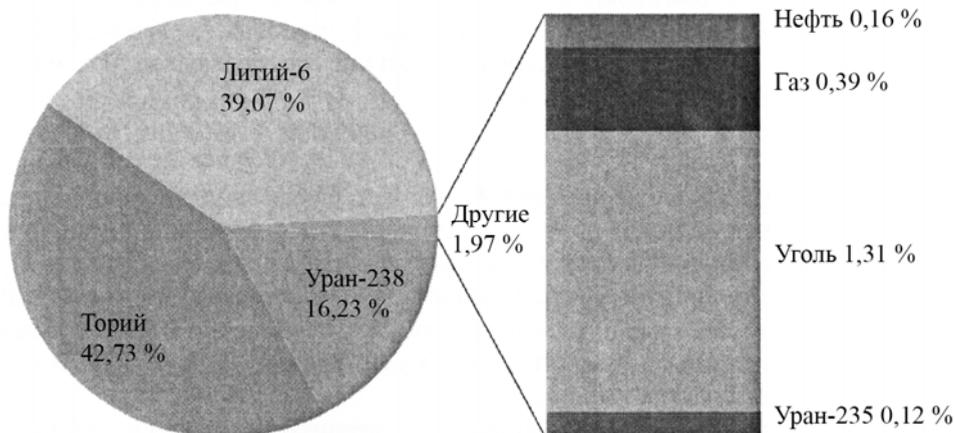


Рис. 1. Распределение ископаемых энергетических ресурсов России

целесообразность замены их использования для производства энергии производством ядерной энергии деления тяжелых ядер тория и урана и энергии синтеза изотопов водорода дейтерия и трития. Ядерное производство энергии характеризуется отсутствием химически вредных соединений и парниковых газов, но сопровождается наработкой радиоактивных продуктов ядерных реакций. Высокая ($\sim 10^6$ раз) калорийность ядерного топлива относительно углеводородов упрощает обращение с ядерным топливом, понижает топливную составляющую производства энергии, но повышает капитальные затраты при строительстве реакторов. Развитие термоядерной энергетики встретилось с большими техническими трудностями. Развитию ториевой энергетики не уделялось должного внимания. Использование ядерной энергии в оружии накладывает ряд дополнительных ограничений на ее использование в энергетике.

Впечатляющих успехов достигла ядерная энергетика (ЯЭ) на основе урана, вклад которой в полное производство электроэнергии достигал $\sim 17\%$, но понизился к настоящему времени до $\sim 11\%$. При этом использование основного в природной смеси изотопа урана ^{238}U в современной ЯЭ является крайне ограниченным, а энерговыделение осуществляется, в основном, за счет сжигания изотопа ^{235}U , удельное содержание которого в природном уране составляет только $\sim 0,7\%$. Такое состояние сложилось в связи с использованием ядерной энергии в ядерном оружии. При этом определяющим фактором явилось наличие в естественном уране изотопа ^{235}U , деление которого возможно нейтронами любой энергии. В американском и советском атомных проектах оружейный уран нарабатан путем обогащения урана изотопом ^{235}U , а оружейный плутоний нарабатан на естественном уране в созданных для этого ядерных реакторах. Нароботаны большие количества высокообогащенного урана и плутония оружейного качества. Адаптация реакторов-наработчиков плутония для производства энергии породила ЯЭ в так называемом открытом уран-плутониевом топливном цикле, которая и эксплуатируется в настоящее время. Современные ядерное оружие и ЯЭ до сих пор используют изотопы ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu и таким образом работают на первом поколении ядерных материалов.

Наряду с несомненными успехами современной ЯЭ в ней выявлены проблемы, от решения которых зависят ее дальнейшее развитие и место в обеспечении человечества энергией. В современных тепловых реакторах реакцией деления, определяющей энерговыделение, сжигается ~0,5 % добываемого урана, что ограничивает топливный ресурс ЯЭ. При этом ~10 % добываемого урана переводится в облученное ядерное топливо, являющееся высокоактивным материалом, которое накапливается и осложняет экологическую обстановку. Высокий запас реактивности современных тепловых реакторов делает их ядерно-опасными системами. Высокая (~1 % выгружаемого топлива) наработка плутония создает предпосылку распространения расщепляющегося материала для несанкционированного изготовления ядерных взрывных устройств. Таким образом, прошедшие полвека убедительно показали тупиковый путь дальнейшего развития ЯЭ на основе используемого открытого уран-плутониевого топливного цикла.

С 1950-х гг. считается, что решение этих проблем заключается в переводе ЯЭ на замкнутый уран-плутониевый топливный цикл с использованием реакторов на быстрых нейтронах. Однако, техническая реализация этой физически правильной идеи оказалась чрезвычайно трудной. Несмотря на усилия специалистов нескольких поколений и много миллиардных долларовых затрат (~100 млрд долларов), в странах с развитой ЯЭ достичь замыкания топливного цикла по плутонию до сих пор не удалось.

По нашему убеждению [2], все перечисленные выше и другие проблемы современной ЯЭ являются проблемами уран-плутониевого топливного цикла. Они могут быть кардинально решены путем использования изотопов ^{232}Th и ^{233}U в качестве реакторных материалов второго поколения и перевода ЯЭ на альтернативный замкнутый по всем актиноидам торий-уран-плутониевый топливный цикл. Начальный этап ториевой энергетики обеспечен торием, содержащимся в монацитовом концентрате в Красноуфимском районе Свердловской области. В ~80 тыс. т концентрата содержится ~5 % (~4 тыс. т) тория, который будет выделен попутно при переработке концентрата с целью выделения редкоземельных элементов. Источником нейтронов на начальном этапе ториевой энергетики могут быть нейтроны деления высокообогащенного урана, реакторного плутония и излишков оружейного плутония.

Физические предпосылки целесообразности использования замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла

В настоящее время водо-водяные реакторы с легкой водой (ВВЭР, PWR, BWR) и тяжелой водой (PHWR) являются наиболее совершенными, безопасными и распространенными в мире. Представляется естественным считать, что дальнейшее развитие ЯЭ при решении выявившихся в ней проблем целесообразно осуществлять с использованием этих реакторов, связанных с ними технологий и опыта эксплуатации.

Принципиальными условиями становления большой ЯЭ являются обеспечение расширенного воспроизводства активных изотопов и замыкание топливного цикла, что переведет ядерную энерготехнологию из разряда технологий с исчерпаемым топливным ресурсом в разряд с возобновляемым топливным ресурсом. Обеспечение расширенного воспроизводства активных изотопов с необходимостью требует рождения двух и более вторичных нейтронов на поглощенный нейтрон делящимся ядром. Только при этом условии и строжайшей экономии нейтронов возможно

одновременное удовлетворение поддержания цепной реакции деления в системе и воспроизводства выгорающих активных изотопов.

В таблице 1 приведены для ряда долгоживущих актиноидов значения [3] сечений (барн) деления σ_f , радиационного захвата нейтронов ими σ_γ их активационных интегралов I_f и I_γ и

среднего числа вторичных нейтронов на поглощенный нейтрон $\eta = \frac{\bar{\gamma} \sigma_f}{\sigma_f + \sigma_\gamma}$ при некоторых значениях энергии нейтронов, а также значения среднего числа нейтронов деления $\bar{\gamma} (0,025 \text{ эВ})$ при тепловой энергии нейтрона ($\epsilon = 0,025 \text{ эВ}$), вызывающего деление.

Таблица 1
Значения сечений (барн) деления σ_f изотопов ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , радиационного захвата нейтронов σ_γ ими, значений резонансных интегралов I_f и I_γ и чисел вторичных нейтронов на один поглощенный нейтрон η

| Изотоп | $\bar{\gamma} (0,025 \text{ эВ})$ | $\epsilon = 0,025 \text{ эВ}$ | | | $\epsilon \geq 0,5 \text{ эВ}$ | | | $\epsilon = 100 \text{ кэВ}$ | | |
|-------------------|-----------------------------------|-------------------------------|------------|--------|--------------------------------|-------|--------|------------------------------|------------|--------|
| | | σ_γ | σ_f | η | I_γ | I_f | η | σ_γ | σ_f | η |
| ^{232}Th | – | 7,37 | – | – | 85 | – | – | 0,23 | – | – |
| ^{233}U | 2,492 | 45,5 | 529,1 | 2,29 | 137 | 760 | 2,11 | 0,24 | 2,28 | 2,25 |
| ^{235}U | 2,418 | 98,3 | 582,6 | 2,07 | 144 | 275 | 1,59 | 0,37 | 1,57 | 1,96 |
| ^{239}Pu | 2,872 | 269,3 | 748,1 | 2,11 | 220 | 301 | 1,66 | 0,24 | 1,51 | 2,48 |
| ^{240}Pu | 2,9 | 289,5 | 0,056 | 0,0006 | 8100 | 8,8 | 0,003 | 0,32 | 0,05 | 0,39 |
| ^{241}Pu | 2,93 | 358,2 | 1011,1 | 2,16 | 162 | 570 | 2,28 | 0,32 | 2,13 | 2,55 |
| ^{242}Pu | 2,93 | 18,5 | <0,2 | 0,03 | 1115 | 5 | 0,013 | 0,25 | 0,015 | 0,17 |

К сожалению, следует отметить, что основные энерговыделяющие (делящиеся) в современной ЯЭ изотопы ^{235}U и ^{239}Pu в интенсивно работающей в реакторе резонансной области энергий нейтронов могут поддерживать ($\eta > 1$) протекание цепной реакции деления, но не могут обеспечить самовоспроизводства ($\eta < 2$) активно делящихся изотопов. Поэтому в уран-плутониевом топливном цикле только в реакторах с большой долей быстрых нейтронов появляется возможность самовоспроизводства изотопов ^{239}Pu и ^{241}Pu , что и безуспешно пытались реализовать в течение полувека.

Из табл. 1 видно, что только два изотопа ^{233}U и ^{241}Pu характеризуются значением $\eta > 2$ при всех энергиях первичного нейтрона. Поэтому только при использовании этих изотопов образуется достаточное количество вторичных нейтронов и для поддержания цепной реакции (деление следующего ядра) и для наработки делящегося изотопа в процессе радиационного захвата нейтрона сырьевыми изотопами (^{232}Th , ^{240}Pu), характеризующимися пороговой зависимостью сечения деления. В связи с этим естественно перенаправить усилия по реализации замкнутого уран-плутониевого топливного цикла на разработку замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла путем замены сырьевого материала ^{238}U на ^{232}Th . По сути дела, заменить при переходе от открытого топливного цикла к закрытому не тип реактора (тепловой на быстрый), а делящиеся материалы $^{238}\text{U} - ^{239}\text{Pu}$ на более подходящие для ЯЭ $^{232}\text{Th} - ^{233}\text{U}$, т. е. перейти на материалы второго поколения.

Вдохновляющим примером целесообразности исследований в этом направлении являются создание, работа и результаты переработки отработавшего оксидного торий-уранового топлива водо-водяного реактора бридера (LWBR) в Шиппигпорте. Экспериментально показаны [4] возможности:

- достижения расширенного воспроизводства ($k_B \approx 1,013$) ^{233}U в ^{232}Th – ^{233}U оксидном топливе;
- использования обычной воды в качестве теплоносителя;
- радиохимической переработки облученного топлива с выделением урана, содержащего радиологически опасный изотоп ^{232}U .

Это является экспериментальным доказательством возможности обеспечения расширенного воспроизводства ^{233}U в ^{232}Th – ^{233}U оксидном топливе в реакторах типа ВВЭР, практической реализации технологий замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла. Вместе с этим данный пример является иллюстрацией экономической эффективности торий-уран-плутониевого топливного цикла на фоне уже понесенных громадных (порядка 100 млрд долларов) затрат мировым сообществом только на отработку быстрых реакторов с жидкометаллическим теплоносителем.

Еще раньше аналогичная разработка выполнена [5] и в бывшем СССР. К 1953 г. был построен тяжеловодный реактор-наработчик изотопа ^{233}U на тории, который в этом режиме проработал по 1957 г. Было осуществлено выделение ^{233}U из облученного топлива. Вместе с этим в 1953 г. И. В. Курчатов направил письмо [5] министру среднего машиностроения СССР, в котором он не отвергал целесообразность наработки изотопа ^{233}U на тории для оружия и ЯЭ. Но в соответствии с ограниченными возможностями того времени по активным изотопам ^{235}U и ^{239}Pu предпочтение отдал наработке плутония на ^{238}U и предложил сосредоточить усилия на работе с ураном, а не с торием. К настоящему времени ситуация кардинально изменилась. ЯЭ России нарабатала большое количество реакторного плутония и высокообогащенного урана. Проблема дефицита активных изотопов урана и плутония заменилась проблемой их разумного использования.

В настоящее время следующим этапом развития ЯЭ представляется утилизация высокообогащенного урана и энергетического плутония (глубокое выжигание активных изотопов ^{235}U , ^{239}Pu и ^{241}Pu) с наработкой изотопа ^{233}U и запуска замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла с использованием реакторов типа ВВЭР с тяжелой водой, ее разбавлением легкой водой во время кампании и устранением возможности перехода реактора в надкритическое состояние. При этом на профилактическом уровне будут решены вышеперечисленные основные проблемы современной ЯЭ.

Использование природного ^{232}Th в качестве сырьевого изотопа, а нарабатываемого ^{233}U – в качестве основного делящегося изотопа, будет обуславливать основной вклад в обеспечение самовоспроизводства ^{233}U . Параллельно с делением ^{233}U нарабатывается изотоп ^{234}U , который является сырьевым изотопом для наработки ^{235}U , деление которого будет улучшать нейтронный баланс в реакторе. Этой же цели служит деление пороговых изотопов, включая ^{232}Th , быстрыми нейтронами, доля которых увеличивается при использовании тяжелой воды в качестве теплоносителя и понижении водотопливного отношения. При этом будет иметь место уменьшение поглощения нейтронов D относительно H в стандартном теплоносителе. Особо следует подчеркнуть, что из-за деления изотопа ^{233}U , предшествующего изотопу ^{235}U , понижается (относительно стандартного топлива) на порядок последовательное заселение порогово-делящихся изотопов ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu , являющихся поглотителями нейтронов и предшествующих заселению хорошо делящегося изотопа ^{239}Pu в последовательном захвате нейтронов. Это позволяет замкнуть топливный цикл не только по изотопам урана, но и по изотопам плутония.

Далее выполнены расчетно-теоретический анализ стартовых сценариев развития ториевой энергетики на основе использования высокообогащенного урана, реакторного плутония и ее эксплуатация в равновесном режиме.

Расчетная модель – ториевая ячейка реактора ВВЭР

Проведение нейтронно-физических расчетов в полном объеме для всего реактора является технически трудоемким. При исследованиях в поисковом режиме задача качественно упрощается использованием ячеечного приближения. Далее все численные оценки выполнены для ячейки водо-водяного энергетического реактора ВВЭР. За основу была принята ячейка реактора РWR, предложенная МАГАТЭ, нейтронно-физические расчеты для которой выполнены в ведущих лабораториях мира, а результаты представлены в отчете [6]. Работа проводилась в рамках программы по изучению возможности ториевого топливного цикла для сдерживания наработки энергетического плутония и уменьшения токсичности долгоживущих радиоактивных отходов ЯЭ.

Геометрия ячейки характеризуется следующими параметрами: внешний радиус топлива $R_T = 0,47$ см; внешний радиус оболочки топлива $R_{об} = 0,54$ см; внешний радиус воды $R_B = 0,85$ см. Топливо представляет смесь двуокиси тория и энергетического плутония. Средняя температура топлива $T_T = 1023$ К, а средняя температура воды $T_B = 583$ К. Удельная мощность в ячейке $P = 211$ Вт/см.

В работе [7] описаны созданная нами методика расчетов и сравнение результатов наших расчетов с результатами других авторов [6] по широкому кругу функционалов. Сравнение показало, что значения, полученные нами, находятся в пределах разброса результатов других авторов. Это позволяет надеяться на удовлетворительную точность и надежность получаемых результатов. Естественно ожидать, что замена легкой воды на тяжелую не повлияет на точность расчетов. Следует отметить, что в реальном реакторе с целью экономии нейтронов для повышения воспроизводства ^{233}U будет целесообразно использование ториевого blankets, что опускается из рассмотрения.

На рис. 2 и 3 представлены соответственно энергетические зависимости плотности потока нейтронов и групповых по энергии значений плотности потока для пяти теплоносителей (H_2O , D_2O , Na, Pb, вакуум) той же ячейки с Pu-Th оксидным топливом. По оси абсцисс указаны значения энергии (эВ) групп. Из рисунков видно следующее. При энергии $\epsilon \geq 2$ МэВ энергетические распределения нейтронов в топливе на акт деления при этих теплоносителях являются близкими. Это следствие определяющей роли замедления быстрых нейтронов спектра деления в процессах их неупругого рассеяния и ($n, 2n$) реакции на ядра тяжелых элементов.

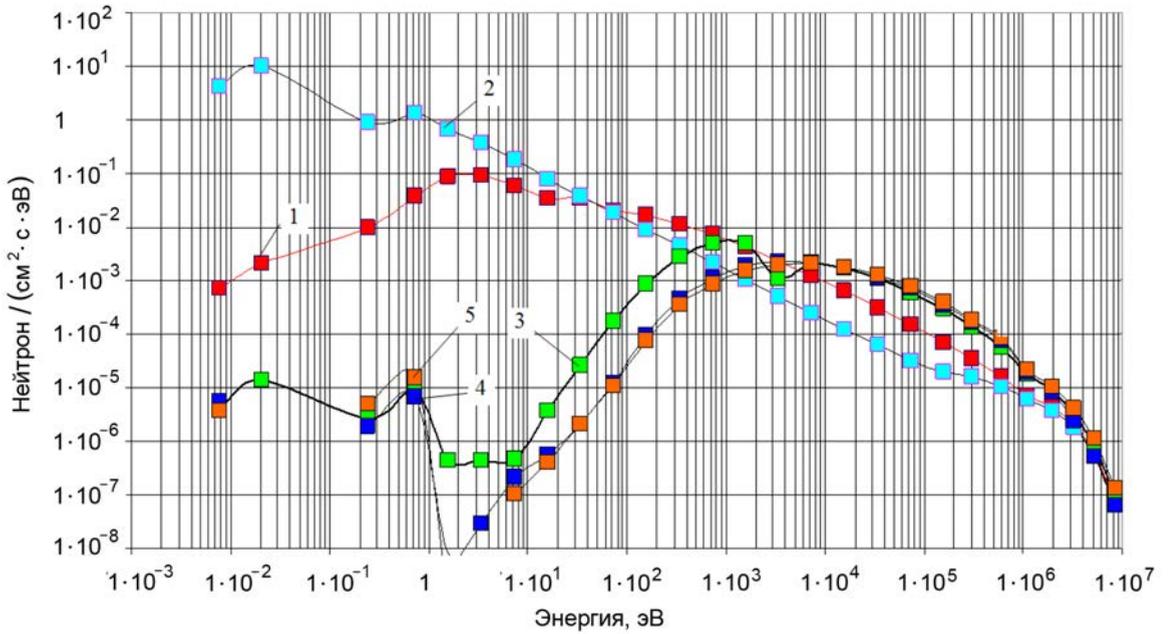


Рис. 2. Энергетическое распределение плотности потока [нейтронов/см² · с · эВ] в топливе в зависимости от теплоносителя: D₂O (1), H₂O (2), Na (3), Pb (4), вакуум (5)

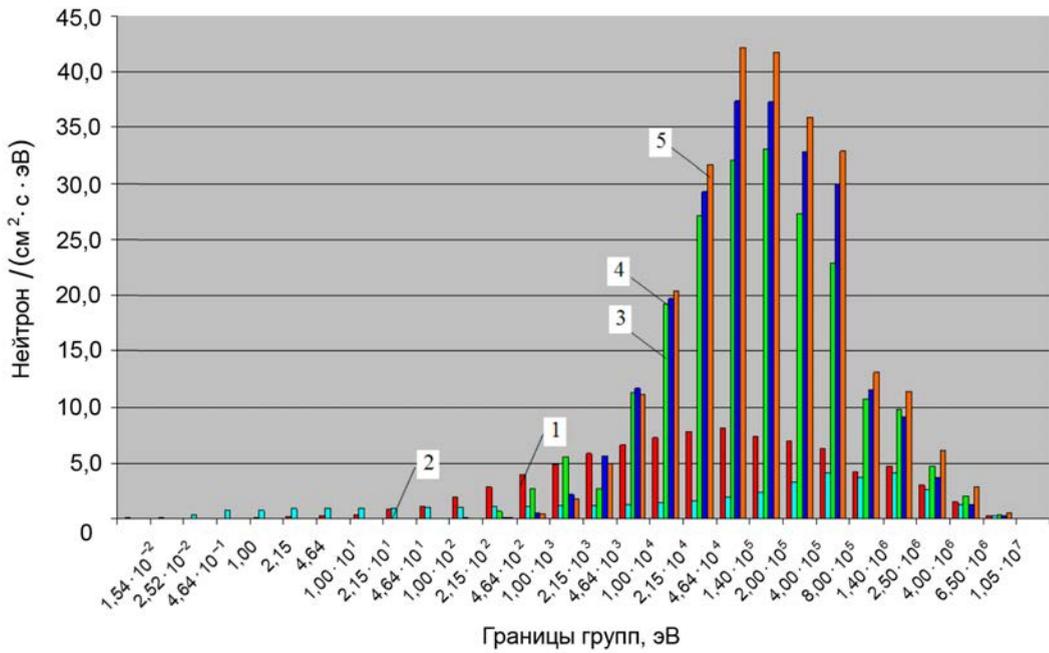


Рис. 3. Групповые значения плотности потока [нейтронов/см² · с · эВ] в топливе в зависимости от теплоносителя: D₂O (1), H₂O (2), Na (3), Pb (4), вакуум (5)

При энергии $\varepsilon \leq 2$ МэВ определяющее влияние на замедление нейтронов оказывает разница в замедляющей способности водорода, дейтерия, натрия, свинца и вакуума при ослаблении замедления в неупругом рассеянии ядрами тяжелых элементов. Значения плотности потока (или групповых потоков) нейтронов в области $100 \text{ эВ} \leq \varepsilon \leq 1 \text{ МэВ}$ при использовании тяжелой воды D_2O на акт деления тяжелых ядер существенно (до ~ 8 раз) выше, чем при использовании легкой воды. При этом в области энергий нейтронов $\varepsilon \leq 40$ МэВ ситуация обратная, и разница достигает ~ 1000 раз. Видно, что наиболее жесткий спектр имеет место для случая полной потери теплоносителя (вакуум), а использование в качестве теплоносителя Na или Pb оказывает сравнительно малое смягчение спектра.

На рис. 2 видно, что в резонансной области энергии нейтронов $1 \text{ эВ} < \varepsilon < 1000 \text{ эВ}$ плотность их потока при использовании воды любого состава в качестве теплоносителя на несколько (до 5) порядков выше, чем при использовании в качестве теплоносителя натрия или свинца. Поэтому использование в качестве теплоносителя натрия или свинца практически лишает реактор отрицательного температурного (доплеровского) коэффициента реактивности, что представляется трудновосполнимой потерей в обеспечении безопасности работы реактора.

В табл. 2 приведено удельное содержание ^{233}U в кг на тонну тяжелого металла в ^{233}U -Th оксидном топливе в критическом состоянии рассмотренной выше ячейки в зависимости от водотопливного отношения и разбавления тяжелой воды легкой. Изменение водотопливного отношения осуществляется изменением радиуса воды R_B , а разбавление тяжелой воды легкой – изменением параметра α в водяной смеси теплоносителя, описываемой выражением: $c = \alpha D_2O + (1 - \alpha) H_2O$. Изменение этих параметров обуславливает изменение энергетического распределения нейтронов в топливе и соответствующее изменение нейтронной кинетики. Из табл. 2 видно, что понижение водотопливного отношения (понижение радиуса воды R_B) сопровождается повышением удельного содержания ^{233}U кг/т в топливе, необходимого для удержания ячейки в критическом состоянии. Разбавление тяжелой воды легкой сопровождается понижением удельного содержания ^{233}U кг/т в топливе, необходимого для ее удержания в критическом состоянии при выгорании активных изотопов и наработке поглотителей нейтронов в процессе работы реактора. Таким образом, видна возможность значимого влияния водотопливного отношения и состава воды на топливную загрузку ячейки (реактора).

Таблица 2

Рассчитанные значения удельного содержания ^{233}U [кг/т] в ячейке с ^{233}U - ^{232}Th оксидным топливом в критическом состоянии в зависимости от радиуса воды R_B [см], водотопливного отношения V_B/V_T и параметра α -разбавления тяжелой воды легкой

| R_B | V_B/V_T | α | | | | | | |
|-------|-----------|----------|------|------|------|------|------|------|
| | | 1 | 0,95 | 0,90 | 0,80 | 0,75 | 0,50 | 0 |
| 0,7 | 0,898 | 72,0 | 60,3 | 50,8 | 36,7 | 31,4 | 20,8 | 16,3 |
| 0,75 | 1,226 | 63,0 | 48,9 | 38,7 | 27,3 | 24,4 | 18,2 | 15,5 |
| 0,8 | 1,577 | 56,0 | 40,0 | 30,6 | 22,4 | 20,6 | 16,6 | 15,3 |
| 0,85 | 1,95 | 45,0 | 32,5 | 25,5 | 20,0 | 18,5 | 16,0 | 15,1 |

Наиболее высокое удельное содержание изотопа ^{233}U в $^{233}\text{U}-^{232}\text{Th}$ топливе при использовании в качестве теплоносителя тяжелой воды D_2O в стартовом состоянии реактора может рассматриваться как запас реактивности системы без необходимости его компенсации поглотителями нейтронов. Подмешивание легкой воды в теплоноситель является способом реализации этого запаса реактивности для поддержания ячейки (реактора) в критическом состоянии по мере выгорания реакцией деления стартового ^{233}U и наработки поглотителей нейтронов при соблюдении эффективной экономии нейтронов. Таким образом, найден способ [8, 9] обеспечения оптимальной нейтронной кинетики и эффективного изотопного преобразования в $^{233}\text{U}-^{232}\text{Th}$ топливе водородного реактора с расширенным воспроизводством изотопа ^{233}U и сравнительно простой реализацией. Отсутствие обычно используемого запаса реактивности качественно понижает ядерную опасность реактора. Сравнительно большой период полураспада ^{233}Pa ($T_{1/2} = 27$ суток), нарабатываемого на тории в процессе радиационного захвата нейтронов, и его β^- распада с образованием изотопа ^{233}U стабилизирует работу реактора на мощности. Технологии использования воды (обычной и тяжелой) в качестве теплоносителя являются наиболее отработанными, а способность изменения ее состава в процессе кампании со значимым изменением спектра нейтронов является уникальной.

В порядке оценки скорости разбавления $\Delta\alpha/\Delta t$ отметим, что понижение $\Delta\alpha = 0,05$ соответствует понижению количества урана на ~ 13 кг/т при сохранении ячейки в критическом состоянии, а это соответствует выгоранию урана в реакторе электрической мощностью $P \cong 1$ ГВт за время $t \sim$ год. С учетом воспроизводства активных изотопов получаем оценку скорости разбавления сверху в виде: $\Delta\alpha/\Delta t \cong 5\%/365 \cdot 24 \text{ ч} \approx 6 \cdot 10^{-4} \%/ \text{ч}$, что представляется вполне решаемой задачей.

Утилизация высокообогащенного урана при переводе ядерной энергетики на замкнутый торий-уран-плутониевый топливный цикл

К настоящему времени известно одно масштабное использование оружейного урана, высокообогащенного изотопом ^{235}U (в т.ч. $^{235}\text{U}_{0,9}$, $^{238}\text{U}_{0,1}$), в ЯЭ. Это проект ВОУ-НОУ, в рамках которого 500 т российского высокообогащенного урана было разбавлено обедненным ураном, продано американцам и сожжено ими обычным образом в реакторах PWR. Вырученные средства позволили спасти нашу отрасль в тяжелые 2000-е годы, но при этом было потеряно главное качество исходного материала, обусловленное его высоким обогащением.

Нам представляется эффективным сжигание [10] высокообогащенного урана в реакторах типа ВВЭР (PWR) в смеси с торием и использованием в качестве теплоносителя тяжелой воды с разбавлением легкой водой в процессе кампании. Как выше отмечено, поддержание критического состояния реактора в процессе кампании осуществляется смягчением энергетического распределения нейтронов и соответствующим повышением реактивности выгорающего топлива. Отсутствие обычно используемого запаса реактивности и его нейтрализации выгорающими поглотителями нейтронов, а также использование тяжелой воды обеспечивают экономию нейтронов

и их эффективное использование на поддержание цепной реакции деления ядер и производство изотопа ^{233}U .

В связи с разницей в значениях критической массы шаров из ^{235}U (~47 кг) и ^{233}U (~15,6 кг) для поддержания критического состояния реактора достаточно производства в ~3 раза меньшего числа ядер ^{233}U относительно числа сгоревших ядер ^{235}U . Это означает, что количество вторичных нейтронов, образующихся при делении ядер ^{235}U , может быть достаточным и для деления следующих ядер, и для поддержания критического состояния реактора при использовании тория в качестве сырьевого изотопа и наработки изотопа ^{233}U . Деление нарабатываемых ядер ^{233}U нейтронами любой энергии сопровождается образованием более двух вторичных нейтронов на поглощенный нейтрон и соответственно может обеспечить расширенное воспроизводство [8, 9] ^{233}U . Дополнительным источником нейтронов является деление пороговых изотопов ^{232}Th , ^{234}U , ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu , ^{240}Pu быстрыми нейтронами.

На рис. 4–6 приведено изменение удельного содержания изотопов топлива в течение 44 лет облучения при удельной мощности ячейки 211 Вт/см, радиуса воды $R_b = 0,8$ см и использования тяжелой воды на старте каждой кампании в режиме четырехлетних кампаний с замыканием по всем долгоживущим актиноидам. Нейтронная кинетика и изотопное преобразование первой кампании оказались такими, что падение реактивности топлива при выгорании ^{235}U и наработке поглотителей нейтронов с избытком компенсировалось ее повышением (без осколков деления) при наработке изотопа ^{233}U . Оказалось, что для стартовой загрузки второй кампании в критическом состоянии ($K_\infty = 1$) при использовании тяжелой воды на старте достаточно использования 99 % актиноидов отработавшего топлива первой кампании и добавления тория до тонны тяжелого металла. Однако, начиная с третьей кампании, для обеспечения критического состояния ($K_\infty = 1$) в стартовом состоянии последующей кампании оказалось необходимым добавление 7~5 кг/т обогащенного урана к актиноидам, извлекаемым из отработавшего топлива предыдущей кампании.

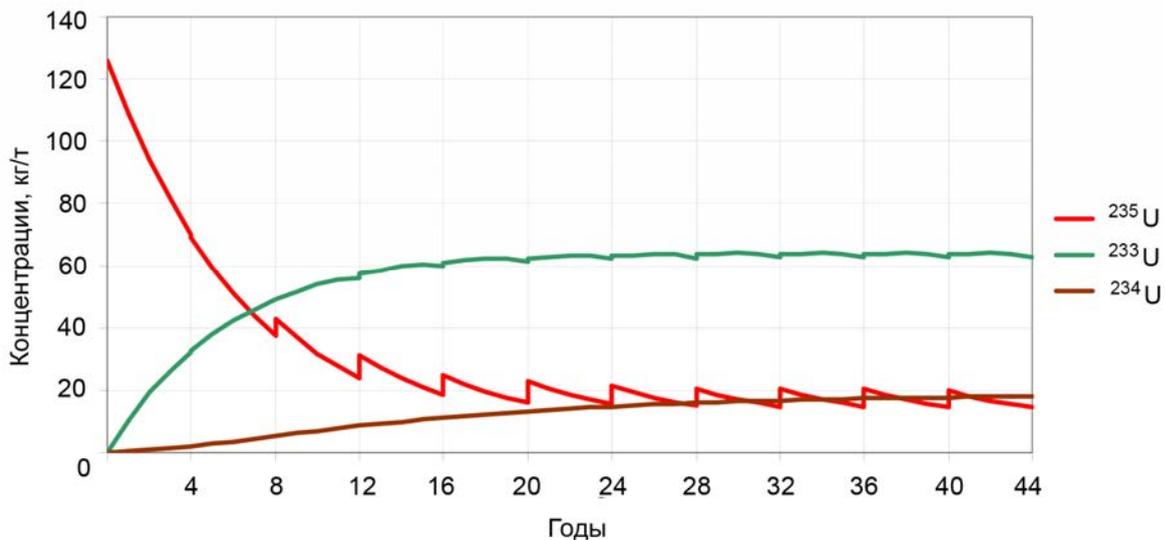


Рис. 4. Временная зависимость изменения удельного содержания ^{235}U , ^{233}U , ^{234}U в топливе

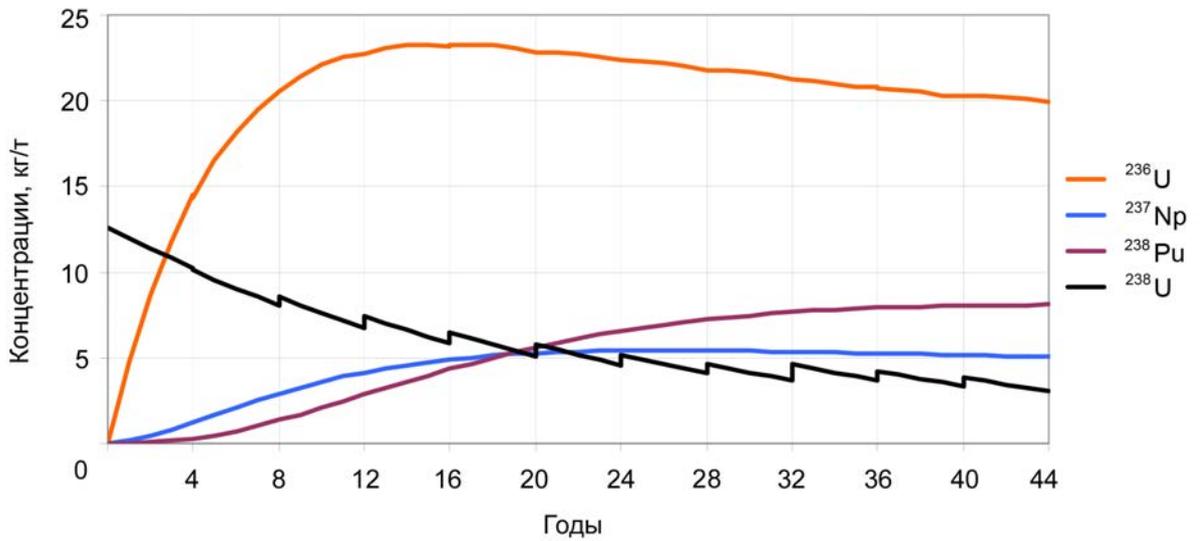


Рис. 5. Временная зависимость изменения удельного содержания ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu и ^{238}U в топливе

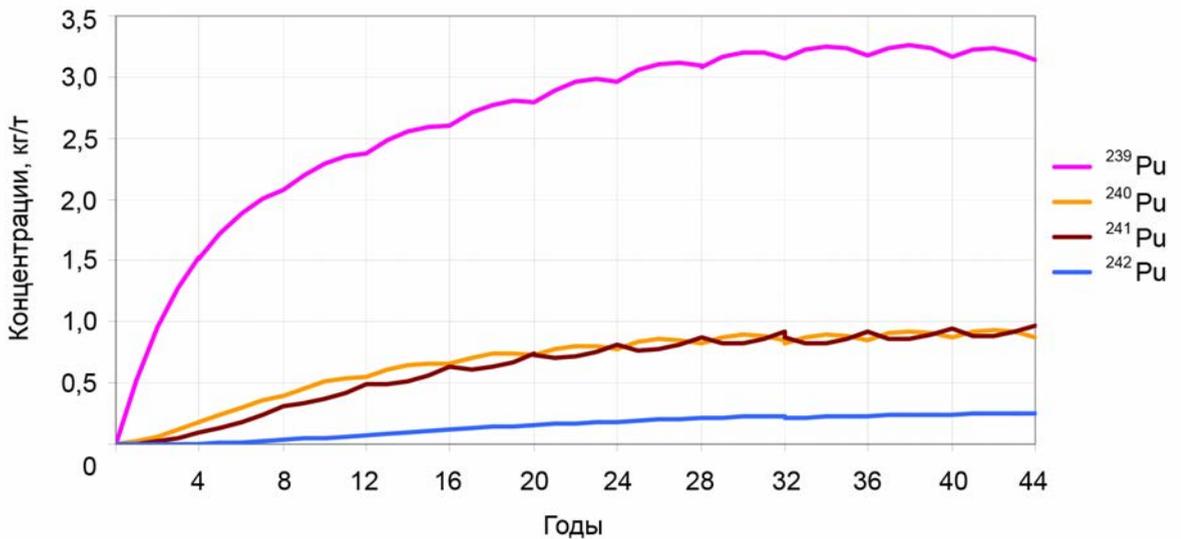


Рис. 6. Временная зависимость изменения удельного содержания ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu и ^{242}Pu в топливе

Как показано на рис. 4–6, картину изотопного преобразования можно условно разделить на три группы. Первая, наиболее интенсивно меняющаяся, группа, представлена на рис. 4 и связана с нейтронами деления стартового изотопа ^{235}U и нарабатываемого ^{233}U , их превалирующего поглощения ^{232}Th (из-за его большого содержания), наработки изотопа ^{233}U , деления ^{233}U и радиационного захвата нейтронов им с наработкой ^{234}U , последующего захвата нейтронов ^{234}U и наработкой исходного изотопа ^{235}U . Этот «укороченный замкнутый цикл» интенсивно работает на протяжении всех кампаний и в каждой кампании, в основном, определяет энерговыделение, нейтронную кинетику и изотопное преобразование в топливе.

Вторая группа представлена на рис. 5 и связана с радиационным захватом нейтронов изотопом ^{235}U с наработкой ^{236}U и последующей наработкой изотопов ^{237}Np , ^{238}Pu в последовательных захватах нейтронов. Нарботка этих изотопов идет наиболее интенсивно в процессе первых кампаний в связи со значимым содержанием ^{235}U в первоначальной загрузке, выходит на насыщение и затем понижается по мере выгорания ^{235}U . Отсутствие активных изотопов в этой группе определяет ее в качестве основной поглощающей нейтроны группы. Она является переходной областью между парами активных изотопов ^{233}U , ^{235}U и ^{239}Pu , ^{241}Pu . Интенсивность поглощения нейтронов в ней на порядок ниже при использовании ^{233}U вместо ^{235}U в топливе, что и является одним из главных преимуществ использования ^{232}Th относительно ^{238}U в качестве сырьевого изотопа.

Третья группа представлена на рис. 6 и связана с изотопами плутония.

Конечно, в первых кампаниях наработка ^{239}Pu происходит на ^{238}U исходной стартовой загрузки. По мере наработки ^{238}Pu на ^{237}Np дополнительно возрастает на нем наработка ^{239}Pu . Деление ^{239}Pu нейтронами любой энергии понижает его содержание и наработку ^{240}Pu и последующих изотопов и элементов. Аналогичная ситуация имеет место с парой ^{241}Pu и ^{242}Pu . Нетрудно увидеть сравнительно низкую интенсивность наработки, изотопного преобразования и соответственно второстепенную роль плутония в энерговыделении в таком топливе. При этом процесс деления ядер плутония ограничивает наработку ядер америция, кюрия и изотопов более тяжелых элементов. Из рис. 6 видно, что использование в стартовой топливной композиции урана с более высоким обогащением изотопом ^{235}U будет сопровождаться соответствующим понижением наработки изотопов плутония и более тяжелых элементов.

Итак, на рис. 4–6 представлена подробная картина преобразования изотопного состава при рециклировании топлива в одиннадцати последовательных кампаниях со стартовой загрузкой высокообогащенного урана и тория и подпиткой топлива высокообогащенным ураном по мере необходимости. Видно, что в рассмотренном сценарии обеспечивается глубокая утилизация обогащенного урана с тенденцией выхода на замкнутый торий-уран-плутониевый топливный цикл, в котором основным энерговыделяющим изотопом является ^{233}U . Просматривается возможность самообеспечения топлива активными изотопами и самоограничения актиноидного состава изотопами плутония.

В табл. 3 приведен материальный баланс [кг/т], реализованный в 11 последовательных кампаниях на тонну тяжелого металла в оксидном торий-уран-плутониевом топливе.

Таблица 3

Изотопный материальный баланс в топливе [кг/т] после 11 последовательных кампаний

| Изотоп | ^{235}U | ^{238}U | ^{232}Th | ^{233}U | Остальные |
|-------------------|------------------|------------------|-------------------|------------------|-----------|
| Старт | 126 | 12,6 | 861,4 | 0 | 0 |
| Финиш | 14,6 | 3,06 | 808 | 62,6 | 56,74 |
| Добавлено | 52,2 | 5,14 | 483,7 | 0 | 0 |
| Разделилось | 145,7 | 0,321 | 11,01 | 403,2 | 35,8 |
| Всего разделилось | 596 | | | | |

Видно следующее. Израсходовано на стартах 11 кампаний 178,2 кг/т изотопа ^{235}U , из них разделилось 145,7 кг/т, осталось в отработавшем топливе 14,6 кг/т и 17,9 кг/т испытало радиационный захват нейтронов. Из израсходованных 17,7 кг/т изотопа ^{238}U осталось в отработавшем то-

пливе 3,06 кг/т, разделилось 0,321 кг/т и 14,36 кг/т испытало радиационный захват нейтронов. Израсходовано на стартах кампаний 1345,1 кг/т тория, из них непосредственно разделилось 11,01 кг/т, осталось в отработавшем топливе 808 кг/т и 526,1 кг/т испытало радиационный захват нейтронов.

В 11 последовательных кампаниях нарабатывались и выгорали изотопы протактиния, урана, нептуния и плутония, в т. ч. наработалось и разделилось 403,2 кг/т изотопа ^{233}U , что составляет ~68 % от полного числа разделившихся ядер. При этом в отработавшем топливе еще осталось 62,6 кг/т этого изотопа, что обеспечивает высокие делительные свойства облученного топлива. В 11 последовательных кампаниях разделилось 145,7 кг/т изотопа ^{235}U , что составляет только ~24 % от полного числа разделившихся ядер. В отработавшем топливе осталось 56,74 кг/т остальных актиноидных изотопов, суммарный вклад которых в деление составил 35,8 кг/т, что составляет ~6 % от полного числа разделившихся ядер. Вклад в деление непосредственно стартового изотопа ^{232}Th находится на уровне ~2 %. При дальнейшем рециклировании будут возрастать доли делений стартового изотопа ^{232}Th и нарабатываемого изотопа ^{233}U .

Всего разделилось 596 кг/т тяжелых ядер. В отработавшем топливе содержится 62,6 кг/т изотопа ^{233}U , 14,6 кг/т изотопа ^{235}U , 3,2 кг/т изотопа ^{239}Pu и 0,95 кг/т изотопа ^{241}Pu . Отработавшее после 11 последовательных кампаний топливо по своим делительным характеристикам не уступает стартовому топливу. При дальнейшем рециклировании топлива в нем продолжится понижение удельного содержания поглотителей нейтронов ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu и ^{238}U , а делительные свойства будут улучшаться.

В табл. 4 приведены удельное содержание ^{233}U в кг на тонну тяжелого металла в ^{233}U -Th оксидном топливе в критическом состоянии рассмотренной выше ячейки в зависимости от α -разбавления тяжелой воды легкой водой и значение K_∞ при потере в ней 90 % теплоносителя. Видно, что в ячейке с внешним радиусом воды 0,8 см для достижения критичности достаточно 56 кг/т изотопа ^{233}U , а потеря 90 % теплоносителя переводит такую ячейку в подкритическое состояние с $K_\infty = 0,78$. Это означает, что рассмотренная выше утилизация высокообогащенного урана с торием при наработке изотопа ^{233}U , равной 62,6 кг/т, позволяет выйти на самообеспечивающийся топливом замкнутый по актиноидам торий-уран-плутониевый топливный цикл. При этом на всех стадиях этого перехода ячейка характеризуется отрицательным значением пустотного коэффициента реактивности.

Таблица 4

Удельное содержание ^{233}U в кг на тонну тяжелого металла в ^{233}U -Th оксидном топливе в критическом состоянии рассмотренной выше ячейки в зависимости от α -разбавления тяжелой воды легкой и значение K_∞ при потере в ней 90 % теплоносителя

| | | | | | | | |
|----------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| α | 1 | 0,95 | 0,9 | 0,8 | 0,75 | 0,5 | 0 |
| N | 56 | 40 | 30,6 | 22,4 | 20,6 | 16,6 | 15,1 |
| $K_\infty (C \cdot 10 \%)$ | 0,780 | 0,636 | 0,546 | 0,489 | 0,474 | 0,503 | 0,610 |

В работе [11] рассмотрен способ совместной утилизации энергетического плутония и высокообогащенного урана в оксидном торий-уран-плутониевом топливе (трехтвэльная ячейка) водородного реактора с изменяющимся составом (D_2O , H_2O) воды, характеризующийся эффективной наработкой изотопа ^{233}U , безопасной работой реактора и сравнительно простой реализацией.

В обоих типах твэлов в нарабатываемом уране наряду с ^{233}U на ^{232}Th нарабатывается и ^{232}U , радиоактивный ряд которого представляет серьезную [12] радиологическую опасность. Нароботка ^{232}U осуществляется, в основном ($n, 2n$)-реакцией ^{232}Th и последующем радиационном захвате нейтронов ^{231}Pa . В реакторах с тесной решеткой содержание ^{232}U в ^{233}U может достигать $\sim 0,2\%$ и более. Это представляется серьезным технологическим барьером на пути хищений таким образом наработанного ^{233}U . Однако, в заводских условиях эти трудности могут быть преодолены. В рециклируемом тории, как следствие распада ^{232}U , появляется изотоп ^{228}Th , что осложняет обращение с торием. Однако, удельное содержание ($\leq 10^{-6}$) ^{228}Th в тории ^{232}Th хотя и осложняет работы по его использованию при изготовлении топлива, но представляется препятствием преодолимым. После первой кампании высокообогащенный уран теряет свое оружейное качество из-за нарабатываемых четных изотопов урана, в т. ч. ^{232}U . Повышение доли четных изотопов плутония в плутониевых твэлах понижает привлекательность плутония для изготовления взрывных устройств. При наличии возможности совместного выделения урана и плутония и использования этой смеси для изготовления свежего топлива нарабатываемый ^{232}U будет ее технологической защитой.

Смена целевой задачи расширенного воспроизводства активных изотопов на задачу повышения длительности кампании изучалась с использованием доступного материала в виде высокообогащенного урана ($^{235}\text{U}_{0,9}$ $^{238}\text{U}_{0,1}$) внешнего радиуса ячейки 0,80 см, для заявленной мощности 211 Вт/см и для в 2 раза пониженной (105,5 Вт/см) мощности. При этом критическое состояние ($K_{\infty} = 1$) ячейки поддерживалось разбавлением тяжелой воды легкой H_2O в соответствии с выражением $C = ((1-\alpha)\text{H}_2\text{O} + \alpha\text{D}_2\text{O})$ и понижением α от единицы до 0,5, что обеспечивает возможность 11 лет непрерывной работы реактора на мощности 211 Вт/см и 24 года при в 2 раза пониженной (105,5 Вт/см) мощности.

Детальную картину изотопного преобразования, начиная с ^{233}U , при облучении в течение 11 лет можно увидеть на рис. 7, где опущены наработка осколков деления и выгорание тория. На рисунке видно следующее. Содержание изотопа ^{233}U достигает максимального значения при времени работы реактора $T \approx 8$ лет и начинает уменьшаться с дальнейшим ростом времени облучения. Содержание изотопа ^{235}U замедляет падение с ростом времени облучения, но продолжает падать. До $T \approx 7$ лет происходят рост содержания изотопа ^{239}Pu , нарабатываемого на ^{238}U , и его уменьшение при дальнейшем продолжении облучения. Это говорит о том, что после $T \approx 8$ лет облучения выгорание активных изотопов становится превалирующим процессом относительно их наработки, а наработка поглотителей нейтронов ограничивает воспроизводство активных изотопов. В течение всего времени облучения наблюдается рост чисел поглощающих нейтроны изотопов ^{234}U , ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu , ^{240}Pu , ^{242}Pu . При этом следует обратить внимание на рост чисел изотопов ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu , нарабатываемых на ^{235}U , поглощающих нейтроны и предшествующих делящемуся нейтронами любой энергии изотопу ^{239}Pu , что качественно ухудшает нейтронный баланс.

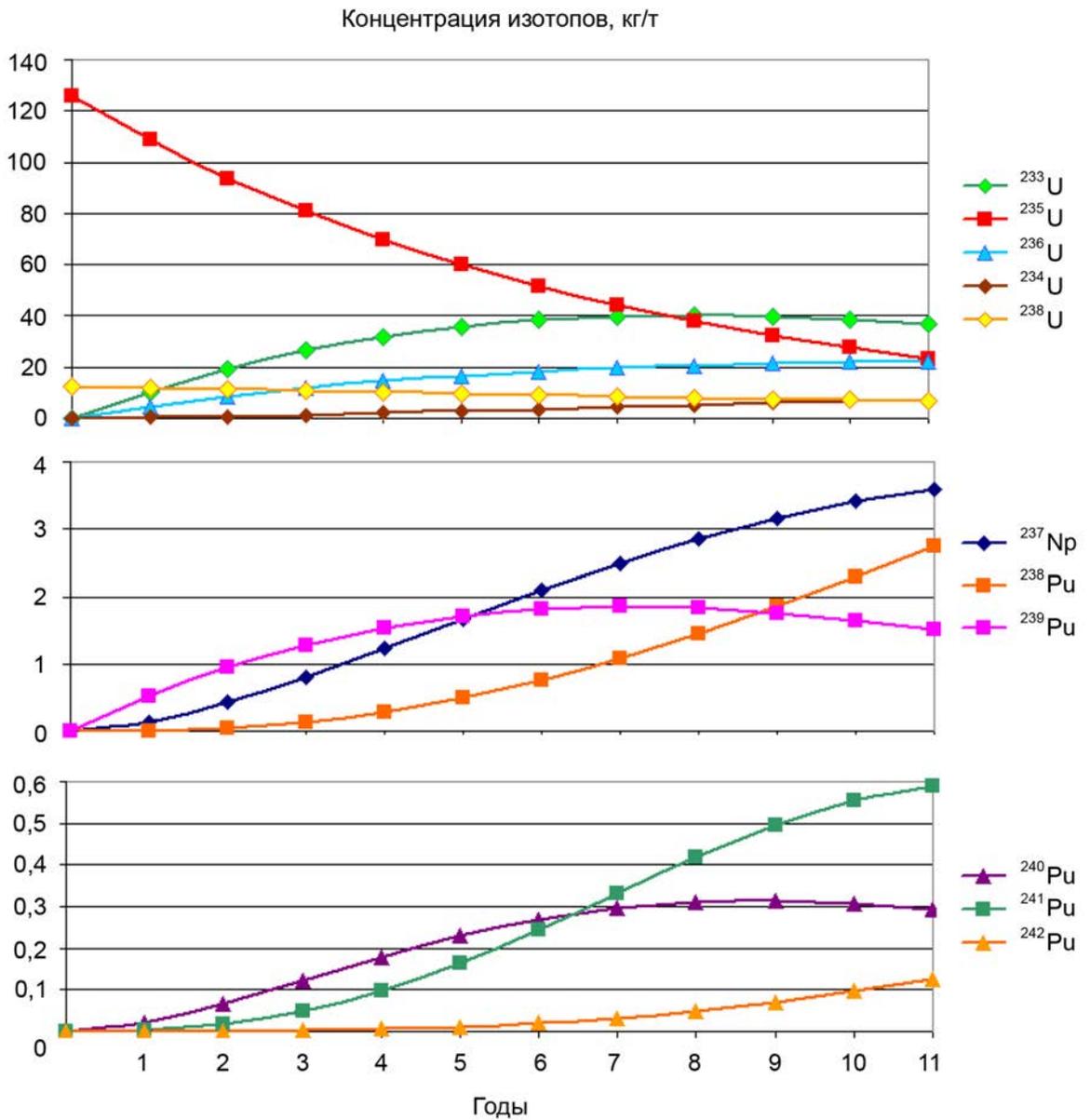


Рис. 7. Временная зависимость изменения изотопного состава в топливе при удельной мощности ячейки 211 Вт/см

На рис. 8 приведена временная зависимость изменения удельного значения (кг/т) изотопного состава топлива при удельной мощности ячейки 105,5 Вт/см. Комментарии к рис. 8 аналогичны соответствующим комментариям к рис. 7.

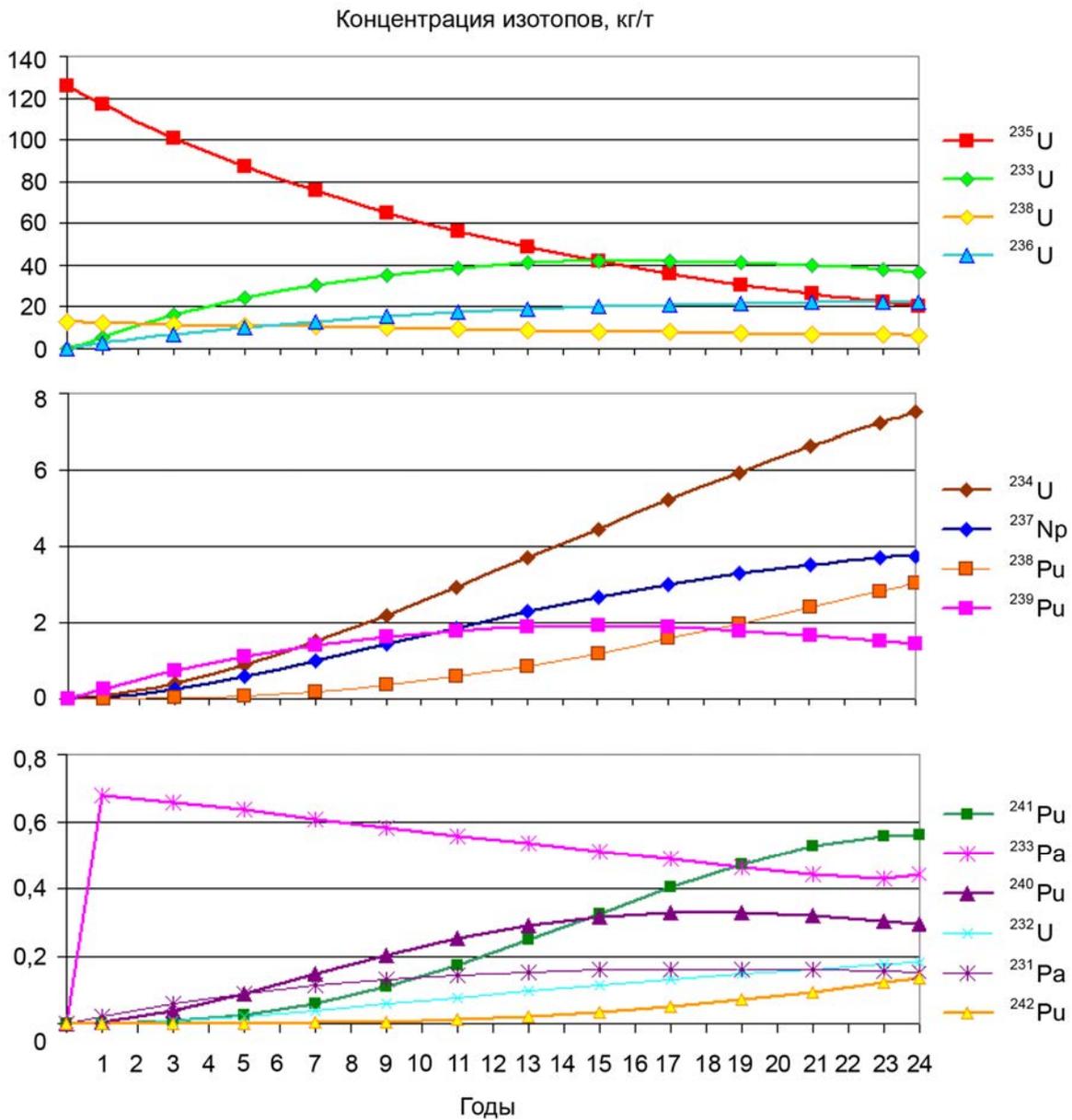


Рис. 8. Временная зависимость изменения изотопного состава в топливе при удельной мощности ячейки 105,5 Вт/см

В табл. 5 приведена зависимость параметра α от времени облучения 11 лет при удельной мощности 211 Вт/см и 24 лет при удельной мощности 105,5 Вт/см. Виден разный уровень требуемой скорости разбавления тяжелой воды легкой для поддержания критического состояния.

Продление времени кампании с 3 лет до 11 при удельной мощности ячейки 211 Вт/см и до 24 лет при удельной мощности ячейки 105,5 Вт/см, а также возможность обеспечения глубокого выгорания (~90 %) стартового изотопа ^{235}U и эффективной наработки (~40 кг/т) изотопа ^{233}U являются техническим результатом патента [13].

Таблица 5

Зависимость скорости разбавления тяжелой воды легкой (параметра α) для поддержания критического состояния от времени облучения при двух значениях удельной мощности

| Год облучения топлива | α | |
|-----------------------|-----------------|------------------|
| | кампания 11 лет | кампания 24 года |
| 0 | 1 | 1 |
| 1 | 0,985 | 0,995 |
| 2 | 0,950 | 0,985 |
| 3 | 0,925 | 0,975 |
| 4 | 0,890 | 0,964 |
| 5 | 0,855 | 0,953 |
| 6 | 0,8125 | 0,939 |
| 7 | 0,770 | 0,925 |
| 8 | 0,710 | 0,910 |
| 9 | 0,650 | 0,895 |
| 10 | 0,575 | 0,885 |
| 11 | 0,5 | 0,860 |
| 12 | | 0,840 |
| 13 | | 0,820 |
| 14 | | 0,795 |
| 15 | | 0,770 |
| 16 | | 0,745 |
| 17 | | 0,720 |
| 18 | | 0,687 |
| 19 | | 0,655 |
| 20 | | 0,620 |
| 21 | | 0,585 |
| 22 | | 0,550 |
| 23 | | 0,520 |
| 24 | | 0,5 |

Изобретение может найти практическое применение в ряде специальных случаев.

Равновесный изотопный состав торий-уран-плутониевого топливного цикла

Расширенное воспроизводство активных изотопов естественно может сопровождаться выходом на равновесный изотопный состав при рециклировании топлива. По-видимому, наиболее представительным будет рассмотрение выхода в равновесие при стартовой загрузке реактора оксидным ^{233}U -Th топливом. В работе [14] это выполнено для ячейки с водотопливным отношением $V_{\text{в}}/V_{\text{т}} = 0,9$ ($R_{\text{в}} = 0,70$ см), а в работах [15, 16] – с водотопливным отношением $V_{\text{в}}/V_{\text{т}} = 1,23$ ($R_{\text{в}} = 0,75$ см).

На рис. 9 приведено изменение удельного содержания [16] наиболее важных актиноидов при рециклировании оксидного $^{233}\text{U}-\text{Th}$ топлива в десяти последовательных кампаниях для ячейки с радиусом воды, равным $R_b = 0,75$ см (водотопливным отношением $V_b/V_T = 1,23$).

Наибольшему изменению удельного содержания как в процессе каждой кампании (62–56,5 кг/т), так и между кампаниями (стартовое удельное содержание изотопа ^{232}Th в первой кампании равно 937 кг/т, а в десятой кампании равно 897 кг/т), подвергается торий. Его выгорание в качестве сырьевого материала обеспечивает наработку и воспроизводство основного делящегося изотопа ^{233}U и последующих изотопов в процессе каждой кампании. К остающемуся после каждой кампании торию и нарабатываемым актиноидам на старте последующей кампании добавляется необходимое для дальнейшего рециклирования количество сырьевого тория.

Обеспечение критического состояния на старте первой кампании потребовало 63 кг/т изотопа ^{233}U , что на 9 кг/т меньше, чем для ячейки с радиусом воды, равным $R_b = 0,70$ см [14]. Как и в предыдущих [14] расчетах (с $R_b = 0,70$ см), в начале каждой кампании наблюдается понижение содержания ^{233}U , обусловленное выгоранием и задержкой его наработки из-за сравнительно большого периода полураспада ^{233}Pa , равного ~ 27 суток. Затем наработка ^{233}U превышает его выгорание в течение \sim трех лет облучения. Однако в течение \sim четвертого года облучения в первой и последующих кампаниях в отличие от ячейки с $R_b = 0,70$ см наблюдается превышение выгорания над наработкой для ячейки с $R_b = 0,75$ см. Таким образом, в настоящих расчетах происходит понижение воспроизводства ^{233}U относительно предыдущих расчетов [14]. Следует отметить, что после окончания каждой кампании в облученном топливе содержится $\sim 1,5$ кг/т изотопа ^{233}Pa , который распадается в ^{233}U , и в расчетах он добавляется к ^{233}U при загрузке последующей кампании. При этом к извлеченному актиноидному составу топлива после первой кампании для обеспечения критического состояния на старте второй кампании потребовалось добавить $\sim 2,2$ кг/т изотопа ^{233}U . Начиная с пятой кампании нарабатываемое количество и состав актиноидов (с учетом распада ^{233}Pa в ^{233}U) превышают на 1–2,5 % их необходимое количество для достижения критического состояния при загрузке для последующей кампании. После четвертой кампании изменение удельного содержания ^{233}U практически повторяется в последующих кампаниях. Таким образом, на старте первой кампании загружается ~ 63 кг/т ^{233}U , на старте второй кампании расходуется $64,4 + 2,2 = 66,6$ кг/т ^{233}U . На финише десятой кампании его содержание в топливе составляет $68,7 + 1,4 = 70,1$ кг/т. При этом извлекается при переработках топлива после пятой и последующих кампаний дополнительное количество ^{233}U в смеси с другими актиноидами.

Удельное содержание ^{234}U и более тяжелых долгоживущих изотопов и элементов растет с увеличением числа кампаний до достижения соответствующих равновесных значений. Далее будут приведены результаты оценок равновесных значений этих изотопов и элементов и времен выхода на них.

Результаты расчетов, начиная с пятой кампании (см. рис. 9), показывают практически постоянное содержание изотопа ^{233}U (~ 68 кг/т) в топливе стартовых композиций при увеличении содержания нарабатываемых более тяжелых изотопов и элементов за счет выгорания ^{232}Th . Это позволяет оценить равновесное содержание нарабатываемых изотопов (более тяжелых, чем ^{233}U) в рециклируемом топливе для каждого более тяжелого изотопа, используя систему уравнений изотопной кинетики при следующих условиях:

- равенство нулю скорости изменения содержания изотопов, начиная с ^{233}U ;
- фиксированное начальное содержание ^{233}U , равное 68 кг/т;

– скорости реакций деления ядер и радиационного захвата нейтронов ими приняты равными значениям на старте (на финише) десятой кампании.

При этом система дифференциальных уравнений превратилась в систему алгебраических уравнений относительно равновесных значений изотопов и элементов тяжелее ^{233}U , заселяемых в соответствии с непрерывным облучением нейтронами.

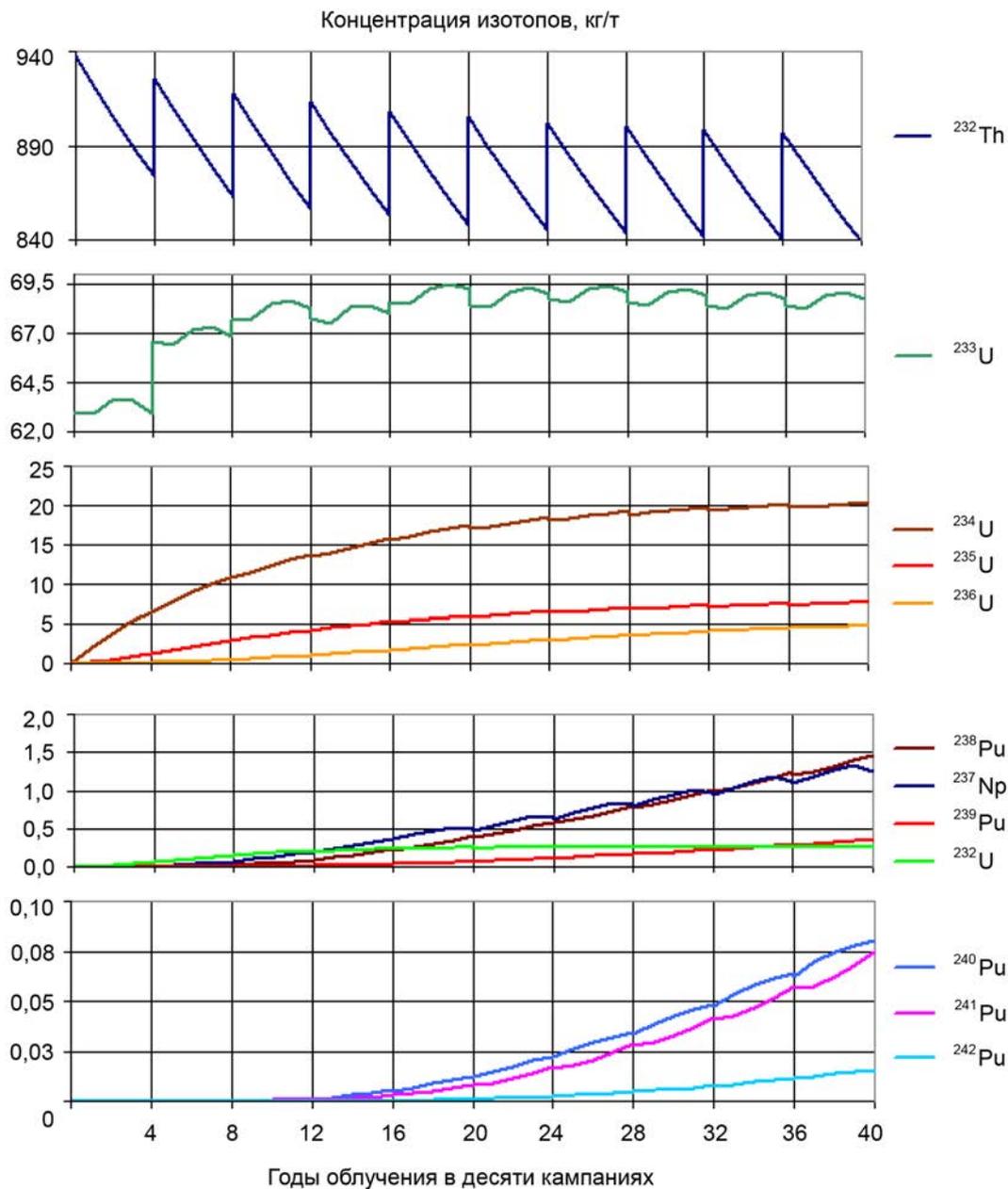


Рис. 9. Изотопное преобразование в десяти последовательных кампаниях

Во втором столбце табл. 6 приведены равновесные значения (кг/т) долгоживущих изотопов, полученные с использованием значений скоростей реакций, соответствующих старту десятой кампании. В порядке оценки влияния разбавления тяжелой воды легкой на полученные значения расчет повторен с использованием значений скоростей реакций, соответствующих концу десятой кампании. Результаты этого расчета приведены в третьем столбце табл. 6. В соответствии с изменением скоростей реакций деления ядер и радиационного захвата нейтронов ими в процессе кампаний в качестве равновесных значений для каждого изотопа следует принимать промежуточные значения между значениями второго и третьего столбцов. Полученные значения равновесных значений долгоживущих изотопов являются оценкой сверху, потому что при ее проведении содержание всех изотопов, кроме ^{233}U , непрерывно возрастало с увеличением времени облучения. В расчетах изменения изотопного содержания в десяти последовательных кампаниях содержание всех изотопов понижалось на 1–2,5 % после каждой кампании, что соответствует принятому регламенту рециклирования топлива.

Значения времен подхода к этим равновесным значениям приведены в последующих столбцах табл. 6 и получены следующим способом. Решалась система дифференциальных уравнений относительно скоростей изменения изотопного состава с использованием значений скоростей реакций, соответствующих старту десятой кампании, с начальным (при $t = 0$) условием содержания ^{233}U , принятого равным 68 кг на тонну тяжелого металла. Для каждого изотопа определялись значения времен, при которых его содержание на 5; 1; 0,1 % ниже равновесного.

Следует отметить, что выявленные ранее [14] закономерности и особенности в значениях равновесных значений и времен подхода к ним сохраняются и при увеличении водотопливного отношения.

Таблица 6

Оценка равновесных значений [кг/т] и продолжительности облучения [годы] для достижения содержания на 5; 1; 0,1 % ниже равновесных значений долгоживущих изотопов с использованием скоростей реакций из десятой кампании и содержания ^{233}U , принятого равным 68 кг на тонну тяжелого металла

| Изотоп | Содержание в равновесном состоянии | | Годы достижения равновесного состояния с отклонением | | |
|-------------------|--|---|--|-------|-------|
| | скорости реакций взяты в начале десятой кампании | скорости реакций взяты в конце десятой кампании | 5 % | 1 % | 0,1 % |
| ^{244}Cm | 0,07039 | 0,07408 | 137,7 | 171,9 | 219,0 |
| ^{243}Am | 0,08024 | 0,08498 | 131,9 | 166,0 | 213,2 |
| ^{242}Pu | 0,11733 | 0,09874 | 125,5 | 159,5 | 206,6 |
| ^{242}Cm | 0,0089 | 0,00909 | 122,5 | 156,4 | 203,5 |
| ^{241}Pu | 0,30267 | 0,3191 | 116,1 | 149,8 | 196,8 |
| ^{241}Am | 0,07479 | 0,06955 | 121,9 | 155,7 | 202,8 |
| ^{240}Pu | 0,42482 | 0,26723 | 112,4 | 146,1 | 193,2 |
| ^{239}Pu | 1,07286 | 1,05619 | 105,7 | 139,0 | 185,9 |
| ^{238}U | 0,01405 | 0,0145 | 99,6 | 133,3 | 180,3 |
| ^{238}Pu | 3,30856 | 3,71721 | 100,4 | 133,6 | 180,5 |
| ^{237}Np | 2,09228 | 2,27407 | 86,7 | 119,1 | 165,4 |
| ^{236}U | 6,73265 | 7,16813 | 80,3 | 112,6 | 159,0 |
| ^{235}U | 7,64164 | 8,30371 | 50,0 | 78,2 | 124,2 |
| ^{234}U | 20,70219 | 21,32126 | 43,2 | 71,6 | 117,8 |

Несмотря на относительную малость вероятности радиационного захвата нейтронов изотопом ^{233}U , наибольшую вероятность его деления и высокую вероятность радиационного захвата нейтронов нарабатываемым ^{234}U , со временем накапливается значительное количество ^{234}U , которое и определяет накопление более тяжелых изотопов и элементов.

Равновесное значение ^{235}U на порядок меньше содержания основного делящегося изотопа ^{233}U , что определяется его наработкой при поглощении нейтронов ^{234}U и выгоранием в процессах деления и радиационного захвата нейтронов ^{235}U . Время выхода ^{235}U на равновесное значение значительно дольше, чем аналогичного выхода для ^{234}U . Следует отметить, что деление ^{235}U понижает вероятность радиационного захвата нейтронов ^{235}U и последующими изотопами и сопровождается значимым улучшением нейтронного баланса в активной зоне.

Относительно большое количество ^{236}U обуславливается сравнительно высокой вероятностью радиационного захвата нейтронов ^{235}U относительно вероятности радиационного захвата нейтронов самим ^{236}U . Это же обуславливает значительное повышение времени выхода на равновесное значение для ^{236}U .

Сравнительно низкое содержание ^{237}Np и высокое содержание ^{238}Pu обусловлены, соответственно, высоким и низким значениями сечений радиационного захвата нейтронов ими. Имеет место дальнейшее увеличение времен выхода на их равновесные значения.

Низкое значение сечения радиационного захвата нейтронов ^{238}Pu , сравнительно высокая относительная вероятность деления ^{239}Pu сопровождаются уменьшением его равновесного значения и дальнейшим увеличением времени выхода на его равновесное значение.

Деление изотопов ^{239}Pu , ^{241}Pu нейтронами всех энергий дополнительно повышает глубину трансмутации выгоревшего тория процессом деления, понижает их содержание и содержание последующих изотопов плутония, америция, кюрия. При этом увеличиваются времена их выхода на равновесные значения.

Следует отметить низкий уровень наработки изотопов америция, кюрия и более тяжелых элементов, обусловленный заселением в последовательном захвате нейтронов и выгоранием реакцией деления изотопов урана, нептуния, плутония, особенно беспороговоделющихся ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu .

В порядке проверки устойчивости изотопного преобразования и нейтронной кинетики равновесного торий-уран-плутониевого топливного цикла выполнен расчет топливной кампании с использованием вышеполученных равновесных значений (второй и третий столбцы табл. 6) актиноидов в качестве стартовых топливных загрузок. При этом использовалось разбавление тяжелой воды легкой (набор значений α и скоростей реакций), как в десятой кампании. Оказалось, что при использовании равновесных значений второго столбца табл. 6 для обеспечения критического состояния достаточно 99,5 % актиноидов равновесного состава, а при использовании третьего столбца – 99 %. Это иллюстрирует возможность замыкания по всем актиноидам и в равновесном изотопном составе.

В табл. 7 приведено изменение изотопного состава в процессе четырехлетней кампании. Видно, что для подавляющего числа изотопов наблюдаются практически постоянные значения их содержания. Только для изотопов ^{238}Pu и ^{240}Pu , характеризующихся аномально низким и высоким значениями резонансного интеграла радиационного захвата нейтронов соответственно, наблюдаются значительные изменения, причем в сторону их сближения.

Таблица 7

Удельное содержание [кг/т] актиноидов в зависимости от времени облучения, полученных со скоростями реакций начала десятой кампании

| Концентрации изотопов [кг/Т] | | | | | |
|------------------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Годы облучения топлива | | | | | |
| Изотоп | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| | α | | | | |
| | 1 | 0,965 | 0,95 | 0,932 | 0,91 |
| ²⁴⁴ Cm | $7,0 \cdot 10^{-2}$ | $6,99 \cdot 10^{-2}$ | $7,0 \cdot 10^{-2}$ | $7,04 \cdot 10^{-2}$ | $7,12 \cdot 10^{-2}$ |
| ²⁴³ Am | $7,98 \cdot 10^{-2}$ | $8,11 \cdot 10^{-2}$ | $8,28 \cdot 10^{-2}$ | $8,48 \cdot 10^{-2}$ | $8,69 \cdot 10^{-2}$ |
| ²⁴² Pu | $1,17 \cdot 10^{-1}$ | $1,16 \cdot 10^{-1}$ | $1,15 \cdot 10^{-1}$ | $1,14 \cdot 10^{-1}$ | $1,13 \cdot 10^{-1}$ |
| ²⁴² Cm | $8,86 \cdot 10^{-03}$ | $8,85 \cdot 10^{-03}$ | $8,96 \cdot 10^{-03}$ | $9,18 \cdot 10^{-03}$ | $9,53 \cdot 10^{-03}$ |
| ²⁴¹ Pu | $3,1 \cdot 10^{-1}$ | $3,16 \cdot 10^{-1}$ | $3,31 \cdot 10^{-1}$ | $3,43 \cdot 10^{-1}$ | $3,54 \cdot 10^{-1}$ |
| ²⁴¹ Am | $7,44 \cdot 10^{-2}$ | $7,43 \cdot 10^{-2}$ | $7,47 \cdot 10^{-2}$ | $7,54 \cdot 10^{-2}$ | $7,60 \cdot 10^{-2}$ |
| ²⁴⁰ Pu | $4,23 \cdot 10^{-1}$ | $4,04 \cdot 10^{-1}$ | $3,81 \cdot 10^{-1}$ | $3,56 \cdot 10^{-1}$ | $3,28 \cdot 10^{-1}$ |
| ²³⁹ Pu | $1,07 \cdot 10^{+0}$ | $1,06 \cdot 10^{+0}$ | $1,04 \cdot 10^{+0}$ | $1,03 \cdot 10^{+0}$ | $1,1^{+0}$ |
| ²³⁸ U | $1,40 \cdot 10^{-2}$ | $1,40 \cdot 10^{-2}$ | $1,40 \cdot 10^{-2}$ | $1,39 \cdot 10^{-2}$ | $1,39 \cdot 10^{-2}$ |
| ²³⁸ Pu | $3,29 \cdot 10^{+0}$ | $3,26 \cdot 10^{+0}$ | $3,26 \cdot 10^{+0}$ | $3,26 \cdot 10^{+0}$ | $3,27 \cdot 10^{+0}$ |
| ²³⁷ Np | $2,08 \cdot 10^{+0}$ | $2,12 \cdot 10^{+0}$ | $2,13 \cdot 10^{+0}$ | $2,13 \cdot 10^{+0}$ | $2,13 \cdot 10^{+0}$ |
| ²³⁶ U | $6,70 \cdot 10^{+0}$ | $6,69 \cdot 10^{+0}$ | $6,69 \cdot 10^{+0}$ | $6,69 \cdot 10^{+0}$ | $6,69 \cdot 10^{+0}$ |
| ²³⁵ U | $7,60 \cdot 10^{+0}$ | $7,64 \cdot 10^{+0}$ | $7,69 \cdot 10^{+0}$ | $7,75 \cdot 10^{+0}$ | $7,83 \cdot 10^{+0}$ |
| ²³⁴ U | $2,06 \cdot 10^1$ | $2,08 \cdot 10^1$ | $2,10 \cdot 10^1$ | $2,12 \cdot 10^1$ | $2,14 \cdot 10^1$ |
| ²³³ Pa | $0,0 \cdot 10^{+0}$ | $1,51 \cdot 10^{+0}$ | $1,46 \cdot 10^{+0}$ | $1,40 \cdot 10^{+0}$ | $1,35 \cdot 10^{+0}$ |
| ²³³ U | $6,90 \cdot 10^1$ | $6,88 \cdot 10^1$ | $6,93 \cdot 10^1$ | $6,94 \cdot 10^1$ | $6,89 \cdot 10^1$ |
| ²³² Th | $8,89 \cdot 10^2$ | $8,74 \cdot 10^2$ | $8,59 \cdot 10^2$ | $8,45 \cdot 10^2$ | $8,32 \cdot 10^2$ |

В равновесном состоянии удельное значение содержания тория составляет ~88 % в начале кампании и ~83 % в конце кампании, и эта разница соответствует накоплению продуктов деления и восстанавливается на старте следующей кампании. Удельное значение содержания изотопов урана практически не меняется в процессе кампании и находится на уровне ~10 %. Удельное значение содержания изотопа ²³⁷Np находится на уровне ~0,2 %. Удельное значение содержания изотопов плутония практически не меняется в процессе кампании и находится на уровне ~0,5 %, причем основная доля (~0,35 %) приходится на изотоп ²³⁸Pu. Удельное значение содержания изотопов америция и кюрия находится на уровне сотых долей процента. Таким образом, основное содержание топлива составляют торий и уран, а изотопы плутония играют второстепенную роль.

5. Трансмутационные возможности торий-уран-плутониевого топливного цикла

Изменение удельного содержания каждого изотопа, подвергающегося облучению нейтронами, обуславливается тремя реакциями: делением ядра, радиационным захватом нейтрона ядром и реакцией $(n, 2n)$ на ядре. Только процесс деления ядер переводит актиноиды в продукты деления и качественно трансмутирует тяжелые ядра, а два других процесса сопровождаются изотопным преобразованием актиноидов. В связи с превышением вероятности радиационного захвата нейтрона ядром над реакцией $(n, 2n)$ на ядре изотопное преобразование в реакторах идет в сторону утяжеления ядер. Следует отметить, что реакция деления ядер является основной целевой реакцией, определяющей энерговыделение и размножение нейтронов, что в связи со сравнительно жестким спектром нейтронов из-за использования тяжелой воды в качестве теплоносителя значимый вклад в число разделившихся ядер вносит деление пороговоделящихся изотопов.

Большое (~ 900 кг/т) удельное содержание тория и сравнительно жесткий спектр нейтронов обуславливают непосредственное деление пороговоделящихся ядер тория на уровне $\sim 1,2$ кг/т в каждой кампании. Изотоп ^{233}U , нарабатываемый на тории, является основным делящимся изотопом. Его вклад в число разделяющихся ядер за кампанию находится на высоком уровне ~ 47 кг/т даже в равновесном состоянии. Пороговоделящийся изотоп ^{234}U , нарабатываемый на ^{233}U , делится только быстрыми нейтронами, и его вклад в число разделяющихся ядер за кампанию в равновесном состоянии находится на уровне $\sim 0,7$ кг/т. Следующим по величине вклада в число разделяющихся ядер за кампанию (после ^{233}U) является активный изотоп ^{235}U , нарабатываемый на ^{234}U . Его вклад составляет ~ 4 кг/т. Далее в последовательном радиационном захвате нейтронов заселяются три долгоживущих пороговоделящихся ядра ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}Pu , вклад которых в число разделяющихся ядер находится на уровне $\sim 0,1$; $\sim 0,07$; $\sim 0,5$ кг/т, соответственно. Затем заселяются и делятся изотопы плутония ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , вклад которых в число разделяющихся ядер находится на уровне $\sim 0,55$; $\sim 0,01$; $\sim 0,25$ кг/т, соответственно. Конечно, подвергаются делению быстрыми нейтронами и другие сравнительно долгоживущие изотопы элементов от урана до кюрия и далее, но вклад их незначителен.

Нам представляется важным еще раз отметить определяющий вклад в число разделяющихся ядер за кампанию в равновесном состоянии трех последовательно заселяемых изотопов урана ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U и самого тория. Их деление обуславливает возможность обеспечения положительного нейтронного баланса вследствие не только рождения нейтронов, но и понижения доли далее заселяемых ядер-поглотителей нейтронов ^{236}U , ^{237}Np . Именно на стадии прохождения изотопов ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U трансмутируется реакцией деления подавляющая доля $(47 + 0,7 + 4)/55 \approx 0,94$ сырьевых ядер ^{232}Th , испытывающих радиационный захват нейтронов. При этом вклад изотопов плутония находится на уровне ~ 2 %.

В замкнутом торий-уран-плутониевом топливном цикле актиноиды рециклируются, а их потери и попадание в радиоактивные отходы [16] определяются возможностями переработки облученного топлива, уровень которой характеризуется величиной $\sim 0,1$ % для каждого элемента. Таким образом, при переработке одной тонны облученного топлива после каждой четырехлетней кампании радиоактивные отходы будут содержать ~ 54 кг продуктов деления, $\sim 0,8$ кг тория, $\sim 0,10$ кг изотопов урана, $\sim 0,005$ кг изотопов плутония, $\sim 0,002$ кг нептуния и «следовые» значения изотопов америция и кюрия, что качественно упрощает обращение с высокоактивными отходами ЯЭ.

Высокая эффективность использования ядерного топлива в замкнутом торий-уран-плутониевом топливном цикле и упрощение обращения с радиоактивными отходами в нем являются техническим результатом полученного патента [17].

На всех этапах топливного цикла имеет место технологический барьер на пути несанкционированного распространения расщепляющихся материалов в виде содержания радиологически опасного изотопа ^{232}U в уране и высокого нейтронного фона от четно-четных изотопов плутония в плутонии.

Заключение

В заключение подчеркнем основные результаты.

Основной результат состоит в том, что в расчетно-теоретических исследованиях показана возможность самовоспроизводства изотопов урана $^{233}\text{U} + ^{235}\text{U}$ в торий-урановом ($^{232}\text{Th} \text{ } ^{233}\text{U}$) оксидном топливе в реакторах типа PWR (ВВЭР). Эта возможность обеспечивается нейтронно-ядерными свойствами ^{233}U , ^{232}Th и наличием уникальной способности воды, используемой в качестве теплоносителя и замедлителя, менять свой состав в процессе работы реактора. Использование D_2O в начале работы реактора в критическом состоянии обеспечивает повышенное содержание ^{233}U , а также активных изотопов ^{235}U и ^{239}Pu в топливе, пониженный захват нейтронов водой и ядрами тяжелых элементов, в т. ч. и самим ^{233}U , особенно при пониженном водотопливном отношении. При непрерывном выгорании ^{233}U и задержке его воспроизводства из-за распада ^{233}Pa критическое состояние реактора может быть обеспечено непрерывным разбавлением тяжелой воды легкой и соответствующим смягчением спектра нейтронов.

Предложен эффективный и безопасный способ утилизации высокообогащенного урана с приемом в наиболее отработанных реакторах типа ВВЭР с наработкой изотопа ^{233}U при использовании Th-U-Pu оксидного топлива, тяжелой воды и ее разбавления легкой водой. Поглощение нейтронов изотопами ^{232}Th с наработкой ^{233}U является наиболее эффективным их использованием, повышающим качество ядерного топлива. В три раза меньшее содержание требуемого количества нарабатываемого ^{233}U относительно выгорающего ^{235}U при удержании ячейки в критическом состоянии экономит нейтроны и повышает вероятность выгорания пороговогоделящихся изотопов. Рассмотрено одиннадцатикратное рециклирование четырехлетних кампаний с замыканием топлива по всем долгоживущим актиноидам. Видно, что в рассмотренном сценарии обеспечивается глубокая утилизация обогащенного урана с тенденцией выхода на замкнутый торий-уран-плутониевый топливный цикл, в котором основным энерговыделяющим изотопом является ^{233}U . Просматривается возможность самоограничения актиноидного состава изотопами плутония.

Рассмотрен эффективный и безопасный способ совместной утилизации высокообогащенного урана в 2/3 сборок и энергетического плутония в 1/3 сборок в наиболее отработанных реакторах типа ВВЭР с наработкой изотопа ^{233}U с использованием Th-U-Pu оксидного топлива, тяжелой воды и ее разбавления легкой водой. Поглощение нейтронов изотопами ^{232}Th и ^{240}Pu с наработкой ^{233}U и ^{241}Pu является наиболее эффективным их использованием, повышающим качество ядерного топлива. Меньшее количество нарабатываемого ^{233}U относительно выгорающих ^{235}U и ^{239}Pu при удержании ячейки в критическом состоянии экономит нейтроны, повышает вероятность выгорания пороговогоделящихся изотопов и создает условия для реализации Th-U-Pu топливного цикла.

Выполнены оценки равновесных значений изотопного состава и времен выхода изотопов в равновесие при рециклировании торий-уран-плутониевого оксидного топлива в реакторах типа ВВЭР с водотопливным отношением $V_{\text{в}}/V_{\text{т}} = 1,23$, с использованием тяжелой воды и ее разбавления легкой водой. Показано, что и в равновесном режиме реактор может работать с самовоспроизводством активных изотопов.

Показан определяющий вклад в число разделяющихся ядер за кампанию трех последовательно заселяемых изотопов урана ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U и самого тория. Именно на стадии прохождения изотопов ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U трансмутируется реакцией деления подавляющая доля $(47 + 0,7 + 4)/55 \approx 0,94$ сырьевых ядер ^{232}Th , испытавших радиационный захват нейтронов. Их деление обуславливает возможность обеспечения положительного нейтронного баланса вследствие не только рождения нейтронов, но и понижения доли далее заселяемых ядер-поглотителей нейтронов ^{236}U , ^{237}Np . При этом вклад изотопов плутония в деление ядер находится на уровне $\sim 2\%$ и играет второстепенную роль.

В замкнутом торий-уран-плутониевом топливном цикле актиноиды рециклируются, а их потери и попадание в радиоактивные отходы определяются возможностями переработки облученного топлива, уровень которой характеризуется величиной $\sim 0,1\%$ для каждого элемента. Таким образом, при переработке одной тонны облученного топлива после каждой четырехлетней кампании радиоактивные отходы будут содержать ~ 54 кг продуктов деления, $\sim 0,8$ кг тория, $\sim 0,1$ кг изотопов урана, $\sim 0,005$ кг изотопов плутония, $\sim 0,002$ кг нептуния и «следовые» значения изотопов америция и кюрия, что качественно упрощает обращение с высокоактивными отходами ЯЭ.

На всех этапах топливного цикла имеет место технологический барьер на пути несанкционированного распространения расщепляющихся материалов в виде содержания радиологически опасного изотопа ^{232}U в уране, обогащенном изотопом ^{233}U , и высокого нейтронного фона от четно-четных изотопов плутония в плутонии.

Полученные результаты позволяют считать, что нейтронная кинетика и изотопное преобразование в замкнутом торий-уран-плутониевом топливном цикле представляются наиболее оптимальными и эффективными. Требуется конструкторская проработка возможностей адаптации активной зоны реакторов типа ВВЭР, а может и канальных реакторов, для обеспечения использованных выше условий. Необходимы разработки технологий переработки облученного и изготовления свежего топлива с широким изотопным составом актиноидов.

Решение проблем современной ЯЭ в замкнутом торий-уран-плутониевом топливном цикле позволит: повысить на \sim два порядка топливный ресурс; качественно упростить обращение с радиоактивными отходами; понизить ядерную опасность реактора типа ВВЭР; создать технологический барьер на пути распространения расщепляющихся материалов и ядерных технологий. Можно ожидать, что реализация этих резервов и приведет к преодолению наметившейся стагнации и бурному наращиванию мощностей ЯЭ.

Автор выражает благодарность В. Ф. Колесову за полезные обсуждения результатов и В. М. Повышеву за многолетнее сотрудничество.

Список литературы

1. Семченков Ю. М., Сидоренко В. А., Алексеев П. Н. и др. Развитие проекта ВВЭР для работы в замкнутом топливном цикле // Сб. тр. Третьей межд. науч.-техн. конф. «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики» МНТК НИКИЭТ-2014. Москва: НИКИЭТ, 2014. Т. 1. С. 71–82.
2. Маршалкин В. Е., Повышев В. М., Трутнев Ю. А. Целесообразность использования избыточных количеств оружейного урана и плутония и энергетического плутония для перевода тепловых реакторов на замкнутый торий-урановый топливный цикл. Труды семинара «Новые подходы к ядерным топливным циклам и схемам захоронения отходов с учетом существующих избыточных количеств оружейных урана и плутония и энергетического плутония» / Под ред. В. Е. Маршалкина. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1998. С. 179–187.
3. Беланова Т. С., Игнатюк А. В., Пашенко А. Б., Пляскин В. И. Радиационный захват нейтронов: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1986.
4. Freeman L. B., Beadoin B. R., Frederickson R. et al. Physics Experiments and Lifetime Performance of Light Water Breeder Reactors // Nucl. Sci. Eng. 1989. Vol. 102.
5. Киселев Г. В., Конев В. Н. История реализации ториевого режима в советском Атомном проекте // УФН. 2007. Т. 177, № 12. С. 1361–1384.
6. Calculation of the isotopic composition, crosssections and fluxes for a typical PWR-cell loaded with (PU-Th) O₂-fuel, as a function of the fuel burnup: Report of IAEA, 1996.
7. Маршалкин В. Е., Повышев В. М., Житник А. К., Ронжин А. Б. Методика расчета нейтронно-физических параметров и изотопной кинетики ячейки тепловых реакторов и ее тестирование // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2001. Вып. 1. С. 11–21.
8. Marshalkin V. E., Povyshev V. M. Breeding of ²³³U in the Thorium-Uranium Fuel Cycle in VVER Reactor Using Heavy Water // Physics of Atomic Nuclei. 2015. Vol. 78, N 11. P. 1274–1286.
9. Пат. 2541516, МПК G21C1/00. Способ эксплуатации ядерного реактора в ториевом топливном цикле с расширенным воспроизводством изотопа ²³³U / В. Е. Маршалкин, В. М. Повышев // Бюллетень. 2015. № 5.
10. Маршалкин В. Е., Повышев В. М. Эффективное использование оружейного урана в ядерной энергетике // Атом. 2015. № 65. С. 35–39.
11. Marshalkin V. E., Povyshev V. M. Utilization of Non-Weapons-Grade Plutonium and Highly Uranium with Breeding of the ²³³U Isotope in the VVER Reactors Using Thorium and Heavy Water // Physics of Atomic Nuclei. 2015. Vol. 78, N 11. P. 1287–1300.
12. Матвеев Л. В., Центер Э. М. Уран-232 и его влияние на радиационную обстановку в ядерном топливном цикле. М.: Энергоатомиздат, 1985.
13. Пат. 2619599, МПК G21C1/00. Способ эксплуатации ядерного реактора в уран-ториевом топливном цикле с наработкой изотопа ²³³U / В. Е. Маршалкин, В. М. Повышев // Бюллетень. 2017. № 14.

14. Marshalkin V. E., Povyshch V. M. On the Equilibrium Isotopic Composition of the Thorium-Uranium-Plutonium Fuel Cycle // *Physics of Atomic Nuclei*. 2016. Vol. 79, N 8. P. 1290–1297.

15. Маршалкин В. Е., Повышев В. М. Естественная трансмутация актиноидов реакцией деления в замкнутом торий-уран-плутониевом топливном цикле // *ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов*. 2016. Вып. 4. С. 64–75.

16. Маршалкин В. Е., Повышев В. М. Делящиеся материалы второго поколения в ядерной энергетике // *Там же*. 2017. Вып. 4. С. 54–75.

17. Пат. 2634476, МПК G21C1/00. Способ эксплуатации ядерного реактора в ториевом топливном цикле с наработкой изотопа урана ^{233}U / В. Е. Маршалкин, В. М. Повышев // *Бюллетень*. 2017. № 31.

The Concept of Closed Thorium-Uranium-Plutonium Fuel Cycle in Nuclear-Power Industry

V. E. Marshalkin

The use of ^{232}Th as a raw isotope instead of ^{238}U and the main fissile isotope ^{233}U instead of ^{239}Pu , as well as the use of heavy water instead of light water as a coolant and its dilution with light water in the VVER-type reactor campaign make it possible the fuel self-enrichment with active isotopes, including the time upon the achieved balance in the isotope ratio of actinides) and provide conditions for closing the thorium-uranium-plutonium fuel cycle. This allows increasing the fuel life time by ~ 2 orders of magnitude; making easier the management of radioactive wastes; decreasing the nuclear risk of the VVER-type reactor; and providing a technological barrier to prevent the distribution of fissile materials and nuclear technologies.

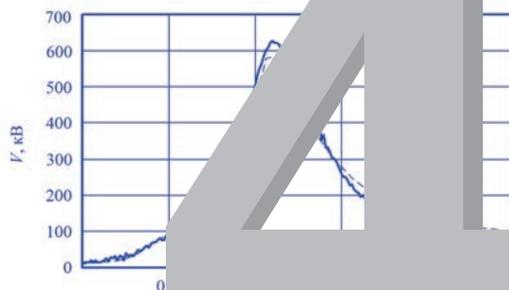
СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 4

*Базанов А. А., Бочков Е. И., Гаранин С. Г., Дудай П. В., Зименков А. А.,
Ивановский А. В., Климушкин К. Н., Комаров В. М., Краев А. И.,
Куделькин В. Б., Мамышев В. И., Полюшко С. М., Цибилов З. С.,
Шаповалов Е. В.*

Источник мегаамперного тока со временем нарастания ~ 100 нс
на базе взрывомагнитных генераторов 312

РАЗДЕЛ

ВЗРЫВОМАГНИТНЫЕ ГЕНЕРАТОРЫ



4

УДК 537.84

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_312

Источник мегаамперного тока со временем нарастания ~ 100 нс на базе взрывомагнитных генераторов

**А. А. Базанов, Е. И. Бочков, С. Г. Гаранин,
П. В. Дудай, А. А. Зименков,
А. В. Ивановский, К. Н. Климушкин,
В. М. Комаров, А. И. Краев, В. Б. Куделькин,
В. И. Мамышев, С. М. Полюшко,
З. С. Цибилов, Е. В. Шаповалов**

Для достижения порога термоядерного зажигания в схеме непрямого облучения рентгеновским излучением Z-пинча необходимо осуществить имплозию лайнера током амплитудой ~ 65 МА за время ~ 100 нс. Токи с такими параметрами могут быть созданы с применением сверхмощных дисковых взрывомагнитных генераторов и двухкаскадной системы обострения импульса тока на основе фольговых электро-взрывных размыкателей тока в виде «змейки». Реализацию взрывного источника тока со временем нарастания ~ 100 нс целесообразно проводить поэтапно, наращивая величину тока. В работе представлены результаты экспериментов первого этапа, в которых на базе спирального взрывомагнитного генератора реализован ток амплитудой в 5 МА за время ~ 120 нс в индуктивной нагрузке ~ 10 нГн.

Для достижения порога термоядерного зажигания в схеме непрямого облучения рентгеновским излучением Z-пинча необходимо осуществить имплозию лайнера током амплитудой ~ 65 МА за время ~ 100 нс [1]. Традиционно для реализации таких токов создают лабораторные установки на базе емкостных накопителей энергии: Z (США); PTS (Китай); Ангара, С-300 (Россия), и т. д. На самой мощной из них – установке Z – реализована имплозия многопроволочного лайнера током ~ 17 МА за время ~ 120 нс, получен выход рентгеновского излучения (РИ) с энергией $\sim 1,8$ МДж за время ~ 5 нс [2]. К сожалению, нам неизвестны новые данные по выходу РИ после модернизации установки Z, в процессе которой энергия конденсаторной батареи (КБ) была увеличена в два раза. По-видимому, продвижение в сторону больших токов (энергий РИ) на данном пути связано с техническими сложностями, хотя проекты более мощных установок на основе КБ существуют как в США и Китае, так и в России.

Альтернативным путем для реализации РИ могут являться установки на базе взрывомагнитных генераторов (ВМГ). Современные дисковые ВМГ, оснащенные фольговыми электро-взрывными размыкателями тока (ФЭРТ), создают в индуктивной нагрузке в десятки наногенри токи с амплитудой до сотни мегаампер с микросекундным временем нарастания [3]. Для реализа-

ции мощного РИ на этом пути необходимо решить проблему дальнейшего обострения импульса тока до ~ 100 нс.

В работе [4] для сокращения фронта нарастания тока ВМГ до ~ 100 нс предложено использовать малоиндуктивный ФЭРТ в виде «змейки» [5] и разрядник для развязки контура ВМГ и нагрузки на стадии электровзрыва фольги. В работе [6] показано, что с применением сверхмощных дисковых ВМГ в этой схеме возможна реализация имплозии Z-пинча за время ~ 100 нс током ~ 75 МА.

Реализацию взрывного источника тока со временем нарастания ~ 100 нс целесообразно проводить, поэтапно наращивая величину тока.

Схемы ФЭРТ, классическая [3] и в виде «змейки» [5], приведены на рис. 1. Для получения в нагрузке ~ 10 нГн тока с амплитудой $J_n \sim 100$ МА за время ~ 100 нс необходимо напряжение $V_n \sim 10$ МВ. ФЭРТ эффективно работают при напряженности электрического поля $5\text{--}10$ кВ/см. То есть длина фольги должна быть не менее $l = 10$ м.

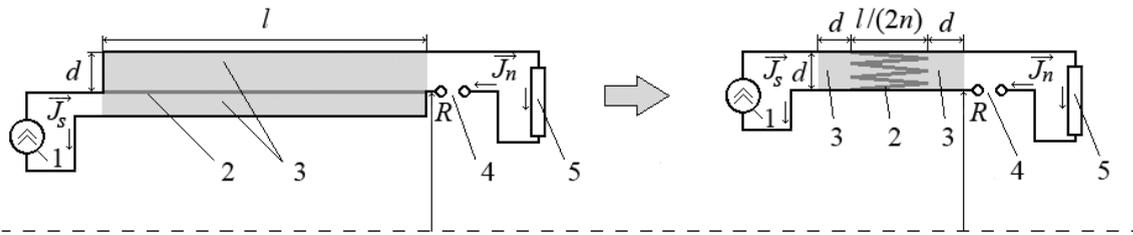


Рис. 1. Схемы ФЭРТ, классическая (слева) и в виде «змейки» (справа): 1 – источник тока; 2 – медная фольга; 3 – диэлектрик; 4 – разрядник или взрывной ключ; 5 – нагрузка

Существующие технологии обеспечивают прочность изоляции над фольгой ~ 100 кВ/мм, т. е. необходима толщина диэлектрика не менее $d = 10$ см. Отсюда следует, что индуктивность подвода энергии к нагрузке в случае классического ФЭРТ при радиусе размещения фольги $R = 2$ м и напряжении $V_n \sim 10$ МВ не менее $L = 100$ нГн.

Начальная индуктивность 15-элементного сверхмощного ДВМГ $L_0 = 360$ нГн. При усилении энергии K_E в 15 раз с сохранением $\eta \sim 73\%$ от начального потока [7], конечная индуктивность оценивается: $L_k \sim \eta^2 L_0 / K_E \sim 13$ нГн.

В силу $L \gg L_k$ применение классической схемы ФЭРТ малоэффективно и, фактически, бессмысленно.

В случае ФЭРТ в виде «змейки» индуктивность над фольгой при тех же параметрах $l = 10$ м, $d = 10$ см, $R = 2$ м и числе звеньев «змейки» $n = 20$ составит $L = 2,2$ нГн.

Для проверки работоспособности схемы было проведено два эксперимента, в которых обострялся ток источника на основе спирального ВМГ и взрывного размыкателя тока [3], нарастающий за время ~ 1 мкс до амплитуды ~ 10 МА. Параметры фольги в обоих опытах были одинаковы: высота $l = 60$ см; толщина $\delta = 15$ мкм; ширина $h = 80$ см (53 полосы по 1,5 см), число звеньев $n = 10$. В опытах измерялись производные токов по времени и токи в цепях источника и нагрузки индуктивными датчиками, а также токи – методикой Фарадея. Внешний вид экспериментального устройства и ФЭРТ в виде «змейки» представлены на рис. 2.



Рис. 2. Внешний вид экспериментального устройства (максимальный диаметр 0,63 м; длина – 3,5 м) и ФЭРТ в виде «змейки»

Целью первого эксперимента являлось определение максимального напряжения, возникающего при электровзрыве фольги. Для этого индуктивность нагрузки была выбрана большой $L_n = 50$ нГн, разрядник отсутствовал (см. рис. 1). На рис. 3 представлены расчетный прогноз напряжения на ФЭРТ и зависимость напряжения $V = L_n dJ_n / dt$ от времени, зарегистрированная в опыте. Амплитуда напряжения достигла рекордной величины ~ 600 кВ. В схемах с классическим ФЭРТ максимум реализованного напряжения ~ 420 кВ [8].

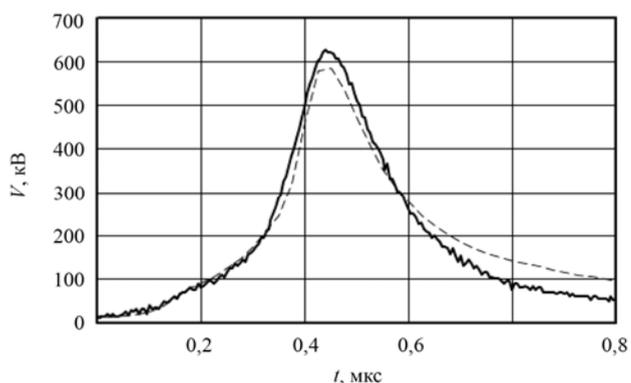


Рис. 3. Зависимости от времени напряжения на ФЭРТ: расчетный прогноз – пунктирная кривая; эксперимент – сплошная кривая

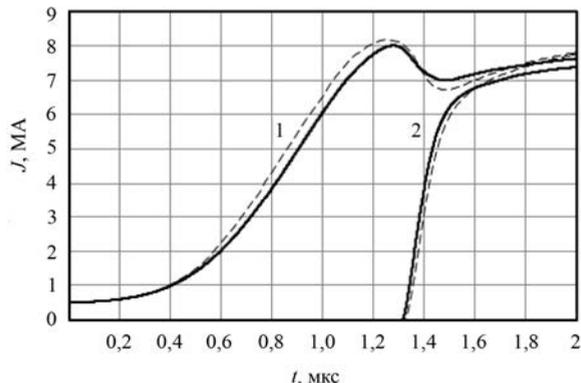


Рис. 4. Зависимости от времени токов в цепи источника (1) и нагрузки (2): расчетный прогноз – пунктирная кривая; эксперимент – сплошная кривая

Во втором эксперименте нагрузка с индуктивностью $L_n \sim 10$ нГн была развязана с ФЭРТ разрядником, напряжение пробоя которого было выставлено равным $V_{br} \sim 300$ кВ. На рис. 4 представлены прогнозируемые в расчетах зависимости токов от времени в цепи источника и нагрузки. Там же приведены зарегистрированные в опыте зависимости. Ток в нагрузке величиной ~ 5 МА реализован за ранее недостижимое в экспериментах с ВМГ время ~ 120 нс.

Созданный взрывной источник тока по возможностям имплозии Z-пинчей близок к российским установкам Ангара, С-300.

Успешное проведение экспериментов открывает возможность реализации взрывных аналогов установок со временем нарастания тока ~ 100 нс [6]:

- на базе дискового ВМГ малого класса – установки PTS (ток ~ 10 МА);
- на базе дискового ВМГ среднего класса – установки Z (ток ~ 25 МА) и в перспективе установки для достижения термоядерного зажигания на базе сверхмощного дискового ВМГ.

Список литературы

1. Vesey R. A., Herrmann M. C., Lemke R. W. et al. Target design for high fusion yield with the double Z-pinch-driven hohlraum // *Physics of Plasmas*. 2007. Vol. 14, 056302. P. 13.
2. Desjarlais M. P., Marder B. M. Theory of wire number scaling in wire-array Z-pinch // *Ibid.* 1999. Vol. 6, N 5. P. 2057–2064.
3. Чернышев В. К. Сверхмощные взрывомагнитные источники энергии для термоядерных и физических исследований // Сб. докл. «Мегагаусная и мегаамперная импульсная технология и применение» / Под ред. В. К. Чернышева, В. Д. Селемира, Л. Н. Пляшкевича. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1997. С. 41–58.
4. Ivanovsky A. V. Explosive PW-power current source – myth or reality? // *Proc. XIII Int. Conf. on Megagauss Magnetic Fields Generation and Relation Topics*. Suzhou. 2010. P. 32–43.
5. Chernyshev V. K., Kucherov A. I., Mezhevov A. I., Vakhrushev V. V. Electroexplosive Foil 500 kV Current Opening Switch Characteristics Research // *Proc. 11th IEEE Int. Pulsed Power Conf.* Baltimore, Maryland, USA. 1997. P. 1208–1212.
6. Garanin S. G., Ivanovsky A. V., Mkhitarayan L. S. An ICF system based on Z-pinch radiation produced by an explosive magnetic generator // *Nuclear fusion*. 2011. Vol. 51, N 10, 103010. P. 15.
7. Demidov V. A., Kraev A. I., Mamyshev V. I. et al. Three-module disc explosive magnetic generator // *Proc. Megagauss Field and Pulsed Power Systems*. N. Y.: Nova Science Publishers. 1990. P. 351–354.
8. Петрухин А. А., Голубев В. В., Данов В. М. и др. Сверхсильные магнитные поля. Физика. Техника. Применение. М.: Наука, 1984. С. 384–387.

Source of Megaampere Current with the Rise Time ~ 100 ns on the Basis of Explosive Magnetic Generator

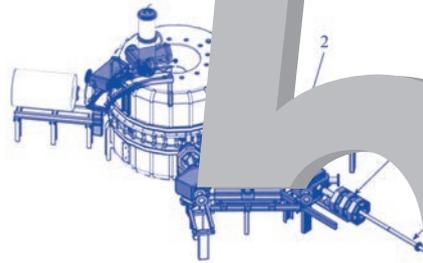
A. A. Bazanov, E. I. Bochkov, S. G. Garanin, P. V. Duday, A. A. Zimenkov, A. V. Ivanovskiy, K. N. Klimushkin, V. M. Komarov, A. I. Krayev, V. B. Kudel'kin, V. I. Mamyshev, S. M. Polyushko, Z. S. Tsibikov, E. V. Shapovalov

To achieve a thermonuclear ignition threshold in the scheme of indirect irradiation of Z-pinch by X-radiation, it is necessary to implode the liner by the current with the amplitude ~65 MA for the time ~100 ns. The currents with such parameters can be achieved with the use of super-powerful disk explosive magnetic generators and a two-stage current pulse sharpening system based on foil electrically exploded current opening switches in the form of a «serpentine». The implementation of the explosive current source with a rise time of ~100 ns is advisable to be carried out in stages by increasing the magnitude of current. The results of the first-stage experiments, in which on the basis of the helical explosive magnetic generator the current with the amplitude of 5 MA was produced in the load ~10 nH for the time of ~120 ns.

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 5

| | |
|---|-----|
| <p><i>Тельнов А. В., Завьялов Н. В., Сметанин М. Л., Шориков И. В., Путевской С. А., Тресков С. М., Курапов Н. Н., Кузнецов В. В., Опекунов А. М., Поляков Л. Е., Шеин А. Н., Поспелов Г. П., Машин И. А., Беляев А. Н., Жуков И. В., Бодряшкин Я. В.</i></p> <p>Результаты работ по созданию ускорителя электронов непрерывного действия с высокой мощностью пучка</p> | 318 |
| <p><i>Завьялов Н. В., Воронцов С. В., Гордеев В. С., Грунин А. В., Генералов Л. Н., Глушков С. Л., Девяткин А. А., Лазарев С. А., Мысков Г. А., Назаренко С. Т., Павлов В. С., Смердов В. И., Сметанин М. Л., Страбыкин К. В., Тельнов А. В., Шориков И. В., Эльяш С. Л., Юхневич В. А.</i></p> <p>Состояние и перспективы развития ускорителей заряженных частиц в РФЯЦ-ВНИИЭФ</p> | 326 |

РАЗДЕЛ



5

УСКОРИТЕЛИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

УДК 621.384.64

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_318

Результаты работ по созданию ускорителя электронов непрерывного действия с высокой мощностью пучка

**А. В. Тельнов, Н. В. Завьялов,
М. Л. Сметанин, И. В. Шориков,
С. А. Путевской, С. М. Тресков, Н. Н. Курапов,
В. В. Кузнецов, А. М. Опекунов, Л. Е. Поляков,
А. Н. Шеин, Г. П. Поспелов, И. А. Машин,
А. Н. Беляев, И. В. Жуков, Я. В. Бодряшкин**

Представлено состояние дел по созданию в РФЯЦ-ВНИИЭФ резонансного ускорителя электронов непрерывного действия. Диапазон выходной энергии электронов – от 1,5 до 7,5 МэВ. Средняя мощность электронного пучка – до 300 кВт. Приведены технические характеристики основных узлов ускорителя: система ВЧ питания, ВЧ инжектор электронов, ускоряющая структура, магнито-оптическая система. Представлена схема ускорения электронов. Проведены эксперименты, в результате которых получен пучок электронов с энергиями 1,5 и 3 МэВ со средним током до 100 мкА. Характеристики электронного пучка, определенные в результате экспериментов, подтверждают принципы работы ускорителя, заложенные на этапе проектирования.

Введение

Ускоритель предназначен для обработки технологических процессов, требующих высокую мощность и большие значения поглощенной дозы электронного и тормозного излучений.

Основные проектные параметры установки [1]:

- выходная энергия электронов – 1,5; 4,5; 7,5 МэВ;
- максимальная средняя мощность электронного пучка 300 кВт;
- рабочая резонансная частота – 100 МГц;
- средний ток – до 40 мА;
- режимы работы – непрерывный и импульсно-периодический.

Принцип ускорения электронов основан на многократном прохождении электронного пучка через ускоряющие зазоры коаксиального полуволнового резонатора на уровне медианной плоскости, где полностью отсутствует магнитная компонента ВЧ поля (рис. 1) [2]. Максимальная энергия электронов 7,5 МэВ достигается после пятикратного прохождения электронного пучка через ускоряющий резонатор.

Многokратный проход электронов через ускоряющие зазоры резонатора осуществляется с помощью поворотных электромагнитов, расположенных снаружи корпуса резонатора (см. рис. 1, поз. D1–D4). С помощью электромагнитов D5–D7 ускоренный пучок с различными энергиями электронов транспортируется к выводному устройству.

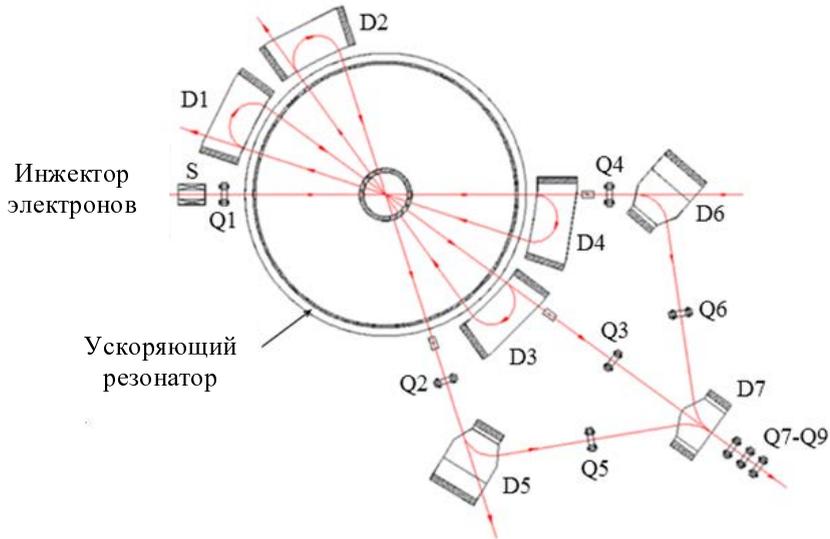


Рис. 1. Схема ускорения: \rightarrow – траектория движения пучка; D1 – D7 – поворотные дипольные магниты; S – фокусирующий соленоид; Q1 – Q9 – квадрупольные магнитные линзы

Составные системы ускорителя

Ускоряющий резонатор

Ускоряющий резонатор представляет собой короткозамкнутый коаксиальный волновод длиной $\lambda/2$ (рис. 2).



Рис. 2. Трехмерная модель резонатора (а) и характерное распределение напряженности электрического поля (б)

Система ВЧ питания

Для достижения величины средней мощности пучка в 300 кВт необходима система ВЧ питания 540 кВт. Такая система состоит из трех типовых генераторных модулей с выходной средней мощностью 180 кВт каждый и сумматора их ВЧ мощности [3].

ВЧ мощность поступает в ускоряющий резонатор по коаксиальному фидеру через узел ввода мощности. В резонаторе возбуждаются электромагнитные колебания типа T_1 с напряженностью электрического поля, достаточной для приращения энергии электронов на 1,5 МэВ за один проход резонатора.

Инжектор электронов

Инжектором электронов является сеточно-управляемая термокатодная электронная ВЧ пушка на основе четвертьволнового коаксиального резонатора (100 кэВ, 40 мА, 100 МГц) [4]. Через канал инжекции электронные сгустки попадают в ускоряющий коаксиальный резонатор для последующего набора необходимой энергии.

Технологические системы

К резонатору подключена система вакуумирования, обеспечивающая остаточное давление во внутренних объемах резонатора не хуже 10^{-5} Па.

Установленная система водяного охлаждения и термостабилизации рассчитана на отвод от узлов макета ускорителя избытков тепловой мощности до 400 кВт и поддержание заданной температуры с точностью ± 1 °С.

Для дистанционного управления и контроля технологическими процессами установки разработана автоматизированная система управления ускорителем.

Система магнитной проводки пучка

Систему магнитной проводки можно разделить на две части: рециркуляция пучка и транспортировка пучка (рис. 3).

При проводке пучка столь высокой мощности потери электронов даже на уровне единиц процентов представляют серьезную опасность. В связи с этим электронный пучок должен обладать следующими параметрами: эмиттанс – не более 50 мм мрад, энергетический разброс электронов в сгустке – не более 0,1 МэВ.

Средства контроля качества пучка

Учитывая высокую среднюю мощность (до 300 кВт) и сложность траектории электронного пучка (см. рис. 1), для минимизации потерь тока электронов на участках ускорения и дрейфа разработана и испытана система контроля. Такая система, состоящая из монитора положения пучка на основе емкостных датчиков и корректирующего электромагнита, позволяет определять и корректировать траекторию пучка в режиме реального времени.

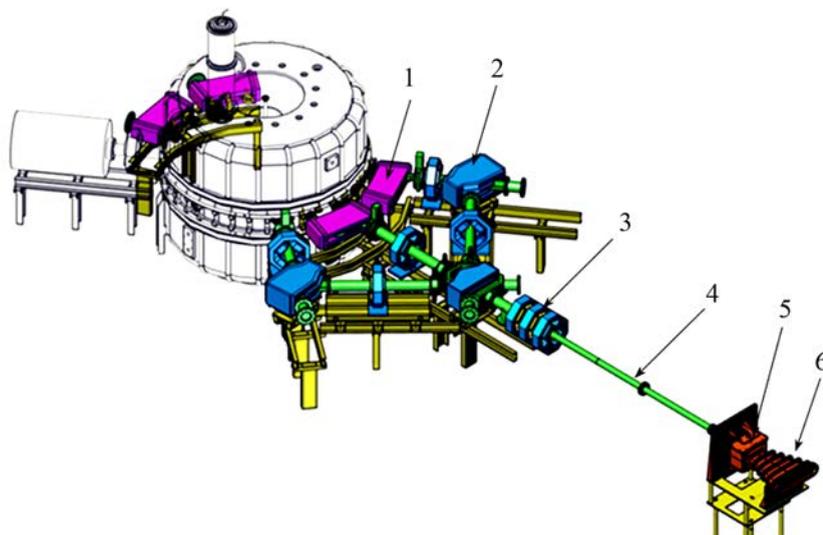


Рис. 3. Система магнитной проводки: 1 – магниты рециркуляции пучка; 2 – магниты транспортировки пучка; 3 – квадрупольные линзы; 4 – вакуумный тракт проводки пучка; 5 – сканирующий магнит; 6 – вакуумный растроб

Текущее состояние ускорителя

На рис. 4 представлено текущее исполнение установки, позволяющее отработать основные физические принципы ускорения (до пяти проходов ускоряющего резонатора) при пониженной мощности пучка (до 10 кВт).

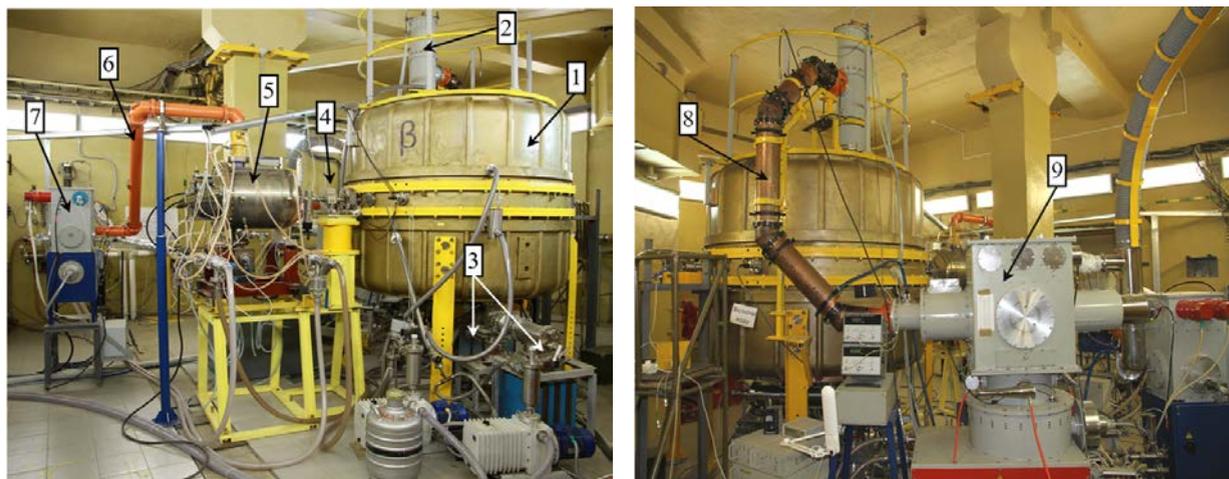


Рис. 4. Внешний вид ускорителя: 1 – ускоряющий коаксиальный резонатор; 2 – узел ввода мощности; 3 – вакуумная система; 4 – канал инжекции электронного пучка; 5 – ВЧ инжектор электронов; 6 – фидер ВЧ инжектора; 7 – генератор ВЧ инжектора; 8 – фидер ускоряющего резонатора; 9 – генераторный модуль ВЧ мощности

В таком исполнении ВЧ питание резонатора осуществляется от одного ВЧ генератора мощностью до 180 кВт.

Для достижения электронов с энергией 3 МэВ с внешней стороны ускоряющего резонатора размещен дипольный поворотный магнит, обеспечивающий разворот пучка обратно в ускоряющий резонатор и экранирующий пучок от воздействия тормозящей фазы поля.

Экспериментальные результаты

Начальные исследования электронного пучка на ускорителе после одного и двух проходов проведены в импульсном режиме включения генераторного модуля. За счет изменения частоты генерации электронных сгустков средний ток пучка варьировался от 10 до 100 мкА.

Для определения наличия пучка ускоренных электронов напротив соответствующего выводного устройства был установлен сцинтиляционный экран. Сцинтиллятор формировал изображение в видимом спектре, характеризующее распределение электронов в поперечном сечении пучка. Для регистрации интегральной картины свечения экрана использовалась цифровая видеокамера [5]. На рис. 5 представлены характерные изображения свечения сцинтиллятора.

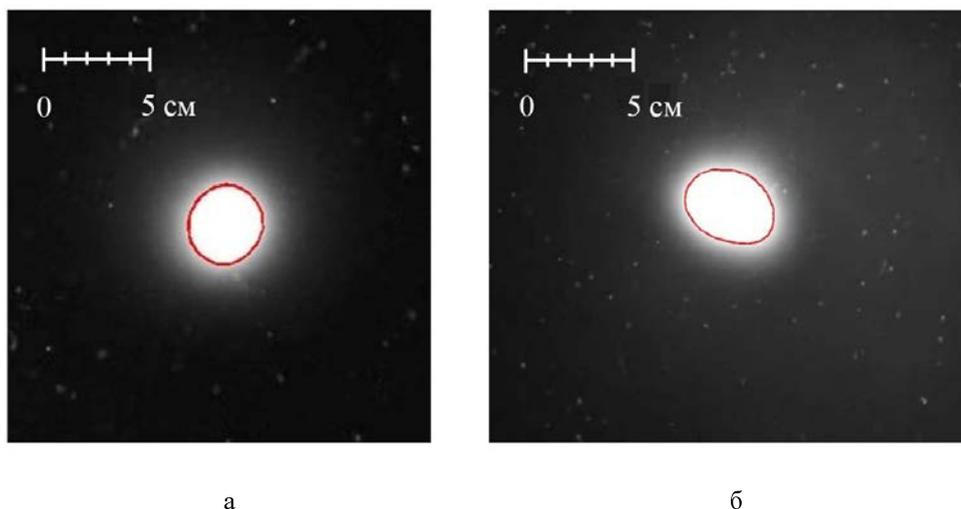


Рис. 5. Картина свечения сцинтиллятора: 1,5 МэВ (а) и 3 МэВ (б)

Методом поглощающих фильтров [6] была измерена энергия ускоренных электронов. С помощью расчетного и экспериментального распределений заряда в пластинах был восстановлен энергетический спектр ускоренных электронов (рис. 6).

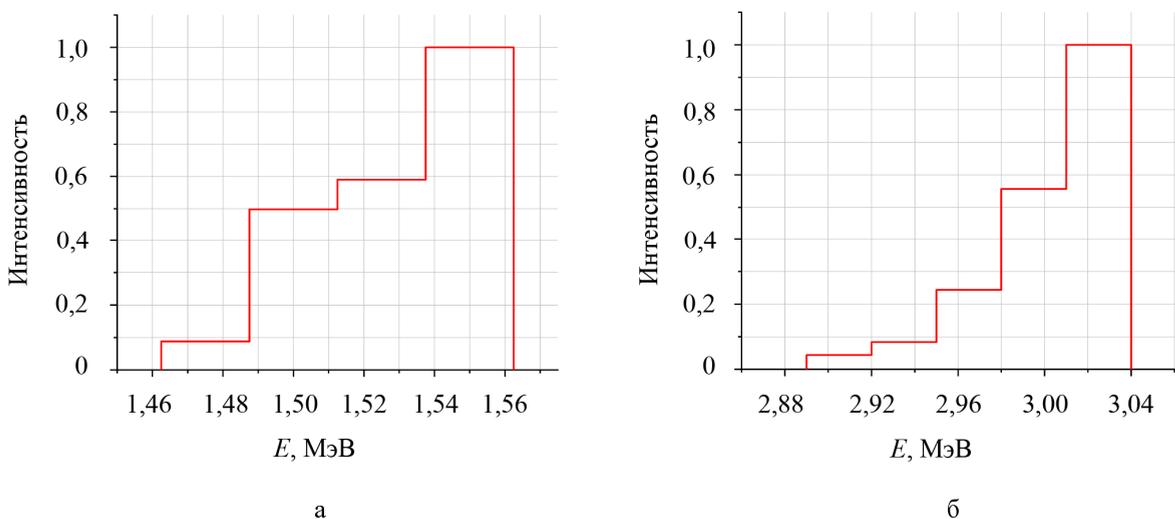


Рис. 6. Восстановленный энергетический спектр электронов после одного (а) и двух (б) проходов

В случае однократного режима работы ускорителя средняя энергия ускоренных электронов составила 1,52 МэВ. Энергетический разброс – не более 100 кэВ. В случае двухкратного режима – 3 МэВ с энергетическим разбросом – не более 200 кэВ.

Заключение

Представлено состояние работ по созданию резонансного ускорителя электронов, предназначенного для генерации пучка электронов с энергией до 7,5 МэВ и средней мощностью пучка до 300 кВт.

С целью отработки физических принципов ускорения на текущей конфигурации ускорителя произведены первые экспериментальные исследования характеристик электронного пучка при среднем токе пучка до 100 мкА.

В результате проведенных исследований показана возможность получения ускоренных электронов с энергией 1,5 и 3 МэВ на рассмотренном ускорителе. Расчетным способом определены критерии инжекции электронов в ускоряющий резонатор.

Экспериментально полученные характеристики пучка хорошо коррелируют с результатами расчетов и подтверждают возможность реализации пятикратного режима ускорения для достижения максимальной величины энергии электронов 7,5 МэВ.

Список литературы

1. Telnov A. V., Smetanin M. L., Opekunov A. M. Progress in CW Mode Electron Resonance Accelerator Development // Proc. of XXV Russian Particle Accelerator Conference «RUPAC'16». 2017. P. 185–187.
2. Pottier J. A New Type of RF Electron Accelerator: the Rhodotron // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1989. Vol. B40/41. P. 943–945.
3. Арбузов В. С., Бирючевский Ю. А., Горникер Э. И. и др. ВЧ генератор для резонансного ускорителя электронов на основе коаксиального резонатора // Сб. тр. Межд. конф. «XII Харитоновские тематические научные чтения. Проблемы физики высоких плотностей энергии». 2010. С. 28–32.
4. Volkov V. N., Arbuzov V. S., Chernov K. N. et al. CW 100 keV Electron RF Injector for 40 mA Average Beam Current // Proc. of XXIV Russian Particle Accelerator Conference (RUPAC'14). 2014. P. 309–311.
5. Жуков И. В., Мочалов М. Р., Сорокин А. Л. Интеллектуальный визуальный датчик событий // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 15. 2010. С. 506–513.
6. Курапов Н. Н., Бодряшкин Я. В., Леонтьев В. Н. и др. Система оперативного контроля энергии электронного пучка ускорителей ЛУ-7-2 и ЛУ-10-20 // Сб. тр. Межд. конф. «XVIII Харитоновские тематические научные чтения. Проблемы физики высоких плотностей энергии». 2017. С. 222–228.

Status Report of Development of High Power Beam CW Electron Accelerator

A. V. Telnov, N. V. Zavyalov, M. L. Smetanin, I. V. Shorikov, S. A. Putevskoj, S. M. Treskov,
N. N. Kurapov, V. V. Kuznetsov, A. M. Opekunov, L. E. Polyakov, A. N. Shein,
G. P. Pospelov, I. A. Mashin, A. N. Belyaev, I. V. Zhukov, Ya. V. Bodryashkin

The present paper describes the current status of CW resonance electron accelerator design at RFNC-VNIIEF. The range of output electron energy is from 1.5 MeV to 7.5 MeV. The average power of electron beam is up to 300 kW. Parameters of basic accelerator components (RF power supply system, RF injector, accelerating structure, beam transport system) are presented. The electron acceleration scheme is displayed in this paper. First experiments were carried out. As a result, 1.5 and 3 MeV electron beams were obtained. The average beam current is up to 100 μ A. Derived beam characteristics confirm physical principles of designed accelerator.

УДК 621.384.6

DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_326

Состояние и перспективы развития ускорителей заряженных частиц в РФЯЦ-ВНИИЭФ

Н. В. Завьялов, С. В. Воронцов, В. С. Гордеев, А. В. Грунин, Л. Н. Генералов, С. Л. Глушков, А. А. Девяткин, С. А. Лазарев, Г. А. Мысков, С. Т. Назаренко, В. С. Павлов, В. И. Смердов, М. Л. Сметанин, К. В. Страбыкин, А. В. Тельнов, И. В. Шориков, С. Л. Эляш, В. А. Юхневич

В 1960-х гг. в РФЯЦ-ВНИИЭФ была создана большая экспериментально-испытательная база установок и комплексов, позволяющая проводить исследования радиационной стойкости электронно-компонентной базы и радиоэлектронной аппаратуры, рентгенографические исследования быстротекущих процессов, ядерно-физические исследования. Экспериментально-испытательная база РФЯЦ-ВНИИЭФ является базой федерального значения и обеспечивает потребности организаций ГК «Росатом», министерства обороны, министерства промышленности и торговли и ГК «Роскосмос». В состав базы входят импульсные сильноточные ускорители электронов, импульсные ядерные реакторы (ИЯР), линейные резонансные ускорители электронов, электростатический перезарядный ускоритель ЭПП-10, плазменные импульсные генераторы нейтронного излучения. На базе импульсных ускорителей и ИЯР созданы облучательные комплексы.

Линейный индукционный ускоритель (ЛИУ) электронов ЛИУ-30 [1–3], являющийся базовой установкой многоцелевого облучательного комплекса «ПУЛЬСАР» [4, 5], был введен в эксплуатацию в 1988 г. Ускоритель позволяет получать рекордную для установок своего класса энергию ускоренных электронов до 40 МэВ при токе пучка ~ 100 кА в импульсе длительностью ~ 20 нс и является одним из наиболее мощных в мире источников коротких импульсов тормозного излучения (ТИ). Общий вид ускорителя ЛИУ-30 представлен на рис. 1.

Ускоряющая система ЛИУ-30 в настоящее время выполнена в виде 32-модульной структуры с автономным питанием и управлением каждого модуля. Каждый модуль ускорительного тракта содержит один блок из четырех индукторов на радиальных линиях с водяной изоляцией, имеющих общую ускорительную трубку. Помимо 32 модулей в конструкцию ускорителя входят тракт транспортировки и выводное устройство с мишенью, обеспечивающие устойчивую транс-

портировку пучка и формирование поля ТИ в облучательном зале комплекса ПУЛЬСАР. Длина ускоряющей системы ~ 23 м, вместе с трактом транспортировки ~ 30 м, ширина $\sim 9,5$ м, высота ~ 4 м.



Рис. 1. Общий вид ускорителя ЛИУ-30

Наиболее стабильный режим генерации ТИ отработан при амплитуде тока пучка 70 кА, когда доза ТИ за импульс на расстоянии 1 м от мишени составляет $\sim 4,5$ кР, средняя мощность дозы $\sim 2,5 \cdot 10^{11}$ Р/с при длительности импульса ТИ на полувысоте ~ 18 нс.

К выходу транспортировочного тракта может быть пристыкована система компрессии электронного пучка для радиального сжатия пучка нарастающим вдоль оси магнитным полем, что позволяет получить дозу ~ 240 крад (ТЛД) и мощность дозы ТИ $\sim 1,5 \cdot 10^{13}$ рад/с в пятне площадью ~ 100 см² с неоднородностью облучения 50 % при длительности импульса излучения $\tau_{1/2} \approx 16$ нс [6].

В период с 2006 по 2015 гг. без остановок в работе ускорителя были последовательно модернизированы ускорительные блоки индукторов и секции тракта транспортировки, в результате чего существенно повышены надежность и стабильность функционирования ускорителя ЛИУ-30 [7, 8].

Базовой установкой облучательного комплекса ЛИУ-10М-ГИР2 является линейный индукционный ускоритель ЛИУ-10М [9, 10]. Ускоритель выполнен на основе разработанных во ВНИИЭФ ступенчатых формирующих линий, обеспечивающих в результате волновых процессов повышение в несколько раз выходного ускоряющего напряжения по сравнению с зарядным напряжением линии. Ускоряющая система (рис. 2) состоит из инжектора, 16 типовых ускорительных модулей, включающих в свой состав по одному индуктору, тракта транспортировки электронного пучка длиной 4 м и выводного устройства с мишенным узлом. Размеры ускоряющей системы без тракта транспортировки – $(12 \times 3,5 \times 2,4)$ м³. Диаметр индукторов – 1,1 м, осевой размер – 0,58 м.

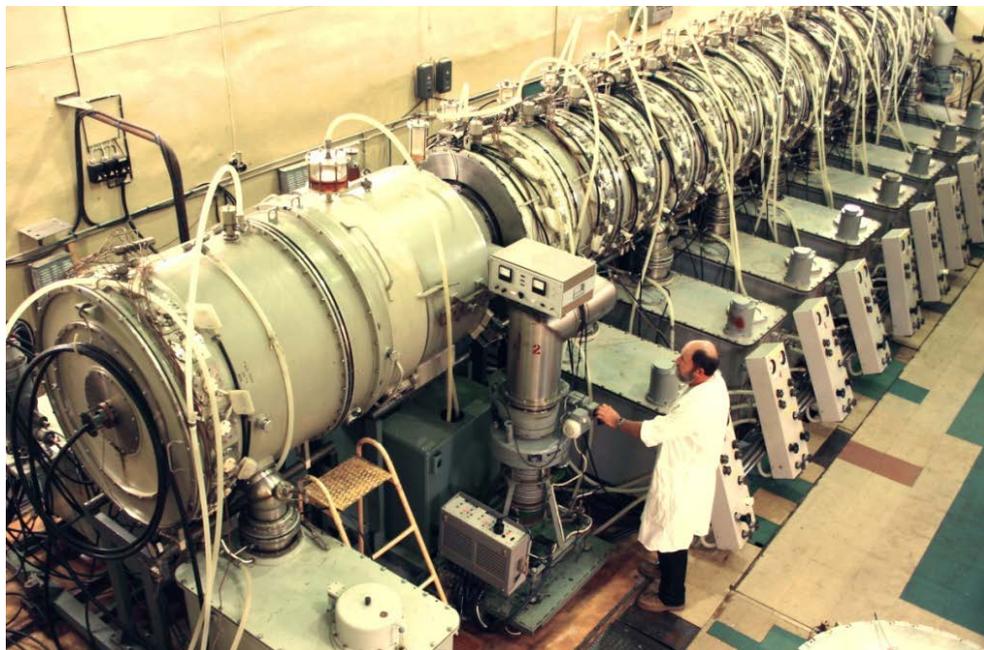


Рис. 2. Общий вид ускорителя ЛИУ-10М

На расстоянии 1 м от мишени мощность дозы импульса ТИ, генерируемого ускорителем, составляет $4 \cdot 10^{10}$ Р/с при длительности импульса на полувывоте от 10 до 20 нс. В режиме компрессии электронного пучка вблизи мишени ускорителя получена мощность дозы ТИ $\sim 4 \cdot 10^{12}$ Р/с в пятне диаметром 8 см при длительности импульса (15 ± 3) нс. При этом доза ТИ достигает ~ 60 кР. Граничная энергия ускоренных электронов и, соответственно, квантов ТИ достигает 25 МэВ.

С целью обеспечения более полного моделирования воздействия проникающих излучений оба комплекса дооснащены дополнительными электрофизическими установками: импульсным ускорителем электронов СТРАУС-2 [11, 12] и малогабаритным импульсным ускорителем электронов АРСА [13], размещенными в облучательных залах комплексов. Кроме того, облучательный комплекс ПУЛЬСАР дооснащен двумя генераторами импульсов рентгеновского излучения ИЛТИ-1, рентгеновской статической установкой УРС и линейным резонансным ускорителем электронов ЛУ-7-2 [14].

Ускоритель СТРАУС-2 (рис. 3) создан на основе пятикаскадной двойной ступенчатой формирующей линии с водяной изоляцией с внешним диаметром 1,3 м. В режиме работы ускорителя с граничной энергией электронов ~ 3 МэВ амплитуда тока пучка ~ 50 кА. Мощность дозы ТИ на расстоянии 1 м от мишени составляет 10^9 Р/с, вблизи мишени – до 10^{12} Р/с при длительности импульса на полувывоте ~ 20 нс. Отличительной особенностью ускорителя СТРАУС-2 комплекса ПУЛЬСАР является то, что все системы установки смонтированы на перемещаемой краном платформе.



Рис. 3. Общий вид ускорителя СТРАУС-2

Малогабаритный ускоритель АРСА (рис. 4) предназначен для моделирования воздействия импульсного гамма-излучения на ИЭТ и радиоэлектронную аппаратуру. Габариты ускорителя: диаметр 0,2 м, длина – 0,9 м. Точность синхронизации с другими электрофизическими установками комплексов ± 12 мкс. В основе конструкции ускорителя АРСА – генератор Аркадьева–Маркса с импульсной зарядкой накопительных емкостей. Источником излучения является отпаянная ускорительная трубка с катодом лезвийного типа. Амплитуда ускоряющего напряжения – 1 МВ. Мощность дозы электронного излучения у мишени – $1 \cdot 10^{14}$ Р/с. Мощность дозы у мишени – $3 \cdot 10^{10}$ Р/с в пятне диаметром 1 см при длительности импульса ТИ 4 нс. Производительность – до 100 импульсов в смену.

Перемещаемый генератор мощных импульсов рентгеновского излучения – ускоритель ИЛТИ-1 (рис. 5) предназначен для моделирования последовательного во времени воздействия двух или трех импульсов ТИ при его совместной работе с ускорителями ЛИУ-30 и СТРАУС-2.

В автономном режиме работы ускоритель ИЛТИ-1 обеспечивает нагружение отдельных приборов излучением со смягченным спектром за счет специально разработанной близкофокусной ускорительной трубки с выводом излучения из тыльного полупространства мишени. Это



Рис. 4. Общий вид ускорителя АРСА

по сравнению с общепринятым подходом позволило увеличить с 15 до 50 % долю энергии излучения в диапазоне от 10 до 100 кэВ. Угол выхода рентгеновского излучения в такой геометрии составляет 60° . При амплитуде ускоряющего напряжения 700 кВ ток пучка составляет ~ 70 кА.

Транспортабельный линейный резонансный ускоритель электронов ЛУ-7-2, созданный в 2004 г., начал работать в составе комплекса ПУЛЬСАР в 2007 г. Характеристики ускорителя ЛУ-7-2: энергия электронов – 6,5 МэВ; длительность импульсов – 4,5 мкс; средняя мощность пучка электронов – 2 кВт; средняя мощность экспозиционной дозы ТИ – до 25 Р/с на площади 800 см^2 с неоднородностью не хуже 30 %; частота повторения импульсов – 600 Гц. Он сконструирован на несущей платформе и может использоваться в промышленных радиационных технологиях и для дефектоскопии объектов с большими массовыми толщинами. Общий вид ускорителя ЛУ-7-2 представлен на рис. 6.



Рис. 5. Общий вид ускорителя ИЛТИ-1



Рис. 6. Общий вид ускорителя ЛУ-7-2

Наряду с ускорителями, описанными выше, для моделирования дозового воздействия гамма-излучения используется линейный резонансный ускоритель ЛУ-10-20 [15], представленный на рис. 7.

Характеристики ускорителя ЛУ-10-20: энергия ускоренных электронов (регулируемая) – от 5 до 9 МэВ; средний ток – 1,3 мА; длительность импульсов – 3,5 мкс; частота повторения импульсов – от 10 до 1000 Гц; мощность поглощенной дозы электронного излучения вблизи выходного окна – до 5 Мрад/с; мощность экспозиционной дозы ТИ на расстоянии 1 м от мишени на площади диаметром 0,2 м с неоднородностью не хуже 30 % – до 50 Р/с. Средняя мощность пучка электронов – 10 кВт. Система развертки электронного пучка и транспортировочная линия позволяют облучать объекты шириной до 700 мм, длиной до 2000 мм и высотой до 750 мм.



Рис. 7. Общий вид ускорителя ЛУ-10-20

Линейный резонансный ускоритель ЛУ-50 [16], созданный совместно с Московским радиотехническим институтом, представлен на рис. 8. Характеристики ускорителя ЛУ-50: энергия ускоренных электронов – 55 МэВ; средний ток электронов – 0,24 мА; импульсный ток – 10 А; средняя энергия квантов ТИ ~6 МэВ; длительность импульсов – 10 нс; средняя мощность пучка – 10 кВт; частота следования импульсов ускоренных электронов может регулироваться от однократных до 2400 Гц. Это позволяет без перестройки ускорителя менять темп облучения.

Одним из основных инструментов для проведения ядерно-физических исследований во ВНИИЭФ является электростатический тандемный ускоритель ЭГП-10 [17, 18]. Ряд оригинальных разработок обеспечил ему наилучшие показатели среди электростатических ускорителей России. Ускоритель позволяет ускорять ионы водорода, кислорода, углерода. Для протонов рабочий диапазон энергий составляет от 1,5 до 12 МэВ при максимальном токе пучка 1 мкА. При этом монохроматичность ускоренных протонов (при энергии 9,345 МэВ) не хуже 1 кэВ.



Рис. 8. Общий вид ускорителя ЛУ-50

В течение нескольких последних лет для импульсной радиографии создан индукционный ускоритель ЛИУ-Р-Т [10] (12 МэВ, 20 кА, 60 нс), общий вид которого представлен на рис. 9. По своим дозовым параметрам ЛИУ-Р-Т на порядок превосходит имеющиеся отечественные аналоги и приближается к лучшим зарубежным установкам подобного класса. Экспозиционная доза излучения на расстоянии 1 м от мишени ускорителя достигает 300 Р при длительности рентгеновского импульса 50 нс и диаметре фокусного пятна источника 2,5–5 мм.

Ускоряющая система ЛИУ-Р-Т построена на основе развитой в РФЯЦ-ВНИИЭФ технологии «безжелезных» ЛИУ с водоизолированными индукторами на основе ступенчатых формирующих линий с распределенными параметрами. Это позволило вдвое повысить темп ускорения и увеличить в 5–10 раз ток электронного пучка по сравнению с наиболее мощными зарубежными рентгенографическими установками (DARHT, AIRIX, Dragon), выполненными по схеме классических ЛИУ с индукторами на ферромагнитных сердечниках. С 2015 г. ускоритель ЛИУ-Р-Т эксплуатируется совместно с тремя бетатронами БИМ234-3000 в составе многолучевого радиографического комплекса.



Рис. 9. Общий вид ускорителя ЛИУ-Р-Т

В рамках работ по развитию экспериментальной базы в РФЯЦ-ВНИИЭФ создается мультитераваттная электрофизическая установка (2 МэВ, 12 МА, 65 нс) [19]. К настоящему времени создана четырехмодульная установка [20], состоящая из четырех импульсных сильноточных ускорителей электронов (2 МэВ, 750 кА, 65 нс). Общий вид четырехмодульной установки представлен на рис. 10. Основное назначение установки – генерация импульсов ТИ с максимальной энергией квантов до 2 МэВ.

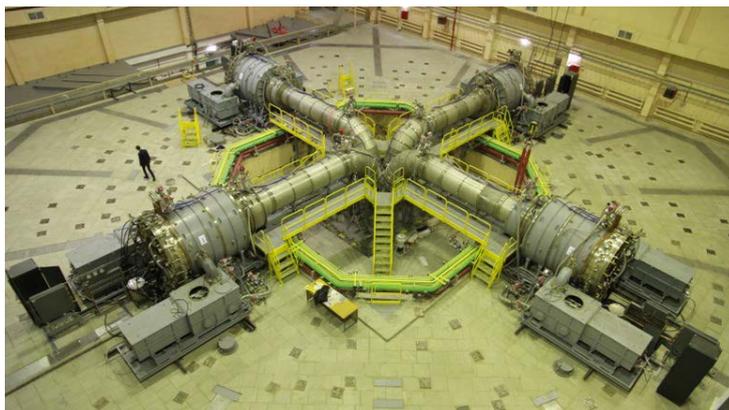


Рис. 10. Общий вид четырехмодульной установки

Установку планируется использовать в двух режимах. В первом из них модули установки полностью автономны и нагрузкой каждого из них является отдельный сильноточный вакуумный диод, при этом диоды расположены вплотную друг к другу, образуя матрицу из четырех дискретных излучателей. Поле излучения, формируемое установкой, является суперпозицией полей излучения ее отдельных модулей. Во втором режиме планируется включать модули установки параллельно на единую диодную нагрузку [21] с целью увеличения плотности энергии излучения по сравнению с режимом автономных модулей.

Также планируется работа установки в режимах:

- генерации мягкого рентгеновского излучения (МРИ) при работе на плазменную нагрузку (проволочный лайнер). Согласно расчетам, энергия, передаваемая в импульс МРИ, должна составить 75 кДж при длительности импульса 5 нс;

- ударно-волнового и квазизизоэнтропического сжатия материалов давлением до 50 ГПа.

В настоящее время в РФЯЦ-ВНИИЭФ осуществляется разработка резонансного электронного ускорителя с высокой средней мощностью пучка [22, 23]. Его основной элемент – ускоряющий коаксиальный полуволновой резонатор с рабочей частотой 100 МГц. Ускоритель предназначен для работы в импульсно-периодическом и непрерывном режимах генерации пучка. Создание такого ускорителя позволит получать пучки ускоренных электронов с энергиями 1,5; 4,5 и 7,5 МэВ в одном общем выводном устройстве при средней мощности пучка до 300 кВт.

В настоящее время создан действующий полномасштабный макет ускорителя, представленный на рис. 11, включающий в себя ускоряющий коаксиальный резонатор, ВЧ инжектор, модуль ВЧ генератора, рассчитанный на 180 кВт выходной средней мощности, тракт ВЧ транспортировки, узел ввода ВЧ мощности, технологические системы, автоматизированную систему управления, а также элементы системы магнитной транспортировки и вывода электронного пучка.

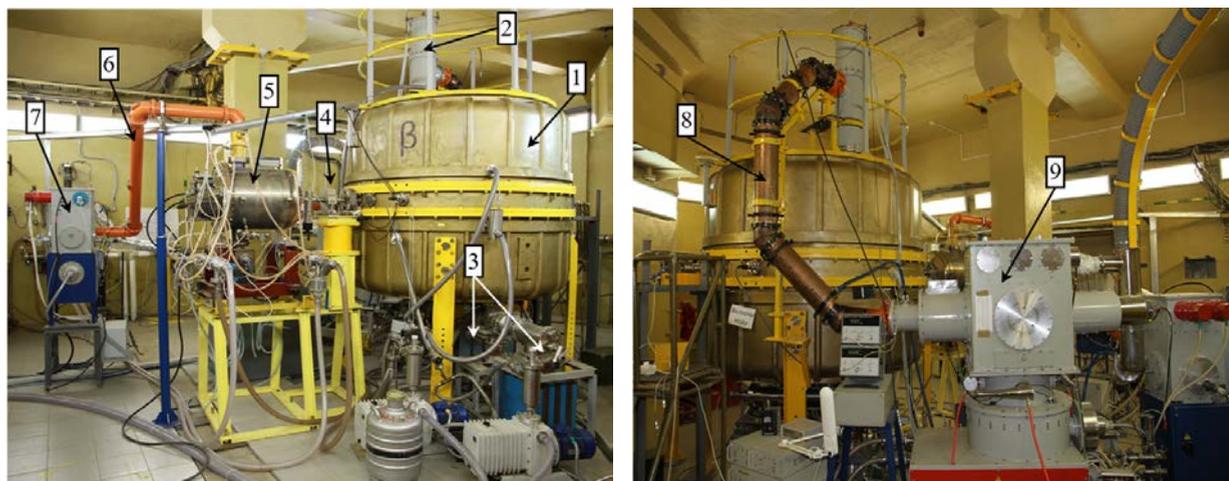


Рис. 11. Общий вид макета ускорителя с высокой средней мощностью пучка: 1 – коаксиальный ускоряющий резонатор; 2 – узел ввода мощности; 3 – вакуумная система; 4 – канал инжекции электронного пучка; 5 – ВЧ инжектор; 6 – фидер питания резонатора ВЧ инжектора; 7 – ВЧ генератор ВЧ инжектора; 8 – фидер питания ускоряющего коаксиального резонатора; 9 – ВЧ генератор 180 кВт

При подаваемой в ускоряющий резонатор ВЧ мощности, равной 160 кВт в одно- и двухпроходном режимах ускорения, получен пучок электронов со средней энергией 1,52 и 3 МэВ, соответственно, при среднем токе до 100 мкА. Дальнейшее развитие предусматривает реализацию пятипроходного режима ускорения с одновременным наращиванием мощности ВЧ питания вплоть до 540 кВт.

Для определения временного разрешения наносекундных детекторов импульсов электронного и тормозного излучения, аттестации и контроля работоспособности измерительных каналов в РФЯЦ-ВНИИЭФ разработан субнаносекундный ускоритель электронов с газонаполненным формирователем [24]. Ускоритель создан на базе малогабаритного ускорителя АРСА с газонапол-

ненным формирователем субнаносекундных импульсов. Схема с двойным обострением позволила получить электронный пучок с длительностью импульсов тока $0,25 \pm 0,02$ нс и амплитудой импульсов ~ 15 кА при максимальной энергии электронов ~ 850 кэВ.

Список литературы

1. Pavlovskii A. I., Bossamykin V. S., Savchenko V. A. et al. Linear Accelerator with Radial Lines – LIA-30 // Proc. of the 9th Intern. Conf. on High Power Particle Beams. BEAMS-92. 1992. P. 205.
2. Павловский А. И., Босамыкин В. С., Герасимов А. И. и др. Мощный линейный импульсный ускоритель пучка электронов на радиальных линиях ЛИУ-30 // ПТЭ. 1998. № 2. С. 13–25.
3. Босамыкин В. С., Герасимов А. И., Гордеев В. С. Безжелезные линейные индукционные ускорители электронов – мощные генераторы коротких импульсов тормозного излучения // Сборник научных трудов РФЯЦ-ВНИИЭФ. 1997. С. 107–133.
4. Савченко В. А., Гордеев В. С., Басманов В. Ф. и др. Развитие во ВНИИЭФ на основе линейных индукционных ускорителей установок, моделирующих поражающее воздействие мгновенного гамма-излучения ЯО на ВВТ // Сб. мат. IV конференции по истории разработок ядерного оружия. 2002. С. 73–80.
5. Пунин В. Т., Савченко В. А., Завьялов Н. В. и др. Мощные линейные индукционные ускорители электронов и облучательные комплексы на их основе для радиационных исследований // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 1. 2001. С. 356–363.
6. Punin V. T., Zavyalov N. V., Basmanov V. F. et al. Generation of Bremsstrahlung Fields of Higher than 10^{13} rad/s Intensity in the Mode of LIA-30 Electron Beam Focusing // Proc. of the 15-th Intern. Conf. on High-Power Particle Beams BEAMS-2004. RF. 2004. P. 53.
7. Завьялов Н. В., Басманов В. Ф., Пунин В. Т. и др. Повышение надежности работы установки ЛИУ-30 // Сб. тр. Межд. конф. «XVIII Харитоновские тематические научные чтения». 2016. С. 105–108.
8. Завьялов Н. В., Гордеев В. С., Горностай-Польский С. А. и др. Повышение стабильности работы линейного индукционного ускорителя электронов ЛИУ-30 // Там же. С. 100–104.
9. Bossamykin V. S., Gordeev V. S., Pavlovskii A. I. et al. Linear Induction Accelerator LIA-10M // Proc. 9-th IEEE Pulse Power Conf. 1993. P. 905–907.
10. Басманов В. Ф., Гордеев В. С., Гришин А. В. и др. Обзор сильноточных ускорителей электронов, созданных в РФЯЦ-ВНИИЭФ на базе ступенчатых линий // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 20. 2015. С. 172–182.
11. Bossamykin V. S., Gordeev V. S., Pavlovskii A. I. et al. STRAUS-2 Electron Pulsed Accelerator // Proc. 9-th IEEE Pulse Power Conf. 1993. P. 910–912.
12. Гордеев В. С., Мысков Г. А., Филиппов В. О., Аверченков В. Я. Исследование характеристик импульсного электронного ускорителя СТРАУС-2 // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 1. 2001. С. 402–407.

13. Эльяш С. Л., Александрин А. И., Донской Е. Н. и др. Ускоритель АРСА – малогабаритный источник наносекундных импульсов электронного и рентгеновского излучений // Физика и техника импульсных источников ионизирующих излучений для исследования быстропротекающих процессов // Сб. тр. ученых ядерных центров России. 1996. № 5. С. 229–237.
14. Шориков И. В., Завьялов Н. В., Хохлов Ю. А. и др. Малогабаритный линейный ускоритель электронов для гаммаграфии крупногабаритных объектов // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 3. 2002. С. 142–147.
15. Завьялов Н. В., Хохлов Ю. А., Иньков В. И. и др. Промышленный линейный ускоритель электронов ЛУ-10-20 // ВАНТ. Сер. Ядерно-физические исследования. Вып. 2, 3 (29, 30). Харьков, 1997. С. 39–41.
16. Khohlov Yu. A., Zavyalov N. V., Ivanin I. A. et al. Linear Accelerator of All-Union Scientific Research Institute of Experimental Physics for Neutron Spectroscopy. Nuclear Data for Science and Technology // Proc. of an Intern. Conf. 1991. P. 487–489.
17. Алмазов А. В., Миронов Б. В., Мынцов Ф. Ф. и др. Электростатический ускоритель с перезарядкой // ПТЭ. 1968. № 6. С. 23–30.
18. Алмазов А. В., Мынцов Ф. Ф., Серов Ю. А. Повышение энергии электростатического ускорителя с перезарядкой с 10,5 до 14 МэВ // Там же. 1970. № 5. С. 20–23.
19. Гордеев В. С., Мысков Г. А., Михайлов Е. С., Лаптев Д. В. Проект сильноточного импульсного ускорителя электронов // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Вып. 3. 2002. С. 176–183.
20. Zavyalov N. V., Gordeev V. S., Punin V. T. et al. Design of Electro-physical Facility «Gamma-4» // Proc. of the 41st IEEE International Conference on Plasma Science and 20th International Conference on High-Power Particle Beams (ICOPS/BEAMS 2014). Washington, DC, USA. May 2014. P. 674–678.
21. Завьялов Н. В., Гордеев В. С., Гришин А. В. и др. Расчетное обоснование единой диодной нагрузки для экспериментальной установки «Гамма-4» // Сб. тр. Межд. конф. «XVIII Харитоновские тематические научные чтения». 2017. С. 136–139.
22. Telnov A. V., Gordeev V. S., Zavyalov N. V. et al. Progress in CW Mode Electron Resonance Accelerator BETA-8 Development // Proc. of XXV Russian Particle Accelerator Conference «RUPAC-2016». 2017. P. 185–187.
23. Гладышев Е. Н., Гордеев В. С., Завьялов Н. В. и др. Состояние работ по проекту создания электронного резонансного ускорителя непрерывного действия БЕТА-8 // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2015. Вып. 20. Ч. 1. С. 184–193.
24. Юрьев А. Л., Эльяш С. Л., Лойко Т. В. и др. Сильноточный субнаносекундный ускоритель электронов с газонаполненным формирователем // ПТЭ. 2017. № 6. С. 78–82.

Status and Development Prospects of Charged-Particle Accelerators in RFNC-VNIIEF

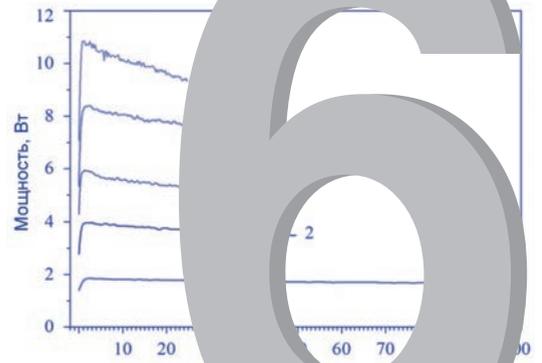
**N. V. Zavyalov, S. V. Vorontsov, V. S. Gordeev, A. V. Grunin, L. N. Generalov, S. L. Glushkov,
A. A. Devyatkin, S. A. Lazarev, G. A. Myskov, S. T. Nazarenko, V. S. Pavlov, V. I. Smerdov,
M. L. Smetanin, K. V. Strabykin, A. V. Telnov, I. V. Shorikov, S. L. Elyash, V. A. Yukhnevich**

In the 1960s large experimental and test base of facilities and complexes have been developed in RFNC-VNIIEF. It allows studies of radiation hardness for electronic component base and electronic radio equipment, radiographic examinations of fast processes, nuclear physics researches. Experimental and test base of RFNC-VNIIEF is a federal importance base and provides needs of enterprises: state corporation (SC) «Rosatom», Department of Defense, Department of Industry and Trade and SC «Roscosmos». The base involves pulse high-current electron accelerators, pulsed nuclear reactors, linear resonance electron accelerators, electrostatic tandem accelerator EGP-10, plasma pulsed neutron radiation generators. Irradiation complexes are developed on the basis of linear induction electron accelerators and pulsed nuclear reactors.

СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 6

*Захаров Н. Г., Захряпа А. В., Козловский В. И., Коростелин Ю. В.,
Скасьрский Я. К., Фролов М. П., Чуваткин Р. С., Юткин И. М.*
Импульсно-периодический Fe:ZnSe-лазер с термоэлектрическим
охлаждением 340

РАЗДЕЛ



ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ

Импульсно- периодический Fe: ZnSe-лазер с термоэлектрическим охлаждением

Н. Г. Захаров, А. В. Захряпа,
В. И. Козловский*, Ю. В. Коростелин*,
Я. К. Скасырский*, М. П. Фролов*,
Р. С. Чуваткин, И. М. Юткин

Исследовался импульсно-периодический режим генерации в лазере на кристалле Fe:ZnSe, охлаждаемом до температуры 195 К двумя термоэлектрическими модулями с максимальной холодильной мощностью 34 Вт. Источником накачки служили два импульсных синхронизованных Er:YAG-лазера, работавших в режиме свободной генерации. Продемонстрировано, что в короткой серии импульсов средняя мощность может превышать 10 Вт. В установившемся температурном режиме достигнута средняя мощность в 3,1 Вт. Спектр генерации имел центр на длине волны 4,38 мкм. Полный угол расходимости составил 5 мрад.

Введение

Соединения A_2B_6 , легированные двухвалентными ионами хрома и железа, вот уже в течение двадцати лет активно изучаются как перспективные лазерные среды для спектрального диапазона 2–7 мкм. Значительная часть исследований в последнее время связана с практическими применениями лазеров данного типа в высокочувствительных методах спектрального анализа [1–8], в спектроскопии сверхвысокого разрешения [9–11], а также с разработкой источников фемтосекундных импульсов инфракрасной области спектра [12–18].

Большое внимание также уделяется разработке мощных импульсных лазеров на основе Fe:ZnSe для спектрального диапазона 3,8–5 мкм, в котором расположено одно из окон прозрачности атмосферы (4,1 мкм). Наилучшие результаты были получены при охлаждении активного элемента жидким азотом: в режиме однократных импульсов достигнута максимальная выходная энергия Fe:ZnSe-лазера 10,6 Дж [19]. В импульсно-периодическом режиме (частота следования импульсов 100 Гц) была продемонстрирована средняя выходная мощность 35 Вт [20]. В обоих случаях накачка осуществлялась 2,94-мкм излучением Er:YAG-лазеров с длительностью импульса в сотни микросекунд.

* Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, г. Москва.

© Квантовая электроника. 2019. 49(7). С. 641–648.

Для эффективной работы лазера при комнатной температуре необходимо использовать для накачки короткие импульсы, поскольку внутренняя квантовая эффективность лазерного перехода падает с увеличением температуры из-за активации многофононной безызлучательной рекомбинации. Например, при накачке 250-нс импульсами HF-лазера выходная энергия Fe:ZnSe-лазера при комнатной температуре достигала 1,67 Дж [21].

Основной проблемой масштабирования Fe:ZnSe-лазеров, работающих при комнатной температуре, является отсутствие удобных источников накачки, генерирующих мощные короткие импульсы излучения в окрестности 3 мкм. Кроме того, увеличение мощности накачки за счет сокращения импульса ограничено лучевой прочностью кристалла. С другой стороны, охлаждаемые жидким азотом Fe:ZnSe-лазеры, продемонстрировавшие самые высокие энергетические характеристики, неудобны для практического использования.

В связи с этим представляет интерес разработка Fe:ZnSe-лазеров с термоэлектрическим охлаждением. Такой подход, впервые примененный в работе [22], позволил в дальнейшем получить на кристалле Fe:ZnSe, охлаждаемом до 220 К трехкаскадным термоэлектрическим модулем, генерацию в окрестности длины волны 4,3 мкм с выходной энергией 7,5 Дж в режиме одиночных импульсов [23]. Цель настоящей работы – исследование импульсно-периодического режима генерации Fe:ZnSe-лазера с термоэлектрическим охлаждением и возможности достижения средней мощности ваттного уровня.

1. Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1, а.

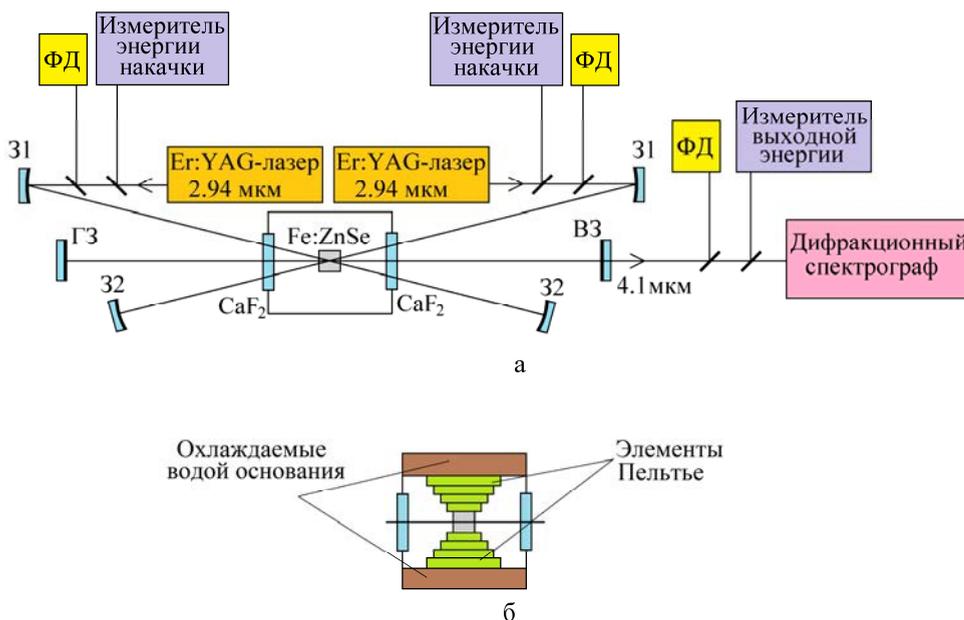


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: а – ГЗ, ВЗ – глухое и выходное зеркала резонатора Fe:ZnSe-лазера; CaF₂ – окна вакуумной камеры; 31 – зеркала, заводившие в кристалл Fe:ZnSe пучки накачки Er:YAG-лазеров; 32 – зеркала, возвращавшие в кристалл Fe:ZnSe отраженное его гранями и прошедшее через кристалл излучение накачки; ФД – фотодиоды; б – вакуумная камера (вид сбоку)

Использовались два активных элемента Fe:ZnSe-лазера. Оба элемента были изготовлены из двух различных монокристаллов, выращенных на кристаллической затравке физическим транспортом в гелии [24]. Один из них (элемент 1) имел форму параллелепипеда с активной длиной 17 мм (вдоль оси резонатора) и поперечными размерами 25×25 мм. Другой (элемент 2) имел форму цилиндра с активной длиной 19,6 мм и диаметром 12 мм. Спектры пропускания активных элементов представлены на рис. 2.

Рабочие грани активных элементов не просветлялись и были параллельны с точностью не хуже 30". Активные элементы размещались внутри вакуумной камеры и охлаждались с двух противоположных сторон двумя четырехкаскадными термоэлектрическими модулями ТВ-4-(199-97-49-17)-1.5 (KRYOTHERM), припаянными к медным радиаторам, охлаждаемым водой (см. рис. 1, б). Плоскопараллельные окна вакуумной камеры, изготовленные из CaF₂, и рабочие поверхности активного элемента были отъюстированы перпендикулярно оптической оси резонатора.

Температура активного элемента измерялась термопарой медь – константан. Типичная зависимость мощности тепла, которую может отводить один термоэлектрический модуль с «холодной» поверхности, от перепада температуры между «холодной» и «горячей» поверхностями представлена на рис. 3.

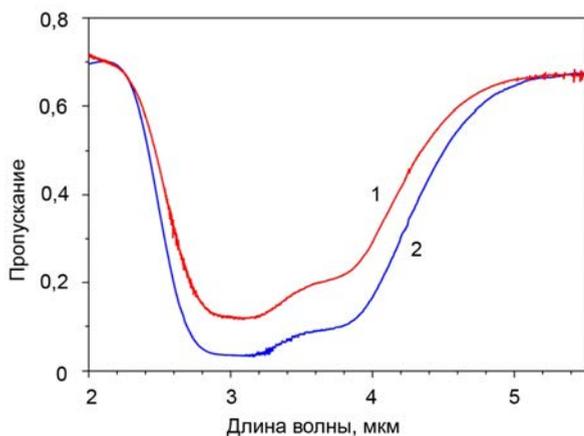


Рис. 2. Спектры пропускания двух активных элементов Fe:ZnSe: 1 (1) и 2 (2)

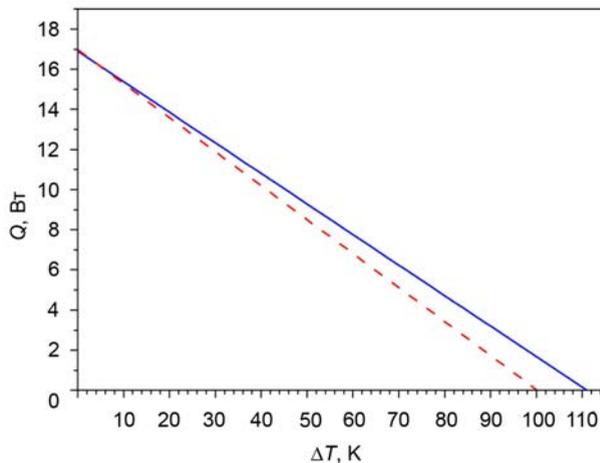


Рис. 3. Зависимость холодильной мощности термоэлектрического модуля от перепада температуры на нем по данным предприятия-изготовителя (сплошная линия) и с коррекцией максимально достижимого перепада, измеренного на установке (пунктир)

Сплошная линия на рис. 3 соответствует данным предприятия-изготовителя, причем значения максимального перепада и максимальной мощности даются с точностью 10 %. У нас на экспериментальной установке максимальный перепад температуры составил 100±2 К. Если предположить, что Q_{max} остается таким же, то зависимость соответствует пунктиру.

Накачка кристалла Fe:ZnSe осуществлялась на длине волны 2,94 мкм излучением двух импульсных Er:YAG-лазеров с ламповой накачкой, работавших в режиме свободной генерации. Зеркала были нанесены на торцы стержня. Синхроимпульс источника питания первого лазера запускал разряд второго лазера. Эксперименты проводились при длительности импульса разряда каждой лампы $\tau = 350$ или 700 мкс. Источники питания Er:YAG-лазеров обеспечивали частоту

следования импульсов до 20 Гц. На рис. 4 представлены осциллограммы тока первого лазера и выходных импульсов первого и второго лазеров накачки при $\tau = 700$ мкс. Видно, что во второй половине импульса накачки генерация в Er:YAG-лазере имеет более выраженный пиковый характер. Типичная длительность пиков равна 1 мкс.

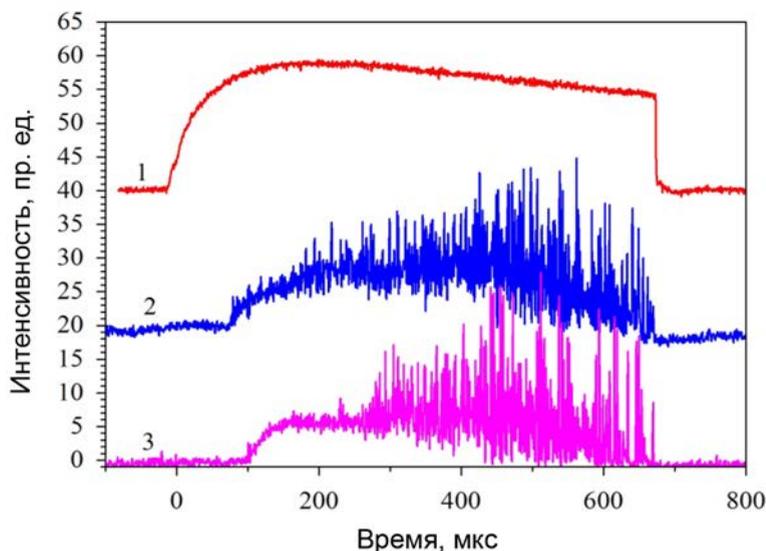


Рис. 4. Осциллограммы тока разряда в лампе первого лазера (1) и импульсов генерации первого (2) и второго (3) Er:YAG-лазеров накачки

При работе в режиме однократных импульсов максимальная суммарная энергия двух Er:YAG-лазеров составляла 12 Дж. В частотном режиме наблюдалось изменение энергии импульсов особенно в первые 2 с, что видно из рис. 5.

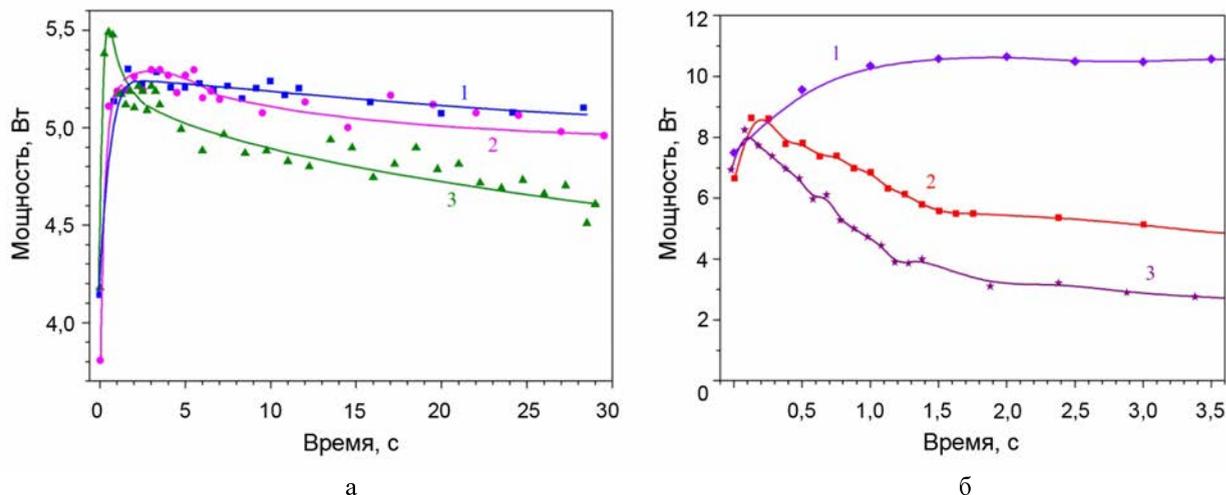


Рис. 5. Временное изменение средней мощности первого Er:YAG-лазера при двух значениях начальной средней мощности ~ 4 Вт (а) и ~ 7 Вт (б) и различных частотах повторения импульсов: (а) 1 – 1,2 Гц, 2 – 2 Гц, 3 – 4 Гц и (б) 1 – 2 Гц, 2 – 8 Гц, 3 – 10 Гц

При малых частотах (1–4 Гц, см. рис. 5,а) энергия импульса излучения Er:YAG-лазера растет в течение первой секунды. При высоких частотах (8–10 Гц, см. рис. 5,б)) после небольшого увеличения энергии импульса наблюдается спад в течение примерно 1,5 с. В обоих случаях быстрое изменение средней мощности происходит за 1–2 с. Дальнейшее изменение мощности накачки существенно меньше наблюдаемого изменения средней мощности Fe:ZnSe-лазера. Различное поведение лазера при разных частотах повторения, но при примерно одинаковой средней мощности накачки, по-видимому, связано с возникновением различных термооптических линз внутри Er:YAG стержня, которые по-разному влияют на добротность резонатора Er:YAG-лазера.

Пучки лазеров накачки заводились в кристалл под небольшим углом к оси резонатора. Для более эффективного использования накачки излучение Er:YAG-лазеров, отраженное гранями кристалла Fe:ZnSe и прошедшее через него, возвращалось в активную область Fe:ZnSe-лазера сферическими зеркалами [32].

Резонатор Fe:ZnSe-лазера длиной 80 см был образован: неселективным сферическим глухим (ГЗ) зеркалом с радиусом кривизны 2 м и плоским выходным (ВЗ) зеркалом, имеющим коэффициент отражения 25 % в спектральной области 4,0–4,5 мкм.

Измерения энергий накачки и генерации осуществлялись с помощью калориметров OPHIR. Регистрация формы импульсов накачки и генерации проводилась соответственно фотодиодами PD-36 и PD-48 (IBSGCo, Ltd). Спектр генерации измерялся с помощью спектрографа с дифракционной решеткой 300 штр./мм, работавшей в первом порядке в спектральной области 4–4,5 мкм. Регистрация спектра осуществлялась в виде ожога на термобумаге для факсов, располагаемой в кассетной части спектрографа. Расходимость излучения лазера измерялась путем измерения доли энергии импульса, прошедшего через набор диафрагм, размещенных в фокальной плоскости сферического зеркала с фокусным расстоянием 500 мм.

2. Экспериментальные результаты

2.1. Характеристики лазера при однократном импульсе накачки

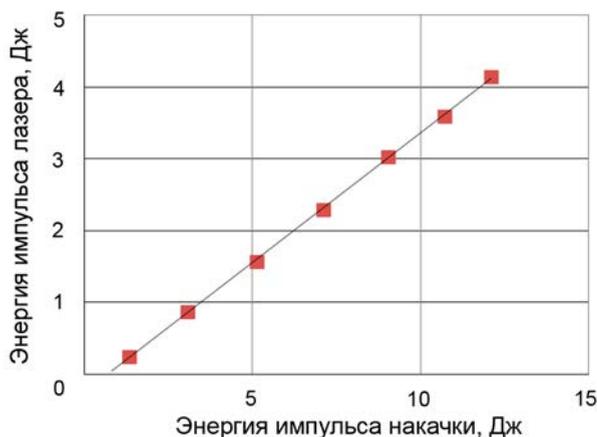


Рис. 6. Зависимость выходной энергии Fe:ZnSe-лазера от полной энергии накачки

На рис. 6 представлена зависимость выходной энергии Fe:ZnSe-лазера от полной энергии накачки, полученная при работе лазера с активным элементом 1 в режиме однократных импульсов с длительностью импульса накачки 700 мкс. Пороговое значение энергии накачки было 0,67 Дж. При максимальной энергии накачки 12 Дж выходная энергия составила 4,1 Дж. Дифференциальная эффективность лазера, определенная по наклону построенной по экспериментальным точкам прямой, была 36 %, что хорошо согласуется с результатами работы [23]. Примерно такая же характеристика получена при использовании активного элемента 2.

Зависимость энергии однократного импульса Fe:ZnSe-лазера с активным элементом 1 от перепада температуры на термоэлектрическом модуле при двух уровнях накачки представлена на рис. 7. Температура воды охлаждения медного радиатора была равна 17 °С. Перепад между водой и «горячей» поверхностью термоэлектрического модуля не превышал 5 К. При однократном импульсе накачки перепад температуры между кристаллом и «холодной» поверхностью термоэлектрического модуля пренебрежимо мал. Поэтому температура кристалла при $\Delta T = 100$ К оценивается значением $T = 195$ К.

Уменьшение энергии от ΔT обусловлено увеличением порога генерации с ростом температуры из-за уменьшения времени жизни верхнего лазерного уровня Fe:ZnSe. Видно, что с увеличением уровня накачки лазер работает в более широком диапазоне температур.

На рис. 8, а представлено изменение осциллограммы импульса Fe:ZnSe-лазера от ΔT . Для сравнения на рис. 8, б представлено изменение осциллограммы от уровня накачки. Ноль по шкале

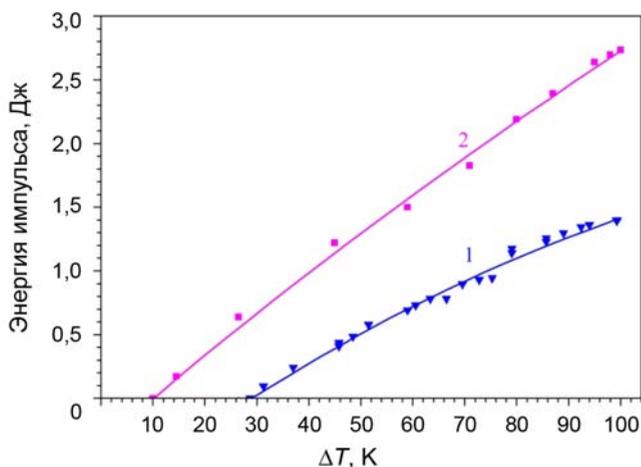
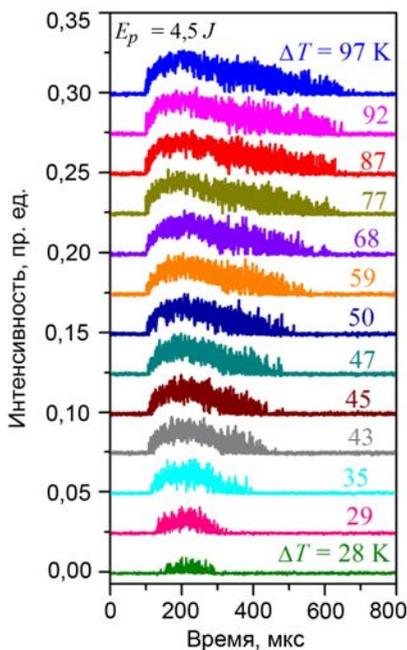
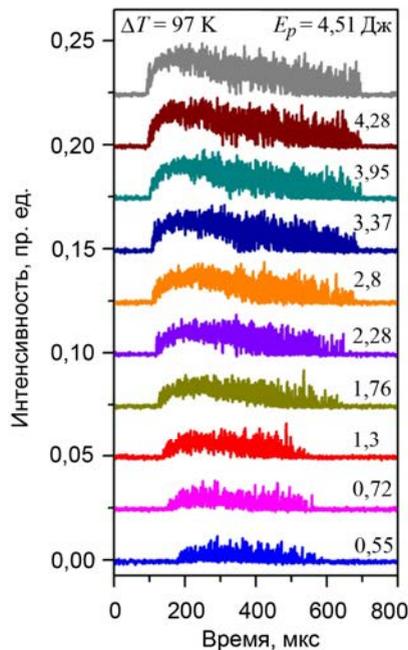


Рис. 7. Зависимость энергии импульса Fe:ZnSe-лазера с активным элементом 1 от перепада температуры на термоэлектрическом модуле при энергиях импульса накачки 4,5 Дж (1) и 8 Дж (2)



а



б

Рис. 8. Осциллограммы импульса Fe:ZnSe-лазера в зависимости от перепада температуры на термоэлектрическом модуле ΔT (а) и энергии импульса накачки E_p (б)

времени соответствует началу разряда в лампах лазера накачки. Видно, что с увеличением температуры окончание импульса генерации смещается к началу импульса накачки. Менее существенное смещение наблюдается при уменьшении энергии импульса накачки. Различие связано с тем, что время жизни верхнего уровня лазера при изменении ΔT от 100 до 30 К (при этом температура кристалла изменяется от 195 до 265 К) уменьшается от примерно 15 мкс до 1 мкс и становится сравнимым с длительностью пиков импульса накачки. Действительно, в импульсном режиме порог по энергии определяется формулой [25]

$$E_{th} = E_0 \frac{\tau_s/\tau}{1 - e^{-\tau_s/\tau}}, \quad (1)$$

где τ – время жизни верхнего лазерного уровня; E_0 – пороговая энергия при $\tau^{-1} = 0$; τ_s – длительность пика. Теперь сравним нижние осциллограммы на рис. 8, *a* и *б*, когда генерация происходит при небольшом превышении порога. Как отмечалось выше, пиковый характер накачки становится более выраженным во второй половине импульса и развивается к концу импульса. В случае $\Delta T = 28$ и $E_p = 4,5$ Дж, когда $\tau \approx \tau_s$, порог возрастает к концу импульса в 1,6 раз. Поэтому при нагреве кристалла генерация во второй части импульса подавляется. Тогда как при $\Delta T = 97$ и $E_p = 0,55$ Дж, когда $\tau \gg \tau_s$, порог остается постоянным в течение импульса. В импульсно-периодическом режиме укорочение длительности импульса может обеспечить достижение более высокой средней мощности лазера.

На рис. 9, *a* представлен спектр генерации Fe:ZnSe-лазера при использовании двух различных активных элементов и $\Delta T = 100$ К. Видно, что спектр генерации с использованием активного элемента 2, характеризующийся большим поглощением за один проход излучения накачки (см. рис. 2) сдвинут в длинноволновую сторону. Провал в спектре в области 4,2–4,3 мкм обусловлен внутрирезонаторным поглощением молекулами CO₂ в воздухе. С нагревом кристалла (с уменьшением ΔT) спектр смещается в длинноволновую область.

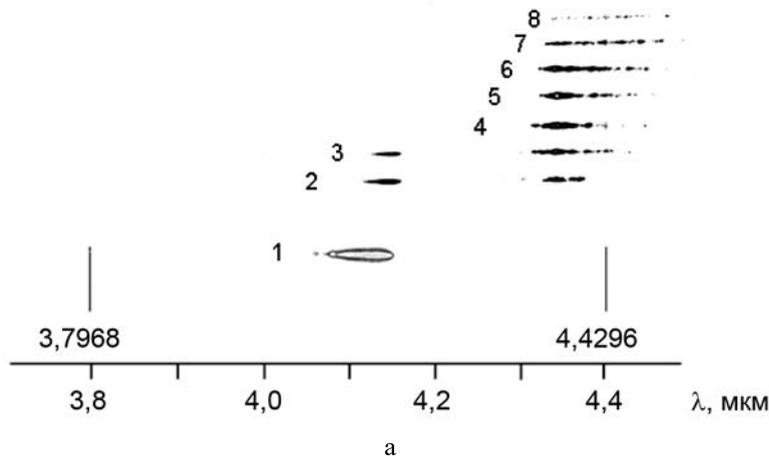


Рис. 9. Спектры генерации Fe:ZnSe-лазера с активным элементом 1 при $\Delta T = 100$ К (а, отпечаток 1) и активным элементом 2 при $\Delta T = 100$ К (а, 2 и б, 2), 80 К (а, 3), 60 К (а, 4), 50 К (а, 5), 40 К (а, 6), 30 К (а, 7), 20 К (а, 8) в однократном режиме накачки и стационарном импульсно-периодическом режиме при $\nu = 2$ Гц и $E_p = 6$ Дж (б, 9). Вертикальные отрезки указывают положение 6-го и 7-го порядка дифракции линии генерации He-Ne-лазера. Окончание рисунка на с. 347

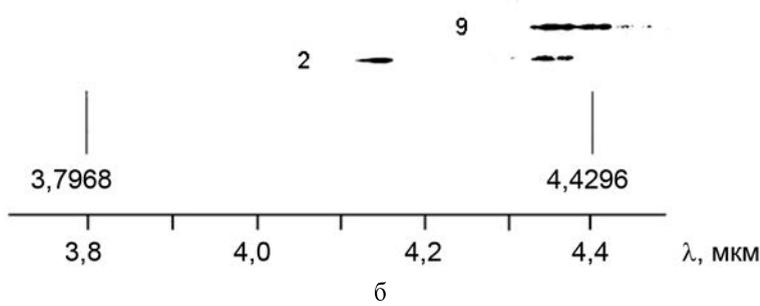


Рис. 9. Окончание

Зависимость доли энергии импульса излучения Fe:ZnSe-лазера при энергии накачки 6,8 Дж, прошедшей через диафрагму, от ее диаметра представлена на рис. 10 (треугольники – данные для режима однократных импульсов). В данном эксперименте использовались активный элемент 2 и длительность импульса 350 мкс. Экспериментальные данные хорошо описываются кривой пропускания пучка, имеющего гаусово распределение с радиусом $w = 1,25$ мм. Полный угол расходимости оценивается как $\Theta = 2w/F = 5$ мрад. В угле 5 мрад содержится ~65 % энергии.

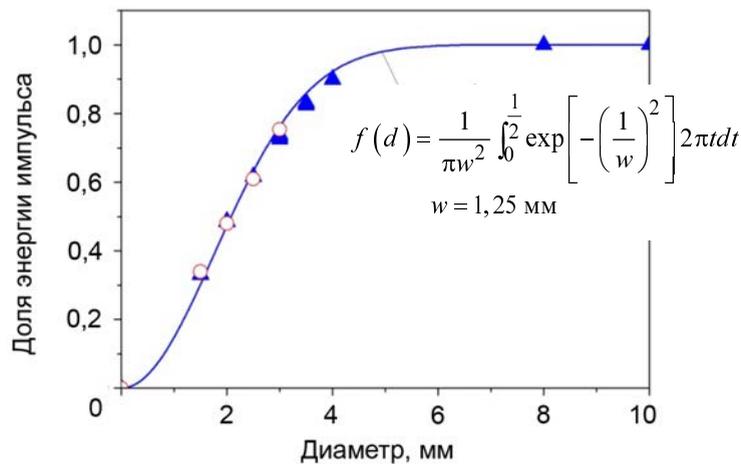


Рис. 10. Зависимость доли энергии импульса Fe:ZnSe-лазера, проходящей через отверстие, от диаметра этого отверстия в фокальной плоскости сферического зеркала с фокусным расстоянием 500 мм при энергии накачки 6,8 Дж: ▲ – в режиме однократных импульсов, ○ – в стационарном импульсно-периодическом режиме, — — — — — аналогичная зависимость для пучка с поперечным гауссовым распределением и радиусом $w = 1,25$ мм

2.2. Характеристики лазера в импульсно-периодическом режиме накачки

Первые эксперименты выполнялись при длительности импульса 700 мкс и использовании активного элемента 1.

На рис. 11 представлена зависимость энергии импульса Fe:ZnSe-лазера от порядкового номера импульса в короткой серии из 12 импульсов. Частота повторения была равна 5 Гц. Видно,

что средняя мощность в этой серии превышала 20 Вт. В течение первой секунды работы лазера наблюдался сначала заметный рост выходной энергии, а затем небольшой ее спад. Это соответствует начальной динамике генерации лазеров накачки при их включении в импульсно-периодическом режиме (см. рис. 5, *a*). К сожалению, лазеры накачки, которыми мы располагали, не могли надежно работать в квазинепрерывном импульсно-периодическом режиме при предельных энергиях импульсов и частотах 5 Гц и выше.

Изменение средней мощности от времени в серии из 100 импульсов и разных частотах следования импульсов представлено на рис. 12. Видно, что средняя мощность Fe:ZnSe-лазера может достигать значения примерно 10 Вт в серии из 100 импульсов.

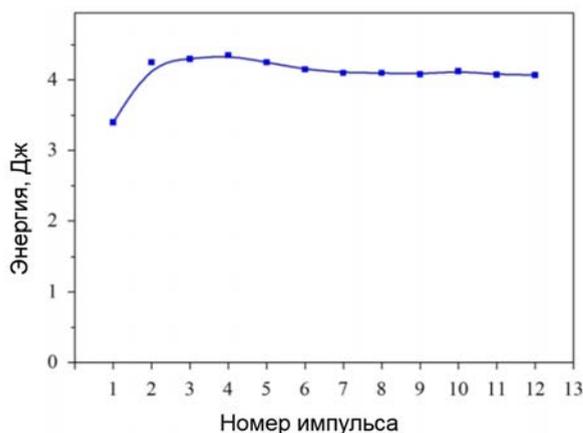


Рис. 11. Зависимость энергии импульса Fe:ZnSe-лазера от порядкового номера импульса в короткой серии из 12 импульсов при энергии накачки 12 Дж

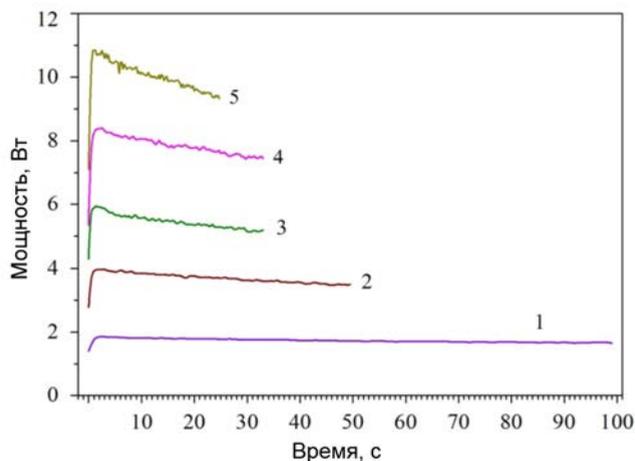


Рис. 12. Зависимость средней мощности Fe:ZnSe-лазера от времени в сериях из 100 импульсов при различных частотах и энергиях импульса накачки: 1 – 1 Гц, 5,9 Дж; 2 – 2 Гц, 5,9 Дж; 3 – 3 Гц, 5,9 Дж; 4 – 3 Гц, 8,1 Дж; 5 – 4 Гц, 8,1 Дж

На рис. 13 представлена временная зависимость средней мощности Fe:ZnSe-лазера в серии уже из более чем 1500 импульсов при частоте 2 Гц. Здесь наблюдается выход на стационарный режим работы импульсно-периодического лазера. Выход на стационарный режим наблюдается в течение 10–15 мин и связан с изменением режима работы термоэлектрических модулей. Максимальная средняя мощность Fe:ZnSe-лазера составила 2,8 Вт. С увеличением частоты следования импульсов средняя мощность существенно падает, что видно из рис. 14. Здесь представлены зависимости при примерно одинаковой средней мощности накачки. Падение средней мощности с увеличением частоты связано с менее эффективной работой лазера накачки (см. рис. 5), а также с более быстрым падением энергии в импульсе с нагревом кристалла из-за малого исходного превышения над порогом (см. рис. 7).

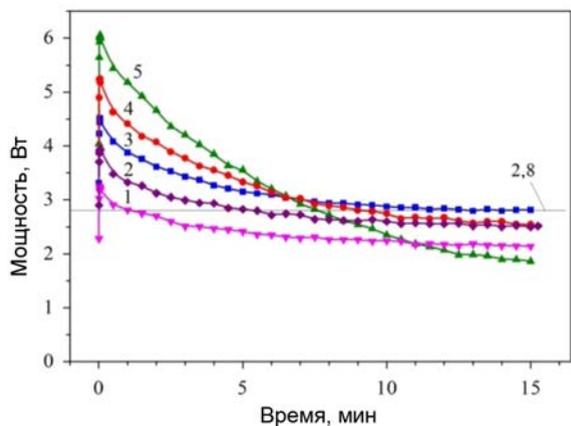


Рис. 13. Зависимость средней мощности Fe:ZnSe-лазера от времени в импульсно-периодическом режиме при длительности импульса 700 мкс, частоте их следования 2 Гц и различных энергиях импульса накачки: 1 – 5 Дж; 2 – 6 Дж; 3 – 6,8 Дж; 4 – 8,1 Дж; 5 – 9 Дж

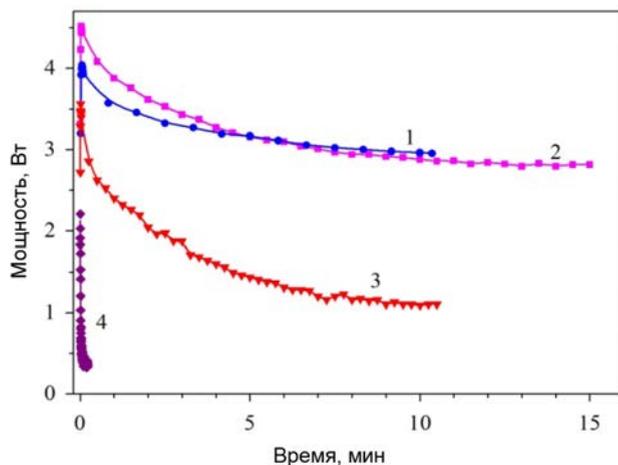


Рис. 14. Зависимость средней мощности Fe:ZnSe-лазера от времени в импульсно-периодическом режиме при примерно одинаковой средней мощности накачки и различных частотах следования импульсов: 1 – 1,2 Гц; 2 – 2 Гц; 3 – 4 Гц; 4 – 10 Гц

Дальнейшее увеличение средней мощности мы связывали с уменьшением длительности импульса накачки. На рис. 15 представлены зависимости средней мощности Fe:ZnSe-лазера от времени в импульсно-периодическом режиме при частоте следования импульсов 2 Гц, длительности импульса накачки 350 мкс и различных энергиях импульса накачки. Максимальное значение по средней мощности Fe:ZnSe-лазера в установившемся импульсно-периодическом режиме составило 3,1 Вт. Таким образом, укорочение импульса дало увеличение мощности примерно на 10 %.

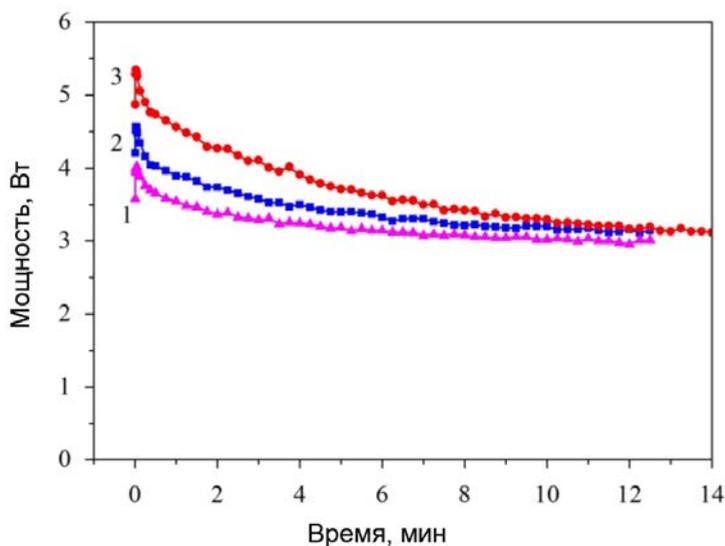


Рис. 15. Зависимость средней мощности Fe:ZnSe-лазера с активным элементом 2 от времени в импульсно-периодическом режиме при частоте следования импульсов 2 Гц, длительности импульса 350 мкс и различных энергиях импульса накачки: 1 – 6 Дж; 2 – 6,8 Дж; 3 – 8,1 Дж

Спектр генерации Fe:ZnSe-лазера в установившемся режиме представлен спектром 9 на рис. 9, б. Он заметно сдвинут в длинноволновую сторону по сравнению со спектром в режиме однократных импульсов накачки и имеет максимум вблизи 4,38 мкм при ширине спектра 0,1 мкм. Наблюдаемый сдвиг обусловлен нагревом кристалла, приводящим к уширению спектра поглощения и росту реабсорбции лазерного излучения длинноволновым краем спектра поглощения.

Из рис. 10 видно, что направленность Fe:ZnSe-лазера в установившемся импульсно-периодическом режиме практически не изменяется по сравнению с направленностью при однократной накачке.

3. Обсуждение результатов

До включения лазера активный элемент, индиевые прокладки и «холодные» пластины термоэлектрических модулей охлаждены до температуры примерно 195 К. Имеется также некоторое распределение температуры внутри термоэлектрических модулей. После включения лазера в импульсно-периодическом режиме накачки прежде всего начинает нагреваться активная область (адиабатический нагрев). Затем тепло распространяется на все предварительно охлажденные детали (теплоотвод за счет выравнивания температуры по этим деталям – работает их теплоемкость). Наконец, выход на стационарный режим происходит в результате изменения режима работы термоэлектрических модулей таким образом, чтобы обеспечить отвод подводимой тепловой мощности накачки.

Рассмотрим сначала процесс оттока тепла из активной области кристалла за счет нагрева соседних областей кристалла и элементов держателя. Из рис. 7 следует, что энергия в импульсе Fe:ZnSe-лазера падает практически линейно при увеличении температуры кристалла. В режиме однократных импульсов накачки температура кристалла равна температуре «холодной» поверхности термоэлектрического модуля. Эту зависимость можно представить в виде

$$E_l = E_{0l} - \alpha \Delta T \quad \text{или} \quad P_l = P_{0l} - \nu \alpha \Delta T, \quad (2)$$

где $E_{0l} = k E_p$ и $P_{0l} = E_{0l} \nu$ – энергия и мощность лазера при минимальной температуре $T = 195$ К; k – коэффициент полезного действия (кпд) лазера, равный 0,36 при $T = 195$ К (см. рис. 6); E_p – энергия накачки; α – коэффициент пропорциональности, равный 0,03 Дж/К при $E_{0l} = 2,7$ Дж (верхняя кривая на рис. 7). Этот коэффициент уменьшается с уменьшением E_{0l} . Приращение температуры ΔT можно записать в виде

$$\Delta T = (E_p - E_l) \nu f(t), \quad (3)$$

где ν – частота следования импульсов, $f(t)$ – временная зависимость приращения температуры в центре активной области кристалла при единичной мощности накачки. Функция $f(t)$ зависит от теплоемкости и теплопроводности кристалла, его размеров и наличия медного держателя. Мощность тепловыделения записана как разность между мощностями накачки и лазера. Такое упрощение разумно, поскольку квантовый выход люминесценции Fe:ZnSe-кристалла в рассмат-

риваемом диапазоне температур много меньше единицы и лишь малая доля мощности накачки уносится люминесценцией.

Подставив соотношение (3) в уравнение (2), получим выражение для средней мощности лазера

$$P_l^{av} = P_p^{av} \left[\frac{k - \alpha v f(t)}{1 - \alpha v f(t)} \right], \quad (4)$$

откуда видно, что при коротких сериях импульсов накачки, когда $f(t)$ мало, т. е. $k \gg \alpha v f(t)$, средняя мощность лазера примерно пропорциональна мощности накачки и кпд лазера составляет 36 %. Этот случай соответствует данным, представленным на рис. 11, когда получена предельная для нашей установки средняя мощность в 20 Вт в течение 2 с работы лазера. При более длинных сериях импульсов накачки мощность лазера постепенно падает. Если частота следования импульсов постоянна, то средняя мощность лазера пропорциональна энергии импульса накачки. При этом временная зависимость мощности лазера не изменяется при изменении энергии импульса накачки. Это соответствует кривым 3 и 4 на рис. 12. С другой стороны, если поддерживать постоянной среднюю мощность накачки и увеличивать частоту следования импульсов, то средняя мощность лазера быстро падает, что качественно соответствует зависимостям, представленным на рис. 14.

Теперь оценим среднюю мощность лазера в стационарном режиме. Зависимость тепловой мощности, которую могут отвести два термоэлектрических модуля, от перепада температуры на этих модулях выражается формулой

$$Q = \beta \Delta T_{TM}, \quad (5)$$

где β – коэффициент пропорциональности, равный 0,34 Вт/К для использованных нами термоэлектрических модулей, а ΔT_{TM} – перепад температуры между предельно низкой температурой «холодной» поверхности термоэлектрического модуля и температурой в установившемся импульсно-периодическом режиме накачки. Величина ΔT_{TM} меньше ΔT , поскольку в установившемся режиме есть еще перепад температуры между центром активной области кристалла и «холодной» поверхностью термоэлектрического модуля. Это несоответствие можно записать в виде

$$\Delta T_{TM} = \delta \Delta T. \quad (6)$$

Далее, переписав уравнение (5) с учетом (6) и (2) и приравняв $Q = P_p - P_l$, получим выражение для средней мощности лазера в установившемся режиме

$$P_l^{av} = P_p^{av} \left[\frac{k - \alpha \frac{v}{\beta \delta}}{1 - \alpha \frac{v}{\beta \delta}} \right]. \quad (7)$$

Для примера рассмотрим случай, соответствующий кривой 3 на рис. 15: $P_p^{av} = 15$ Вт, $k = 0,36$, $\alpha = 0,03$ Дж/К, $v = 2 c^{-1}$, $\beta = 0,34$ Вт/К. На эксперименте было измерено: $P_l^{av} = 3,1$ Вт.

Подставляя это значение в уравнение (2), находим: $\Delta T = 34$ К. Теперь оценим, какой перепад температуры достигается на цилиндрическом активном элементе, зажатом в медный держатель. Для этого надо решить стационарное уравнение теплопроводности в цилиндрических координатах. Если предположить, что в центральной области активного элемента с радиусом $r_0 = 0,4$ см однородно выделяется тепло с мощностью $P_p^{av} - P_l^{av} \approx 12$ Вт и на боковой поверхности цилиндрического активного элемента с радиусом $R_0 = 0,6$ см поддерживается постоянная температура, то легко показать, что перепад температуры между центром цилиндра и его боковой поверхности определяется формулой

$$\Delta T = \frac{P_p^{av} - P_l^{av}}{2\pi l \chi} \left[0,5 + \ln \left(\frac{R_0}{r_0} \right) \right], \quad (8)$$

где $l = 1,93$ см – длина активного элемента, $\chi = 0,23$ Вт·см⁻¹К⁻¹ – теплопроводность ZnSe при температуре 200 К. Из формулы получаем оценку нагрева кристалла примерно в 4 К и оценку $\delta = 0,9$. Тогда из формулы (7) получаем: $P_l^{av} = 3,05$ Вт, что практически совпадает с измеренной мощностью в 3,1 Вт.

Заключение

В работе продемонстрирован импульсно-периодический Fe:ZnSe-лазер с охлаждением кристалла двумя четырехкаскадными термоэлектрическими модулями. Лазер работал при накачке излучением двух Er:YAG-лазеров. В неустановившемся режиме достигнута средняя за 2 с мощность лазера в 20 Вт. В стационарном режиме средняя мощность составила 3,1 Вт при частоте следования импульсов накачки 2 Гц и длительности импульса 350 мкс. Максимум спектра генерации находился вблизи 4,38 мкм. В угле расходимости 5 мрад содержалось 65 % мощности Fe:ZnSe-лазера. Полученные экспериментальные данные по средней мощности хорошо соответствуют расчетным значениям. Средняя мощность лазера в значительной степени определяется характеристиками термоэлектрических модулей.

Работа подготовлена при поддержке программы президиума РАН № 7 «Актуальные вопросы фотоники, зондирование неоднородных сред и материалов» Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ (договор № 02.а03.21.0005).

Список литературы

1. Акимов В. А., Козловский В. И., Коростелин Ю. В. и др. // Квантовая электроника. 2004. 34. С. 185.
2. Picque N., Gueye F., Guelachvili G. et al. // Opt. Lett. 2005. 30(24). P. 3410.
3. Акимов В. А., Козловский В. И., Коростелин Ю. В. и др. // Квантовая электроника. 2005. 35. С. 425.

4. Herbin H., Picque N., Guelachvili G. et al. // Mol. Spectrosc. 2006. 238. P. 256.
5. Girard V., Farrenq R., Sorokin E. et al. // Chem. Phys. Lett. 2006. 419. P. 584.
6. Sorokin E., Sorokina I. T., Mandon J. et al. // Opt. Expr. 2007. 15. P. 16540.
7. Акимов В. А., Воронов А. А., Козловский В. И. и др. // Квантовая электроника. 2007. 37. С. 1071.
8. Козловский В. И., Коростелин Ю. В., Охотников О. Г. и др. // Там же. 2013. 43. С. 885.
9. Губин М. А., Киреев А. Н., Коростелин Ю. В. и др. Краткие сообщения по физике // ФИАН. 2011. 38. С. 34.
10. Губин М. А., Киреев А. Н., Коростелин Ю. В. и др. // Квантовая электроника. 2012. 42. С. 509.
11. Губин М. А., Киреев А. Н., Козловский В. И. и др. // Там же. С. 565.
12. Sorokin E., Tolstik N., T. Sorokina I. T. // Proc. SPIE. 2013. 8599. P. 859916.
13. Sorokina I. T., Sorokin E. // IEEE J. Sel. Topics Quantum Electron. 2015. 21. P. 1601519.
14. Vasilyev S., Mirov M., Gapontsev V. // Opt. Express. 2014. 22. P. 5118.
15. Potemkin F. V., Migal E. A., Pushkin A. V. et al. // Laser Phys. Lett. 2016. 13. P. 125403.
16. Potemkin F. V., Bravy B. G., Kozlovsky V. I. et al. // Ibid. P. 15401.
17. Бравый Б. Г., Гордиенко В. М., Козловский В. И. и др. // Известия РАН. Сер. Физическая. 2016. 80. С. 489.
18. Potemkin F. V., Migal E. A., Pushkin A. V. et al. // Proc. SPIE. 2017. 10238. P. 102380L.
19. Kozlovsky V. I., Korostelin Y. V., Podmar'kov Y. P. et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. 740. P. 012006.
20. Mirov S., Fedorov V., Martyshkin D. et al. // Advanced Solid State Lasers Conference. 2015. (OSA 2015). Paper AW4A.
21. Великанов С. Д., Гавришук Е. М., Зарецкий Н. А. и др. // Квантовая электроника. 2017. 47. С. 303.
22. Воронов А. А., Козловский В. И., Коростелин Ю. В. и др. // Там же. 2005. 35. С. 809.
23. Frolov M. P., Korostelin Yu. V., Kozlovsky V. I. et al. Optics Letters. 2018. 43. P. 623.
24. Kozlovsky V. I., Akimov V. A., Frolov M. P. et al. // Phys. Status Solidi 2010. B 247. P. 1553.
25. Moulton P. F. // IEEE J. Quantum Electron. 1985. QE-21. P. 1582–1595.

Thermoelectrically Cooled, Repetitively Pulsed Fe:ZnSe Laser

**N. G. Zakharov, A. V. Zakhryapa, V. I. Kozlovsky, Yu. V. Korostelin, Ya. K. Skasyrsky,
M. P. Frolov, R. S. Chuvatkin, I. M. Yutkin**

We report the investigation of a repetitively pulsed laser based on a Fe:ZnSe crystal, cooled to a temperature of 195 K by two thermoelectric modules with a maximum cooling power of 34 W. Two pulsed synchronised Er:YAG lasers, operating in the freelaying regime, are used for pumping. It is shown that the average laser power in a series of short pulses may exceed 20 W. An average power of 3.1 W is attained in the stationary temperature regime. The lasing spectrum is centred at a wavelength of 4.38 μm , and the total divergence angle is 5 mrad.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Адаменков Ю. А. 86

Базанов А. А. 312

Беляев А. Н. 318

Богданов Е. Н. 224

Бодров Е. В. 234

Бодряшкин Я. В. 318

Бочков Е. И. 312

Буйко С. А. 86

Волкова Е. И. 260

Воронков Р. А. 224

Воронцов С. В. 326

Вронский М. А. 116

Гаранин С. Г. 312

Гаранин С. Ф. 64

Генералов Л. Н. 326

Глушков С. Л. 326

Горбатенко М. В. 6

Горбунов А. В. 146

Гордеев В. С. 326

Грунин А. В. 326

Девяткин А. А. 326

Деркач И. Н. 106

Донской Е. Н. 138

Дудай П. В. 312

Епишков И. М. 186

Жуков И. В. 318

Забавичев И. Ю. 248

Завьялов Н. В. 318, 326

Залялова И. В. 186

Захаров Н. Г. 340

Захряпа А. В. 340

Зименков А. А. 312

Змушко В. В. 234

Ивановский А. В. 312

Иоилев А. Г. 218

Качалин Г. Н. 106

Кирдяев Н. А. 106

Климушкин К. Н. 312

Князев В. Н. 224

Козлов В. А. 248

Козловский В. И. 340

Колобянин В. Ю. 218

Комаров В. М. 312

Коростелин Ю. В. 340

Кравец Е. М. 64

Краев А. И. 312

Краюхин А. А. 174

Куделькин В. Б. 312

Кудряшов Е. А. 86, 106

Кузнецов В. В. 318

Курапов Н. Н. 318

Ладейщикова В. В. 106

Лазарев С. А. 326

Лин Э. Э. 58

Линник Д. М. 186

Логинов Д. В. 200

Мазанов В. А. 86

Макейкин Е. Н. 86

Малькин А. Г. 146

Мамышев В. И. 312

Манин П. А. 260

Маркин С. В. 86

Маршалкин В. Е. 282

Машин И. А. 318

Мелехин А. С. 86

Михайлюков К. Л. 160

Мысков Г. А. 326

Назаренко С. Т. 326

Невмержицкий Н. В. 234

Оболенский С. В. 248

Опекунов А. М. 318

Павлов В. С. 326

Пименов С. А. 270

- Повышев В. М.* 116
Полюшко С. М. 312
Поляков Л. Е. 318
Полякова С. Ю. 116
Попков С. А. 260
Поспелов Г. П. 318
Потапов С. В. 160
Потехин А. А. 248
Пузанов А. С. 248
Путевской С. А. 318
Пятаков Н. П. 40
- Разин А. Н.* 234
Рогачев В. Г. 86
Родионов А. В. 208, 224
Романова М. Д. 160
Рослов В. И. 146
Рычагов Е. В. 224
- Свиридова И. А.* 218
Сеньковский Е. Д. 234
Сиренко А. В. 86
Скасырский Я. К. 340
Скобеев А. В. 160
Смердов В. И. 326
Сметанин М. Л. 318, 326
Солдатов А. В. 40
Сотсков Е. А. 234
- Стадник А. Л.* 174, 218
Столмакова Е. С. 116
Страбыкин К. В. 326
Сулова С. Ю. 186
- Тельнов А. В.* 318, 326
Тимаев Д. С. 86, 106
Тресков С. М. 318
- Фролов М. П.* 340
Фролова Н. В. 160
- Храмов И. В.* 160
- Цибиков З. С.* 312
- Чуваткин Р. С.* 340
- Шаповалов Е. В.* 312
Шеин А. Н. 318
Шориков И. В. 318, 326
- Эльяш С. Л.* 326
- Юткин И. М.* 340
Юхневич В. А. 326
- Янилкин Ю. В.* 174, 218

Содержание

Раздел 1. Прикладные задачи теоретической физики

Горбатенко М. В.

Получение уравнений самосогласованного движения заряженных частиц методом Эйнштейна–Инфельда–Гоффмана 6

Пятаков Н. П., Солдатов А. В.

Аналитические решения некоторых задач дифракции сверхширокополосного электромагнитного излучения в высокочастотном приближении для уравнений Максвелла . . . 40

Лин Э. Э.

Кластерная модель образования наночастиц и мезообъектов в ударных волнах в тяжелых металлах и при выбросах с их поверхности 58

Гаранин С. Ф., Кравец Е. М.

Электронный вакуумный заряд для сверхкритического ядра 64

Раздел 2. Математическое моделирование физических процессов

Тимаев Д. С., Адаменков Ю. А., Буйко С. А., Кудряшов Е. А., Мазанов В. А., Макейкин Е. Н., Маркин С. В., Мелехин А. С., Рогачев В. Г., Сиренко А. В.

Динамика превращения частицы углерода на кварцевой подложке в лазерном поле 86

Деркач И. Н., Кудряшов Е. А., Качалин Г. Н., Кирдяев Н. А., Ладейщикова В. В., Тимаев Д. С.

Повреждение запыленных оптических элементов в поле непрерывного лазерного излучения 106

Вронский М. А., Повышев В. М., Полякова С. Ю., Столмакова Е. С.

Фазовый метод решения задачи на собственные значения для уравнения Дирака 116

Донской Е. Н.

Использование РL-оценок потока в точке для расчета поглощенной дозы, создаваемой радионуклидами в воздухе 138

Рослов В. И., Малькин А. Г., Горбунов А. В.

Геометрические вопросы моделирования траекторий частиц в методике С-007 146

Михайлюков К. Л., Храмов И. В., Скобеев А. В., Потапов С. В., Фролова Н. В., Романова М. Д.

Методика «ПИ» моделирования протонных изображений 160

Краюхин А. А., Янилкин Ю. В., Стадник А. Л.

Численное моделирование движения жестких ударников в упругопластических средах на неподвижной счетной сетке по методике ЭГАК 174

Епишков И. М., Залялова И. В., Линник Д. М., Суслова С. Ю.

Исследование применимости метода SPH к моделированию процессов газодинамики с детонацией в двумерном случае 186

Логинов Д. В.

Модуль геометрического ядра GeoCore пакета программ 3D-РНД 200

Родионов А. В.

Искусственная вязкость для подавления численной неустойчивости типа «карбункул» в расчетах трехмерных задач 208

| | |
|--|-----|
| <i>Иоилев А. Г., Колобянин В. Ю., Свиридова И. А., Стадник А. Л., Янилкин Ю. В.</i> Использование адаптивно-встраиваемой дробной счетной сетки при численном моделировании взаимодействия воздушной ударной волны с изломом границы течения | 218 |
| <i>Князев В. Н., Воронков Р. А., Богданов Е. Н., Рычагов Е. В., Родионов А. В.</i> Кинетическая модель ударно-волнового инициирования детонации гетерогенных взрывчатых веществ с учетом разогрева очагов | 224 |
| <i>Бодров Е. В., Змушко В. В., Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сеньковский Е. Д., Сотсков Е. А.</i> Расчетно-экспериментальное исследование развития турбулентного перемешивания в газовой слойке при прохождении ударной волны | 234 |
| <i>Забавичев И. Ю., Потехин А. А., Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А.</i> Моделирование образования каскада смещений и переходных ионизационных процессов в кремниевых полупроводниковых структурах при нейтронном воздействии | 248 |
| <i>Волкова Е. И., Манин П. А., Попков С. А.</i> Способ минимизации механических напряжений в чувствительном элементе микромеханических устройств при монтаже в корпус | 260 |
| <i>Пименов С. А.</i> Концепция построения алгоритмов оценки вероятности безотказной работы конструкций на основе линеаризации функции многих случайных аргументов | 270 |
| Раздел 3. Ядерная физика, физика ядерных реакторов | |
| <i>Маршалкин В. Е.</i> Концепция замкнутого торий-уран-плутониевого топливного цикла ядерной энергетики | 282 |
| Раздел 4. Взрывомагнитные генераторы | |
| <i>Базанов А. А., Бочков Е. И., Гаранин С. Г., Дудай П. В., Зименков А. А., Ивановский А. В., Климушкин К. Н., Комаров В. М., Краев А. И., Куделькин В. Б., Мамышев В. И., Полюшко С. М., Цибиков З. С., Шаповалов Е. В.</i> Источник мегаамперного тока со временем нарастания ~100 нс на базе взрывомагнитных генераторов | 312 |
| Раздел 5. Ускорители заряженных частиц | |
| <i>Тельнов А. В., Завьялов Н. В., Сметанин М. Л., Шориков И. В., Путевской С. А., Тресков С. М., Курапов Н. Н., Кузнецов В. В., Опекунов А. М., Поляков Л. Е., Шеин А. Н., Поспелов Г. П., Машин И. А., Беляев А. Н., Жуков И. В., Бодряшкин Я. В.</i> Результаты работ по созданию ускорителя электронов непрерывного действия с высокой мощностью пучка | 318 |
| <i>Завьялов Н. В., Воронцов С. В., Гордеев В. С., Грунин А. В., Генералов Л. Н., Глушков С. Л., Девяткин А. А., Лазарев С. А., Мысков Г. А., Назаренко С. Т., Павлов В. С., Смердов В. И., Сметанин М. Л., Страбыкин К. В., Тельнов А. В., Шориков И. В., Эльяш С. Л., Юхневич В. А.</i> Состояние и перспективы развития ускорителей заряженных частиц в РФЯЦ-ВНИИЭФ | 326 |
| Раздел 6. Физика лазеров | |
| <i>Захаров Н. Г., Захряпа А. В., Козловский В. И., Коростелин Ю. В., Скасырский Я. К., Фролов М. П., Чуваткин Р. С., Юткин И. М.</i> Импульсно-периодический Fe:ZnSe-лазер с термоэлектрическим охлаждением | 340 |

ПРАВИЛА

оформления рукописей, представляемых в сборники РФЯЦ-ВНИИЭФ

К публикации принимаются результаты оригинальных научных исследований и разработок, выполненных непосредственно сотрудниками РФЯЦ-ВНИИЭФ либо при совместном участии сотрудников РФЯЦ-ВНИИЭФ и других организаций (при условии, что вклад сотрудников РФЯЦ-ВНИИЭФ является определяющим). Статьи должны сопровождаться представлениями НТС отделений и разрешающими документами, оформленными в порядке, установленном ГК «Росатом».

Максимальный объем статьи, как правило, не должен превышать 15 стр. Статьи большего объема могут быть приняты к рассмотрению только по рекомендации членов редколлегии сборника. Объем заказных статей согласовывается с редколлегией.

Рукописи представляются в двух экземплярах, отпечатанных шрифтом Times New Roman высотой 12 пунктов, межстрочный интервал – двойной, левое поле 3 см, на высококачественном принтере. Статья сопровождается электронным вариантом текста на носителе (CD-R/RW, DVD-R/RW, USB Flash Drive) в формате редактора Word for Windows. Обязательные элементы статьи: классификационный индекс УДК (универсальной десятичной классификации), название статьи, фамилии и инициалы авторов, аннотация (не более 600 знаков, в индикативной форме, на русском и английском языках), текст статьи, список литературы.

Количество страниц в бумажном оригинале статьи и в электронной версии должно быть одинаковым и совпадать с указанным в экспертном заключении, выданном автору!

В совместных работах с другими организациями следует указывать место работы каждого автора. На отдельных листах в обязательном порядке представить номера домашнего и служебных телефонов авторов.

Иллюстрации в электронной версии статьи должны быть представлены отдельно – в виде файлов в формате TIFF (.TIF) или JPEG (максимальное качество) (.JPG) без слоев и α -каналов. Масштаб (геометрические размеры) 1:1 с разрешением не менее 250 dpi (точек/дюйм). Название файла иллюстрации включает фамилию автора и порядковый номер рисунка в статье, например: Dzyuba_03.tif. Подпись к иллюстрациям обязательна. Образец: «Рисунок 1. Наименование рисунка». Нумерация рисунков – сквозная.

Не допускается представлять иллюстрации, созданные с использованием внутренних инструментов Word.

Таблицы в тексте статьи имеют нумерационный и информационный заголовки. Нумерация таблиц – сквозная. Образец: «Таблица 3. Расчетные и экспериментальные характеристики реактора БИР-2».

Формулы создаются в виде целых математических выражений в редакторе Math Type и нумеруются в круглых скобках: (2), литературные ссылки – в квадратных: [3]. Нумерация формул в статье – сквозная; нумерация типа (2а), (2б) нежелательна.

При написании статьи следует использовать общепринятые термины, единицы измерения и условные обозначения. **Все употребляемые авторами обозначения должны быть определены при их первом появлении в тексте.**

При наборе статьи на компьютере все латинские обозначения физических величин (A , I , d , h и т. п.) набираются курсивом, греческие обозначения, названия функций (\sin , \cos , \exp), химических элементов (H_2O , H_2C_5OH) и единиц измерения (см, МВт/см², с) – прямым (обычным) шрифтом.

Библиографические ссылки в списке литературы располагаются в той последовательности, в какой они упоминаются в тексте, и оформляются по следующим правилам:

Для книг: фамилия и инициалы автора(ов), название книги, место издания, издательство, год (для трудов конференций – город, страна, год). Например: Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1988. Или: Elton R. C. X-Ray Lasers. Boston: Academic Press, 1990.

Для статей в журнале, сборнике, газете: фамилия и инициалы автора(ов), название статьи, название журнала (сборника), год, том, номер (или номер выпуска), страницы. Например: Полякова А. Л., Васильев Б. М., Купенко И. Н. и др. Изменение зонной структуры полупроводников под давлением // Физика и техника полупроводников. 1976. Т. 9, № 11. С. 2356–2358. Или: Афанасьев А. М. Оптимизация распределения энерговыделения в реакторе с помощью «советов оператору» // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. 1986. Вып. 2. С. 32–36. Или: Mezain I. H. Rolling circuit boards improves soldering // Electronics. 1977. Vol. 34, N 16. P. 193–198.

Для диссертаций и авторефератов диссертаций кроме фамилии автора и его инициалов следует указать название диссертации, степень, место защиты (город) и год, а для препринтов – название препринта, место издания, год и номер. Например: Горшкова Т. И. Термодинамические свойства и применение некоторых сплавов церия: Автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 1976.

Для патентной документации: вид патентного документа (А.с. или Пат.), его номер, название страны, выдавшей документ, индекс международной классификации изобретения, название издания, в котором опубликована формула изобретения, год и номер издания. Например: А.с. 100970 СССР, МКИ³ В 25J 15/00. Устройство для захвата неориентированных деталей типа валов / В. С. Ваулин, В. Г. Кенайкин // Открытия. Изобретения. 1983. № 11.

Для электронных ресурсов: заглавие ресурса, сведения об издании, вид ресурса, условия доступа. Например: Исследовано в России [Электронный ресурс]. – Долгопрудный, МФТИ, 1998. – Электронный журнал. – <http://zhurnal.mipt.rssi.ru>.

При необходимости в заголовке библиографической ссылки на работу четырех и более авторов могут быть указаны имена всех авторов или первых трех с добавлением слов «и др.».

Для исправления авторских и редакционных ошибок авторам предоставляется одна корректура. При этом помимо исправлений ошибок допускаются лишь незначительные изменения и дополнения. Корректурa с подписями авторов должна быть возвращена в редакцию в кратчайший срок.

Рукописи, в которых не соблюдены данные правила, возвращаются авторам без рассмотрения по существу. Датой поступления в редакцию считается день нового получения рукописей.

Труды РЯЦ-ВНИИЭФ

Научно-исследовательское издание

Выпуск 26

В двух частях

Часть 1

Редактор, корректор *Н. Ю. Костюничева*
Компьютерная подготовка оригинала-макета *Е. В. Моисеева*

Подписано в печать 27.01.2023 Формат 60×84/8. Печать офсетная
Усл. печ. л. ~41,7 Уч.-изд. л. ~31,5 Тираж 200 экз. Зак. тип. 2352-2022

Отпечатано в ИПЦ ФГУП «РЯЦ-ВНИИЭФ»
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23

ISBN 978-5-9515-0516-3



9 785951 505163