

№13(68)2009

Выпуск 17

НАУЧНЫЙ РЕЦЕНЗИРУЕМЫЙ ЖУРНАЛ

**НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ Белгородского
государственного университета**

Математика Физика

Основан в 1995 г.

**Belgorod State University
Scientific bulletin**

Mathematics Physics

Учредитель:

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Белгородский государственный университет»

Издатель:

Белгородский государственный университет.
Издательство БелГУ

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

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

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ
ЖУРНАЛА**

Главный редактор

Дятченко Л.Я.

ректор Белгородского государственного университета, доктор социологических наук, профессор

Зам. главного редактора

Давыденко Т.М.

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

Ответственный секретарь

Московкин В.М.

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

СОДЕРЖАНИЕ

Кластерное разложение вероятности перколяции на гексагональной решётке.

Е.С. Антонова, Ю.П. Вирченко 5

Моделирование формирования структуры диффузионной зоны при одновременном поверхностном и внутреннем окислении сплавов.

Г.С. Абрамов, М.Г. Абрамов 29

Перестраиваемый источник рентгеновского излучения на основе мозаичных кристаллов и его практические применения.

Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Зыонг Тхи Жанг, С.А. Лактионова, Р.А. Шатохин 41

Определение параметров закрученного воздушного столба, моделирующего вихревую трубу.

З.А. Кабилов, А.В. Ковалёв, Н.В. Малай 71

Визуализация кремния, обработанного сфокусированным ионным пучком Ga в нематической ячейке.

И.С. Кучеев, Ю.С. Тучина 77

Фотофорез крупной летучей сферической капли при малых перепадах температуры в её окрестности с учётом термодиффузии.

Н.В. Малай, Е.Р. Щужин, А.В. Лиманская 84

Алгоритм построения случайных реализаций нормального марковского поля на поверхности тора.

А.С. Мазманишвили 101

О поле температуры, возникающем при движении нагретой частицы в вязкой неизотермической газообразной среде.

Н.В. Малай, А.В. Глушак 111

Математическое моделирование отрывных течений на основе нестационарных уравнений Навье-Стокса.

Д.А. Редчиц 118

Краткие сообщения 147

Сведения об авторах 157

Информация для авторов 159

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ
СЕРИИ ЖУРНАЛА**

Главный редактор

Вирченко Ю.П.

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Заместитель главного редактора

Малай Н.В

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Ответственный секретарь

Внуков И.Е.

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Члены редколлегии:

Насонов Н.Н.

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Красильников В.В.

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Сыщенко В.В.

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Чеканов Н.А.

доктор физико-математических
наук (Белгородский
государственный университет)

Редактор *Т.Г. Лагутина*

Оригинал-макет:

Ю.П. Вирченко, Н.А. Гапоненко

e-mail: virch@bsu.edu.ru

Подписано в печать 01.12.2009.

Формат 60×84/8.

Гарнитура Times New Roman

Усл. п. л. 18,6

Тираж 500 экз.

Заказ 230

Подписные индексы в каталоге агентства:

«Роспечать» – 81631,

в объединенном каталоге

«Пресса России» – 39723

Оригинал-макет тиражирован

в издательстве Белгородского
государственного университета.

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

№ 13 (68) 2009
Issue 17

SCIENTIFIC REVIEWING JOURNAL

Founded in 1995

Founder

State educational establishment of higher professional education "Belgorod State University"

Publisher:

Belgorod State University
BSU Publishing house

The journal is registered in Federal service of control over law compliance in the sphere of mass media and protection of cultural heritage

Certificate of registration of mass media ПИ № ФС 77-21121 May, 19 2008.

EDITORIAL BOARD OF JOURNAL

Chief editor:

L.J. Djatchenko

Rector of Belgorod State University, doctor of sociological sciences, professor

Deputy of chief editor:

T.M. Davydenko

Vice-rector for scientific research of Belgorod state university, doctor of pedagogical sciences, professor

Responsible secretary:

V.M. Moskovkin

Innovative assistant of vice-rector for scientific research of Belgorod state university, Doctor of geographical sciences, professor of world economy department

EDITORIAL BOARD OF JOURNAL SERIES

Chief editor:

Yu.P. Virchenko

Doctor of physico-mathematical sciences, Professor (Belgorod State University)

Deputies of chief editor:

N.V. Malay

Doctor of physico-mathematical sciences, Professor (Belgorod State University)

Belgorod State University
Scientific bulletin
Mathematics Physics

НАУЧНЫЕ ВЕДОМОСТИ Белгородского государственного университета

Математика Физика

CONTENTS

Cluster decomposition of percolation probability on the hexagonal lattice.

E.S. Antonova, Yu.P. Virchenko 5

Modeling of the structure formation of diffusion zones at simultaneous superficial and internal oxidation of alloys.

G.S. Abramov, M.G. Abramov 29

Tunable X-ray source based on mosaic crystals using for practical applications.

D.A. Baklanov, I.E. Vnukov, Yu.V. Zhandarmov, Zyong Tkhi Zhang, S.A. Laktionova, R.A. Shatokhin 41

One-dimensional problem of heat radiative conductance. Fluctuation approach.

Z.A. Kabilov, A.V. Kovalev, N.V. Malay 71

Visualization of silicon surface treated by focused beam of Ga ions in nematic cell.

S.I. Kucheev, Yu.S. Tuchina 77

Photophoresis of the large flying spherical drop at small difference temperatures in its vicinity taking into account the thermodiffusion.

N.V. Malai, E.R. Shchukin, A.V. Limanskaya 84

The generation algorithm for random realizations of the normal markovian field on torus surface.

A.S. Mazmanishvili 101

Temperature field at the moving of heated particle in the viscous nonisothermic gaseous medium.

N.V. Malay, A.V. Glushak 111

Mathematical modeling of separated flows on the bases of unsteady Navier-tokes equations.

D.A. Redchits 118

Short communications 147

Information about Authors 157

Information for Authors 159

Responsible secretary

I.E. Vnukov

Doctor of physico-mathematical sciences,
Professor (Belgorod State University)

Members of editorial board:

N.N. Nasonov

Doctor of physico-mathematical sciences,
Professor (Belgorod State University)

V.V. Krasilnikov

Doctor of physico-mathematical sciences,
Professor (Belgorod State University)

V.V. Sushchenko

Doctor of physico-mathematical sciences,
Professor (Belgorod State University)

N.A. Chekanov

Doctor of physico-mathematical sciences,
Professor (Belgorod State University)

Editor *T.G. Lagutina*

Dummy layout by *Yu. P. Virchenko,*

N.A. Gaponenko

e-mail: virch@bsu.edu.ru

Passed for printing 01.12.2009

Format 60×84/8

Typeface Times New Roman

Printer's sheets 18,6

Circulation 500 copies

Order 230

Subscription reference in Rospechat'

agency catalogue – 81631,

In joint catalogue Pressa Rossii – 39723

Dummy layout is replicated at

Belgorod State University Publishing House.

Address: 85, Pobedy str.,

Belgorod, Russia, 308015

КЛАСТЕРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРКОЛЯЦИИ НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЁТКЕ

Е.С.Антонова, Ю.П.Вирченко

Белгородский государственный университет,

ул. Победы 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: antonova_e_s@mail.ru

На основе кластерного разложения, найдена верхняя оценка порога перколяции бернуллиевского случайного поля на гексагональной решётке. Она вычисляется посредством оценки числа циклов, которые могут служить внешней границей конечных кластеров, содержащих фиксированную вершину решётки.

Ключевые слова: вероятность перколяции, гексагональная решётка, конечный кластер, внешняя граница, кластерное разложение, порог перколяции.

1. Введение. Объектом изучения теории перколяции, в общем случае, являются случайные подмножества пространства (погружения), в котором определён фильтр по включению и дополнительное отношение связности [1]. В частности, такое положение имеет место для случайных множеств в некомпактных топологических пространствах с дополнительным отношением связности [2]. В этом случае, основной интерес представляет проблема существования в случайной реализации некомпактной связной компоненты. В том случае, когда вероятность такого события отлична от нуля, говорят о наличии перколяции. Задача вычисления этой вероятности, даже в самых простейших случаях, представляет собой серьёзную математическую проблему. Поэтому, в приложениях, обычно, для решения этой задачи прибегают к компьютерным экспериментам и, на этом пути, имеются значительные достижения. Нас же в этой работе интересует задача теории перколяции с математической точки зрения. Такого рода исследования, из-за чрезвычайной сложности проблемы, обычно, связаны с изучением простейших некомпактных пространств с отношением связности, а именно, целочисленных решёток \mathbb{Z}^d , $d = 2, 3$, где вводимая на них связность превращает их в математические объекты, которые называются периодическими графами [3]. Эта область исследований называется *дискретной теорией перколяции*. Однако, даже на периодических графах, задача о вероятности перколяции, в настоящее время, поддаётся математической обработке только для случайных множеств, порождаемых бернуллиевскими полями $\{\tilde{c}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d\}$, распределение вероятностей которых определяется одним параметром $c = \Pr\{\tilde{c}(\mathbf{x}) = 1\}$. В настоящей работе, находится оценка сверху так называемого *порога перколяции*

c_* на однородном периодическом графе размерности 2, который называется гексагональной решёткой. Вероятность перколяции $Q(c)$ отлична от нуля при $c > c_*$. Наша оценка строится на основе традиционного подхода, на так называемой контурной технике, которую мы называем *кластерным разложением* (см. [2], [4],[5]). В работе находится верхняя оценка числа конечных заполненных кластеров на решётке указанного типа, содержащих фиксированную вершину. Это позволяет получить верхнюю оценку для величины c_* .

2. Проблема теории перколяции на гексагональной решётке. Введём в рассмотрение математические объекты, которые моделируют кристаллические решётки и поставим задачу дискретной теории перколяции на такого рода геометрических структурах. В связи с целями настоящей работы, мы будем считать решётки двумерными.

Бесконечное множество V в \mathbb{R}^2 назовём периодическим, если существует пара $\langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle$ неколлинеарных векторов в \mathbb{R}^2 таких, что для любых $n_i \in \mathbb{Z}$, $i \in \{1, 2\}$ имеет место $V = V + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$. Периодическое множество будем называть *кристаллической решёткой* в \mathbb{R}^2 , если оно состоит из изолированных точек. Кристаллическая решётка допускает дизъюнктивное разложение $V = \bigcup_{\langle n_1, n_2 \rangle \in \mathbb{Z}^2} \{V_0 + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2\}$, где конечное множество V_0 называется кристаллической ячейкой. Если число точек в V_0 является минимальным среди всех допустимых для V кристаллических ячеек, то такая ячейка называется *элементарной*. Так как для постановки задач теории перколяции важна только топологическая структура множества, на котором исследуется *просачивание* случайного поля, то для формулировки задачи дискретной теории перколяции удобно использовать понятие периодического графа и его вложения \mathbf{M} в \mathbb{R}^2 , образом которого является кристаллическая решётка и которое определяет на ней связность.

О п р е д е л е н и е 1 [3]. Пусть $\Lambda = \langle V, \Phi \rangle$ – бесконечный неориентированный граф без петель, где V – множество вершин и Φ – множество рёбер (двухэлементных подмножеств из V). Этот граф называется периодическим, имеющим размерность два, если он допускает такое вложение \mathbf{M} в \mathbb{R}^2 , при котором образ $\mathbf{M}V$ является кристаллической решёткой в \mathbb{R}^2 , а образ $\mathbf{M}\Phi$ множества Φ инвариантен относительно трансляций с парой периодов $\langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle$,

$$\mathbf{M}\Phi + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 = \mathbf{M}\Phi, \quad (1)$$

$\langle n_1, n_2 \rangle \in \mathbb{Z}^2$ и при этом множество $\Phi_0 = \{\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} \in \Phi : \mathbf{M}\mathbf{y} \in V_0\}$ конечно.

Пару вершин \mathbf{x}, \mathbf{y} из V , для которых имеется ребро $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} \in \Phi$, будем

называть смежными и обозначать отношение смежности посредством $\mathbf{x}\phi\mathbf{y}$.

В дальнейшем изложении, мы не будем различать вершины графа и их образы, получаемые вложением \mathbf{M} , а также не будем различать отличающиеся друг от друга вложения графа Λ в \mathbb{R}^2 . Таким образом, мы считаем, что множество V вершин графа совпадает с $\bigcup_{\mathbf{x} \in V_0} \{\mathbb{Z}^2 + \mathbf{x}\}$ и свойство (1) его пе-

риодичности записывается в виде соотношения $\Phi = \Phi + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$. Тогда отношение смежности вершин периодического графа $\langle V, \Phi \rangle$ полностью определяется множеством Φ_0 , так как Φ допускает дизъюнктивное разложение $\Phi = \bigcup_{\langle n_1, n_2 \rangle \in \mathbb{Z}^2} \{\Phi_0 + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2\}$. В связи с этим мы будем называть множество Φ_0 множеством смежности. На языке кристаллографии оно определяет "ближайших" соседей на кристаллической решётке для точек из фиксированной элементарной кристаллической ячейки V_0 .

Бесконечный периодический граф Λ размерности два называется *гексагональной решёткой*, если элементарная ячейка V_0 содержит две вершины так, что при выборе периодов $\langle \mathbf{a}_1 = 2\mathbf{e}_1, \mathbf{a}_2 = \mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2/2 \rangle$, $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ – орты в \mathbb{R}^2 можно положить

$$V_0 = \{\mathbf{x}_1 = \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2/2, \mathbf{x}_2 = 2\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2\},$$

$$\Phi_0 = \{\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{e}_2 \rangle; \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 + \mathbf{e}_2/2 - \mathbf{e}_1 \rangle;$$

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle; \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_2 \rangle; \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2/2 \rangle\}.$$

Шестиугольная решётка $\langle \Lambda, \Phi \rangle$ показана на левой части рис.1. На правой части этого рисунка она представлена в терминах указанных множеств V_0, Φ_0 .

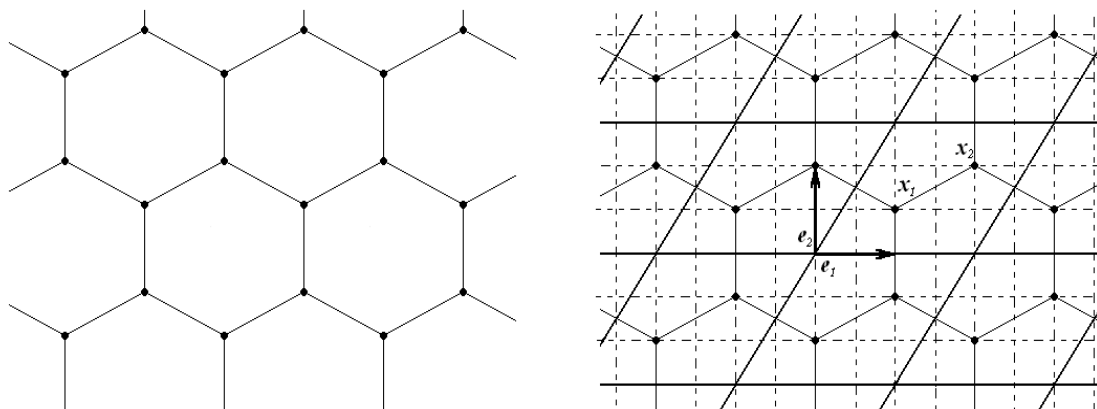


Рис. 1: Гексагональная решётка.

Введём в рассмотрение на графе $\langle V, \Phi \rangle$ бернуллиевское случайное поле $\{\tilde{c}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in V\}$ с концентрацией $c = \Pr\{\tilde{c}(\mathbf{x}) = 1\}$. Здесь и далее, тильда, поставленная над математическим объектом, обозначает его случайность. Каждая случайная реализация $\tilde{c}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in V$ этого поля определяет множество $\tilde{W} = \{\mathbf{x} : \tilde{c}(\mathbf{x}) = 1\}$, которое мы будем называть *конфигурацией*. Соответственно, вся совокупность реализаций $\{\tilde{c}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in V\}$ вместе с заданным на них распределением вероятностей определяет случайное множество на V , распределение вероятностей для которого индуцируется распределением вероятностей поля $\{\tilde{c}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in V\}$. А именно, для каждого конечного подмножества $M \subset V$ вершин решётки, вероятность его заполнения случайной конфигурацией \tilde{W} определяется формулой $\Pr\{M \subset \tilde{W}\} = c^{|M|}$.

Отношение смежности ϕ индуцирует на основе понятия пути отношение связности на графе $\langle V, \Phi \rangle$ для каждой случайной конфигурации \tilde{W} . Последовательность $\alpha = \langle \tilde{\mathbf{x}}_0, \tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_n \rangle$ вершин, выбранных из конфигурации \tilde{W} , будем называть путём α длины n , если $\tilde{\mathbf{x}}_i \phi \tilde{\mathbf{x}}_{i+1}$, $i = 0, 1, \dots, n-1$. Путь будем называть простым, если в указанной последовательности $\tilde{\mathbf{x}}_i \neq \tilde{\mathbf{x}}_j$ при всех значениях индексов $i < j$ и, соответственно, – циклом, если совпадение вершин в последовательности $\langle \tilde{\mathbf{x}}_0, \tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_n \rangle$ имеет место только при $i = 0$, $j = n$. Пару вершин $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\}$ будем называть *связанной* на \tilde{W} , если $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} \subset \tilde{W}$ и на этой конфигурации существует простой путь $\alpha = \langle \mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_{n-1}, \mathbf{y} \rangle$. Отношение связности для пар вершин является отношением эквивалентности. Поэтому всякая случайная конфигурация \tilde{W} распадается на семейство

$\mathfrak{M}[\tilde{W}] = \{\tilde{W}_j; j \in \mathbb{N}\}$ непересекающихся связанных множеств: $\tilde{W} = \bigcup_{j=1}^{\infty} \tilde{W}_j$,

которые называются *кластерами*. Каждый кластер состоит из связанных между собой вершин и никакие две вершины, взятые из различных кластеров, не являются связанными. Обозначим посредством $\tilde{W}(\mathbf{x})$ тот кластер из семейства $\mathfrak{M}[\tilde{W}]$, который содержит вершину $\mathbf{x} \in V$. Если вершина \mathbf{x} не содержится в конфигурации \tilde{W} , то будем считать, что $\tilde{W}(\mathbf{x}) = \emptyset$. Введём случайную функцию $\tilde{a}(\mathbf{x})$, описывающую свойство просачивания случайного поля $\{\tilde{c}(\mathbf{z}), \mathbf{z} \in V\}$,

$$\tilde{a}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1; & |\tilde{W}(\mathbf{x})| = \infty, \\ 0; & |\tilde{W}(\mathbf{x})| < \infty, \end{cases}$$

где здесь и далее используется обозначение $|\cdot| \equiv \text{Card}(\cdot)$. В первом случае, существует бесконечный путь $\alpha(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}_i; i \in \mathbb{N}_+ \rangle$, где $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ и $\mathbf{x}_i \in \tilde{W}(\mathbf{x})$, $i \in \mathbb{N}_+$. Во втором случае, такой путь отсутствует.

На основе случайной функции $\tilde{a}(\mathbf{x})$ определим вероятность перколяции

поля $\{\tilde{c}(\mathbf{z}); \mathbf{z} \in V\}$ из фиксированной вершины $\mathbf{y} \in V$. А именно, говорят, что имеет место перколяция из этой вершины, если положительна вероятность $Q(c) = \Pr\{\tilde{a}(\mathbf{y}) = 1\} > 0$. Она не зависит от вершины \mathbf{y} , если периодический граф является однородным. Последнее означает, что, для каждой пары $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$, имеются такие вложения M_1, M_2 в \mathbb{R}^2 , образы которых совпадают и $M_1\mathbf{x} = M_2\mathbf{y}$. В настоящей работе, нас будет интересовать величина $c_* = \inf\{c : Q(c) > 0\}$, которая называется *порогом перколяции*.

3. Конечные кластеры на гексагональной решётке. Введём, следуя [3], понятие внешней границы конечного кластера $\tilde{W}(\mathbf{x})$. С этой целью построим на множестве V другой периодический граф $\Lambda^* = \langle V, \Phi^* \rangle$, который будем называть сопряжённым к Λ . Отношение смежности Φ^* на сопряжённом графе вводится согласно рис.2, где для фиксированной вершины $\mathbf{0}$, указаны занумерованные по часовой стрелке ϕ^* -смежные с ней вершины. Это означает, что на рис.1 при выбранном нами вложении гексагональной решётки ϕ^* -смежными с вершиной \mathbf{x}_2 являются вершины

$$\{\mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_2, \mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2/2, \mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_2 + 2\mathbf{e}_1, \mathbf{x}_2 + 2\mathbf{e}_1, \mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2/2, \mathbf{x}_2 + \mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2/2, \mathbf{x}_2 - 2\mathbf{e}_2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2/2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2/2, \mathbf{x}_2 - 2\mathbf{e}_1, \mathbf{x}_2 - 2\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2/2\}.$$

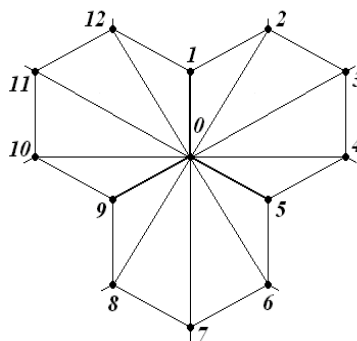


Рис. 2: Отношение смежности вершины $\mathbf{0}$ на сопряжённом графе.

Отношение смежности ϕ^* аналогично отношению ϕ порождает для каждой случайной конфигурации \tilde{W} отношение связности, которое разбивает на связные множества как саму конфигурацию \tilde{W} , так и дополнительную к ней конфигурацию $V \setminus \tilde{W}$.

О п р е д е л е н и е 2 [3]. Пусть W является конечным кластером. Множество, обозначаемое нами посредством ∂W , называется внешней границей этого кластера на конфигурации \tilde{W} , если $\tilde{W} \supset W, \mathbb{Z}^2 \setminus W \supset \partial W$ и это множество состоит из таких вершин $\mathbf{z} \notin \tilde{W}$, для каждой из которых:

1) существует вершина $\mathbf{y} \in W$ такая, что $\mathbf{z}\phi\mathbf{y}$;

2) для этой вершины \mathbf{z} , существует бесконечный ϕ -путь α на графе $\langle V, \Phi \rangle$, $\alpha \cap W = \emptyset$, начинающийся в точке \mathbf{z} , причём \mathbf{z} является единственной вершиной в пересечении этого пути с множеством $\{\mathbf{x} \notin W : \mathbf{x}\phi\mathbf{y}, \mathbf{y} \in W\}$.

Имеет место следующее утверждение [3].

Т е о р е м а 1. Пусть $W(\mathbf{x})$ – конечный кластер, содержащий вершину $\mathbf{x} \in V$. Тогда $W(\mathbf{x})$ имеет непустую конечную внешнюю границу $\partial W(\mathbf{x})$, которая обладает следующими свойствами:

1. Множество $\partial W(\mathbf{x})$ является простым циклом $\langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{x}_0 \rangle$ на графе $\langle V, \Phi^* \rangle$, где n – его длина.

2. Цикл $\partial W(\mathbf{x})$ окружает вершину \mathbf{x} при периодическом погружении $\langle V, \Phi^* \rangle$ в \mathbb{R}^2 .

Хотя утверждение теоремы является достаточно очевидным, тем не менее, полное её доказательство опирается на т.н. топологическую теорему Жордана.

Условие того, что путь является простым ϕ^* -циклом затруднительно выразить аналитически. Поэтому предлагаемое ниже в п.6 оценивание сверху числа циклов фиксированной длины, которые могут служить внешними границами конечных кластеров, содержащих заданную вершину, основано на выявлении подходящих достаточных для этого условий, которые можно выразить аналитически.

4. Кластерное разложение на \mathbb{Z}^2 . Пусть \mathbf{A} семейство конечных кластеров W , содержащих вершину $\mathbf{0}$ на гексагональной решётке. Определим для любого кластера $W \in \mathbf{A}$ случайное событие $A(W) = \{\tilde{W} : \mathbf{0} \in \tilde{W}, W \in \mathfrak{M}[\tilde{W}], \tilde{W}(\mathbf{0}) = W\}$. Вероятность этого события равна

$$\Pr\{A(W)\} = c^{|W|}(1-c)^{|\partial W|}. \quad (2)$$

Согласно Теореме 1, каждому кластеру W из семейства \mathbf{A} отвечает простой ϕ^* -цикл γ , окружающий вершину $\mathbf{0}$ и такой, что $\gamma = \partial W$. В связи с этим введём в рассмотрение семейство \mathbf{B} всех простых ϕ^* -циклов, окружающих $\mathbf{0}$. Для каждого ϕ^* -цикла $\gamma \in \mathbf{B}$ определим событие $B(\gamma) = \{\tilde{M} : \mathbf{0} \in \tilde{M}, \tilde{W}(\mathbf{0}) \in \mathfrak{M}[\tilde{M}], \partial \tilde{W}(\mathbf{0}) = \gamma\}$, которое представимо в виде конечного объединения попарно непересекающихся событий

$$B(\gamma) = \bigcup_{W \in \mathbf{A} : \partial W = \gamma} A(W). \quad (3)$$

Вероятность $P(\gamma) = \Pr\{B(\gamma)\}$ согласно (2), (3) равна

$$P(\gamma) = \sum_{W \in \mathbf{A} : \partial W = \gamma} \Pr\{A(W)\} = \sum_{W \in \mathbf{A} : \partial W = \gamma} c^{|W|}(1-c)^{|\partial W|}.$$

Событие $\{\tilde{a}(\mathbf{0}) = 0\}$ допускает дизъюнктивное разложение

$$\{\tilde{a}(\mathbf{0}) = 0\} = \{\mathbf{0} \notin \tilde{W}\} \cup \left(\bigcup_{W \in \mathbf{A}} A(W) \right).$$

При этом семейство \mathbf{A} разлагается на непересекающиеся классы, состоящие из кластеров объединяемых следующим признаком. К одному классу отнесём такие кластеры $W \in \mathbf{A}$, которые имеют одну и ту же внешнюю границу. Поэтому справедливо преобразование

$$\bigcup_{W \in \mathbf{A}} \dots = \bigcup_{\gamma \in \mathbf{B}} \left\{ \bigcup_{W \in \mathbf{A} : \partial W = \gamma} \dots \right\}.$$

Далее, на основании (3), получаем

$$\{\tilde{a}(\mathbf{0}) = 0\} = \{\mathbf{0} \notin \tilde{W}\} \cup \left(\bigcup_{\gamma \in \mathbf{B}} B(\gamma) \right)$$

и так как $\Pr\{\mathbf{0} \notin \tilde{W}\} = 1 - c$ и

$$1 - Q(c) = \Pr\{\tilde{a}(\mathbf{0}) = 0\},$$

то мы приходим к следующему утверждению.

Т е о р е м а 2. Вероятность $Q(c)$ представляется кластерным разложением

$$c - Q(c) = \sum_{\gamma \in \mathbf{B}} P(\gamma). \tag{4}$$

Кластерное разложение согласно своему определению является сходящимся. При этом функция $Q(c)$ отлична от нуля только при $c > c_* > 0$, и поэтому она не является аналитической. С этим обстоятельством связаны принципиальные трудности вычисления величины c_* . В настоящее время не существует каких-либо алгоритмов её вычисления, не использующих стохастическое компьютерное моделирование.

5. Оценка вероятности перколяции. Для получения верхней оценки порога перколяции необходимо получить подходящую оценку снизу для вероятности $Q(c)$. Эта оценка основана на следующем утверждении

Л е м м а 1. Имеет место неравенство

$$c - Q(c) \leq \sum_{n=3}^{\infty} (1-c)^n r_n, \quad (5)$$

где $r_n = |\{\gamma \in \mathbf{B} : |\gamma| = n\}|$, $n \geq 3$.

□ Воспользуемся элементарной оценкой $P(\gamma) \leq (1-c)^{|\gamma|}$, которая следует из определения 2 и выражения для $B(\gamma)$. Используя эту оценку и (4), приходим к ограничению сверху суммы

$$\sum_{\gamma \in \mathbf{B}} P(\gamma) \leq \sum_{\gamma \in \mathbf{B}} (1-c)^{|\gamma|} = \sum_{k=3}^{\infty} (1-c)^k r_k. \quad \blacksquare$$

Найдем теперь верхнюю оценку для величины r_n , $n \geq 3$. С этой целью введём множество \mathbf{B}_n всех простых ϕ^* -циклов длины n на решётке Λ^* , которые окружают вершину $\mathbf{0}$. Далее, введём множество $\mathbf{C}_n(\mathbf{x}_0)$ путей $\gamma = \langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \rangle$ длины n на Λ^* решётке, которые обладают свойством $\mathbf{x}_j \neq \mathbf{x}_{j+2}$, $j = 0, 1, \dots, n-2$ и связанные с ним подмножества $\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)$ путей длины n , у каждого из которых зафиксированы первые две вершины, а каждые два следующих друг за другом ребра обязательно являются частью какого-либо цикла из $\mathbf{B} = \bigcup_{n=3}^{\infty} \mathbf{B}_n$. Ввиду однородности гексагональной решётки величина $|\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)|$ не зависит от вершины \mathbf{x}_0 . Для фиксированного пути $\alpha_k = \langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \rangle$ рассмотрим множество $\mathbf{B}(\alpha_k)$ таких рёбер $\mathbf{x}_k \phi^* \mathbf{x}_{k+1}$, которые при присоединении к нему образуют путь $\alpha_{k+1} = \langle \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k+1} \rangle$, являющийся частью цикла из класса \mathbf{B} . Обозначим посредством n_* максимум среди всех чисел $|\mathbf{B}(\alpha_k)|$, вычисляемый по всем возможным путям α_k , $k \in \mathbb{N}$ (число n_* будет вычислено в п.6).

Л е м м а 2. Имеет место неравенство

$$r_n < n_*(n-2) \max_{\mathbf{x}_1: \mathbf{x}_1 \phi^* \mathbf{x}_0} \{|\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)|\}. \quad (6)$$

□ Проведем из вершины $\mathbf{0}$ бесконечный путь $\alpha(\mathbf{0})$ на решётке Λ без самопересечений. Для определённости, будем считать, что этот путь выбран

таким образом, что каждая его конечная часть обладает наименьшей длиной среди всех путей, соединяющих её концевые вершины. Согласно теореме 1, каждый цикл на Λ^* обязательно имеет общую с этим путём вершину из множества V . Выберем среди всех таких общих вершин ближайшую к вершине $\mathbf{0}$ вдоль пути $\alpha(\mathbf{0})$ и обозначим её \mathbf{z}_γ . Тогда, все циклы из \mathbf{B} распределяются на непересекающиеся множества $\mathbf{B}(l)$, $l \in \mathbb{N}$ такие, что к одному множеству относятся те и только те циклы γ , у которых вершина \mathbf{z}_γ находится на расстоянии l вдоль пути $\alpha(\mathbf{0})$, $\text{dist}(\mathbf{z}_\gamma, \mathbf{0}) = l$. На основе множеств $\mathbf{B}(l)$, построим множества $\mathbf{B}_n(l) = \mathbf{B}(l) \cap \mathbf{B}_n = \{\gamma \in \mathbf{B} : |\gamma| = n, \text{dist}(\mathbf{z}_\gamma, \mathbf{0}) = l\}$. Очевидно, что имеет место неравенство $l \leq n - 2$, и поэтому $\mathbf{B}_n = \bigcup_{l=1}^{n-2} \mathbf{B}_n(l)$,

$$r_n = \sum_{l=1}^{n-2} |\mathbf{B}_n(l)|. \tag{7}$$

Зафиксируем направление обхода для циклов $\gamma = \langle z_\gamma, x_1, \dots, x_{n-1}, z_\gamma \rangle$ из $\mathbf{B}_n(l)$. Введём в рассмотрение непересекающиеся множества $\mathbf{B}_n(l, \mathbf{a}) = \{\gamma \in \mathbf{B}_n(l) : \mathbf{x}_1 - \mathbf{z}_\gamma = \mathbf{b}\}$ циклов из $\mathbf{B}_n(l)$, у которых зафиксирована первая после \mathbf{z}_γ в установленном порядке обхода цикла вершина $\mathbf{x}_1 = \mathbf{z}_\gamma + \mathbf{b}$. Вектор \mathbf{b} является одним из векторов на рис.2 при условии, что нулевой вершиной является вершина \mathbf{z}_γ . Имеет место разложение $\mathbf{B}_n(l) = \bigcup_{\mathbf{y}: \mathbf{z}_\gamma \phi^* \mathbf{y}} \mathbf{B}_n(l, \mathbf{y} - \mathbf{z}_\gamma)$, и поэтому

$$|\mathbf{B}_n(l)| = \sum_{\mathbf{y}: \mathbf{z}_\gamma \phi^* \mathbf{y}} |\mathbf{B}_n(l, \mathbf{y} - \mathbf{z}_\gamma)|. \tag{8}$$

Очевидно, что $\mathbf{B}_n(l, \mathbf{b}) \subset \mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{z}_\gamma, \mathbf{z}_\gamma + \mathbf{b})$, так как зафиксировав любой путь из $\mathbf{B}_n(l, \mathbf{b})$, после удаления последнего, в порядке прохождения, ребра, он превращается в путь из $\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{z}_\gamma, \mathbf{z}_\gamma + \mathbf{b})$. При установлении же этой инъекции, каждому пути из $\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{z}_\gamma, \mathbf{z}_\gamma + \mathbf{b})$ может соответствовать не более одного цикла из $\mathbf{B}_n(l, \mathbf{b})$. Тогда, из (8) следует неравенство

$$|\mathbf{B}_n(l)| \leq n_* \max_{\mathbf{x}_1: \mathbf{x}_1 \phi^* \mathbf{x}_0} \{|\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)|\}.$$

Так как величина $|\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)|$ не зависит от $l = \text{dist}(\mathbf{0}, \mathbf{z}_\gamma)$, то применяя полученную оценку для оценивая сверху правой части разложения (7), получаем (6). ■

Для оценки величины $|\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)|$ введём следующую конструкцию. Охарактеризуем однозначно каждый путь из $\mathbf{C}_n(\mathbf{x}_0)$, $n \geq 2$ последовательностью $\langle \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_{n-1} \rangle$ векторов "сдвига", где $\mathbf{b}_1 = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0$ и каждый вектор \mathbf{b}_i ,

$i = 2, \dots, n$ представляет собой вектор $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}$, повернутый по часовой стрелке на угол, который образуется вектором $\mathbf{x}_{i-1} - \mathbf{x}_{i-2}$ и ортом \mathbf{e}_1 на плоскости расположения решётки и который отсчитывается против часовой стрелки. В этой параметризации множеству $\mathbf{C}_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)$ сопоставляется равномошное ему множество $\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1)$ всех последовательностей $\langle \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n \rangle$ с фиксированным вектором \mathbf{b}_1 , у которых каждая входящая в их состав пара $\langle \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_{i+1} \rangle$, $i = 1, 2, \dots, n-1$ является допустимой, то есть для каждой пары $\langle \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_{i+1} \rangle$ в множестве \mathbf{A} существует такой кластер, у которого в составе внешней границы, записанной в терминах векторов сдвига, имеется пара $\langle \mathbf{b}, \mathbf{b}' \rangle$ следующих друг за другом сдвигов, которая совпадает с $\langle \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_{i+1} \rangle$, $i = 1, 2, \dots, n-1$. Следовательно $|\mathbf{C}_n(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)| = g(\mathbf{b}_1; n) \equiv |\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1)|$.

Разложим множество $\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1)$ на непересекающиеся друг с другом множества $\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_n)$ последовательностей $\langle \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_n \rangle$, у которых, кроме первого, зафиксирован также последний сдвиговый вектор \mathbf{b}_n ,

$$\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1) = \bigcup_{\mathbf{b}_n} \mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_n).$$

Тогда $g(\mathbf{b}_1; n) = \sum_{\mathbf{b}_n} |\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_n)|$. Вводя нумерацию для возможных сдвиговых векторов, которая представлена на рис.2, мы можем считать, что величина $|\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1; \mathbf{b}_n)|$ при каждом значении $n \in \mathbb{N}$ является 12-ти мерным вектором $g_j(\mathbf{b}_1, n)$ так, что каждая его j -я компонента равна значению этой величины в том случае, когда \mathbf{b}_n имеет номер j в принятой нумерации, $j = 1 \div 12$. При этом $g(\mathbf{b}_1; n) = \sum_{j=1}^{12} g_j(\mathbf{b}_1; n)$.

Определим, теперь, матрицу \mathcal{S} , размерность которой равна числу ближайших соседей вершины на сопряжённой решётке Λ^* . Для гексагональной решётки это число равно 12. Матричные элементы S_{ij} , $i, j = 1 \div 12$ принимают значения 0 или 1 согласно следующему правилу. Положим $S_{ij} = 1$, если при построении последовательности из $\mathbf{G}_n(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_n)$ при каком-либо значении $n = 3, 4, \dots$ её длины возможно появление в этой последовательности для какого-то номера $k \leq n-1$, пары $\langle \mathbf{b}_k, \mathbf{b}_{k+1} \rangle$ сдвиговых векторов такой, что векторы $\mathbf{b}_k, \mathbf{b}_{k+1}$ имеют, соответственно, номера i и j в принятой на рис.2 нумерации. Наоборот, $S_{ij} = 0$, если не существует кластера, внешняя граница которого содержала бы указанную стыковку рёбер. Матрицу \mathcal{S} будем называть далее *матрицей соединения путей*.

Л е м м а 3. Пусть у матрицы \mathcal{S} максимальное по модулю собственное

число единственно. Тогда имеет место асимптотическая формула

$$g_i(\mathbf{b}_1, n) = C_{ij}\lambda_0^{n-1}(1 + o(1)), \tag{9}$$

где номер j соответствует сдвиговому вектору \mathbf{b}_1 и ненулевая матрица \mathcal{C} имеет неотрицательные матричные элементы C_{ij} , $\lambda_0 > 0$.

□ Заметим, что согласно определению вектора $g_i(\mathbf{b}_1; n)$ для любого $n = 2, 3, \dots$ и вектора \mathbf{b}_1 с номером j в параметризации, данной на рис.2, имеет место рекуррентное соотношение

$$g_i(\mathbf{b}_1; n) = \sum_{k=1}^{12} g_k(\mathbf{b}_1; n - 1)S_{ki}.$$

Кроме того, согласно определению этого вектора, имеет место $g_i(\mathbf{b}_1; 1) = S_{ji}$. Тогда индукцией по $n \in \mathbb{N}$ заключаем, что

$$g_i(\mathbf{b}_1; n) = (\mathcal{S}^{n-1})_{ji}.$$

Так как у матрицы \mathcal{S} имеется единственное максимальное собственное число с максимальным абсолютным значением, то при $n \rightarrow \infty$ для выражения в правой части последнего равенства справедлива асимптотическая формула (9). Кроме того, так как $S_{ij} \geq 0$, то положительность λ_0 и матричных элементов C_{ij} следует из теоремы Фробениуса [6] для матриц с неотрицательными элементами. ■

Теперь, мы в состоянии получить оценку снизу для вероятности $Q(c)$.

Т е о р е м а 3. Пусть λ_0 – максимальное собственное число матрицы \mathcal{S} соединения путей единственно. Тогда для вероятности $Q(c)$ имеет место оценка

$$Q(c) \geq c - Cn_*(1 - c)^2 \sum_{l=3}^{\infty} (n - 2)[(1 - c)\lambda_0]^{n-2}, \tag{10}$$

где положительная постоянная $C > \max_j \sum_{i=1}^{12} C_{ij}$ выбрана так, что имеет место неравенство $g_i(\mathbf{b}_1, n) < C\lambda_0^{n-1}$, $n \in \mathbb{N}$.

□ На основании лемм 1 и 2 и определения функции $g_i(\mathbf{b}_1; n)$, имеем

$$c - Q(c) \leq \sum_{n=3}^{\infty} (1 - c)^n r_n \leq n_* \sum_{n=3}^{\infty} (n - 2)(1 - c)^n \max_{\mathbf{x}_1} \{|\mathbf{C}_{n-1}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)|\} =$$

$$= n_* \sum_{n=3}^{\infty} (n-2)(1-c)^n g_{n-1}(\mathbf{b}_1) = n_* \sum_{n=3}^{\infty} (n-2)(1-c)^n \sum_{i=1}^{12} g_i(\mathbf{b}_1; n-1).$$

Применяя асимптотическую формулу (9) и определение постоянной C , получаем

$$c - Q(c) \leq n_* C (1-c)^2 \sum_{n=3}^{\infty} (n-2) [(1-c)\lambda_0]^{n-2}. \quad \blacksquare$$

С л е д с т в и е. Для порога перколяции c_* бернуллиевского случайного поля $\{\tilde{c}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in V\}$ на гексагональной решётке $\langle V, \Phi \rangle$ справедливо неравенство $c_* \leq 1 - \lambda_0^{-1}$.

□ Ряд в правой части неравенства (10) сходится при $(1-c)\lambda_0 < 1$, то есть при $c > 1 - \lambda_0^{-1}$. Сходимость же этого ряда, применяя рассуждение, основанное на лемме Бореля-Кантелли (см., например, [7]), приводит к отличной от нуля вероятности перколяции при выполнении указанного ограничения на параметр c . Следовательно, $c_* \leq 1 - \lambda_0^{-1}$. ■

6. Верхняя оценка порога перколяции. Из рассмотрений предыдущего раздела следует, что задача оценивания сверху порога перколяции на гексагональной решётке сводится к вычислению собственного числа λ_0 . Для его вычисления нужно, прежде всего, установить явный вид матрицы \mathcal{S} . При определении значений матричных элементов S_{ij} необходимо либо предъявить кластер, внешняя граница которого содержит пару рёбер $\langle \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2 \rangle$, имеющих номера i и j , соответственно, либо доказать, что кластеров, граница которых содержит такую пару рёбер с общей вершиной не существует. Следующие утверждения описывают общую структуру матрицы \mathcal{S} и устанавливают, какие из её матричных элементов заведомо равны нулю.

Л е м м а 4. Матрица S_{ij} симметрична и $S_{ii} = 0$.

□ Так как прохождение цикла, составляющего внешнюю границу, возможно в обоих направлениях, то существование или отсутствие в нём пары $\langle \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2 \rangle$ следующих друг за другом рёбер с номерами i и j приводит к существованию или отсутствию цикла, у которого есть пара рёбер $\langle \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1 \rangle$, то есть $S_{ij} = S_{ji}$. Так как равенство $S_{ii} = 1$ соответствует тому, что во внешней границе имеется пара рёбер, которые описываются парой $\langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle$ в последовательности $\langle \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n \rangle$ так, что вектор \mathbf{b} имеет номер i . Это означает, согласно описанию цикла посредством указанной последовательности, что эти рёбра имеют вид $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ и $\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle$, что невозможно. Поэтому $S_{ii} = 0$ для всех значений $i = 1 \div 12$. ■

Л е м м а 5. Матрица S_{ij} обладает свойством $S_{1,j} = S_{1,14-j}$, $S_{5,j} = S_{5,10-j}$, $S_{9,j} = S_{9,18-j}$, $j = 2 \div 12$, где операция вычитания в нижнем индексе понимается по модулю 12.

□ Первое свойство следует из симметрии рисунка, описывающего стыковки рёбер в вершине **0** на рис.2, относительно отражения от прямой, определяемой вершинами **1, 0, 7**. Второе соотношение следует из симметрии этого рисунка относительно отражений от прямой, проходящей через **5, 0, 11**, а третье – относительно прямой, проходящей через **9, 0, 3**. ■

Л е м м а 6. Матричные элементы S_{ij} обладают свойством $S_{i+4,j+4} = S_{ij}$, где суммы $i + 4$ и $j + 4$ понимаются по модулю 12.

□ Это свойство следует из симметрии рис.2, описывающего возможные соединения рёбер в вершине **0**, относительно поворотов на угол $2\pi/3$. ■

С л е д с т в и е. Матрица \mathcal{S} имеет следующую блочную структуру, составленную из двух 4×4 -матриц F, G

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} F & G & G^+ \\ G^+ & F & G \\ G & G^+ & F \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где G^+ – транспонированная к G матрица.

□ Из леммы 6 следует, что матрица \mathcal{S} на основе 4×4 -матриц F, G, H с матричными элементами $F_{ij} = S_{ij}$, $G_{ij} = S_{i,j+4}$, $H_{ij} = S_{i,j+8}$, $i, j = 1 \div 4$ представляется следующим образом:

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} F & G & H \\ H & F & G \\ G & H & F \end{pmatrix}.$$

Из леммы 4 следует, что $H = G^+$, так как $G_{ij} = S_{i,j+4} = S_{i+8,j}$ при $i, j = 1 \div 4$ и одновременно $S_{i+8,j} = S_{j,i+8} = H^+$. ■

Л е м м а 7. $S_{1,5} = 0$.

□ У каждой вершины \mathbf{x} внешней границы ∂W должна быть смежная с ней вершина \mathbf{y} , принадлежащая W , и вершина \mathbf{z} , смежная с \mathbf{x} , но не принадлежащая $W \cup \partial W$. Допустим, что $S_{1,5} = 1$. Тогда вершины **1** и **5** (см. рис.3) принадлежат ∂W и, следовательно, не принадлежат W . Так как вершина **0** имеет три смежные вершины **1, 5, 9**, то вершина **9** должна одновременно быть вершиной из W и не принадлежать $W \cup \partial W$, что невозможно. ■

Л е м м а 8. $S_{ij} = 0$, $i, j = 1 \div 4$.

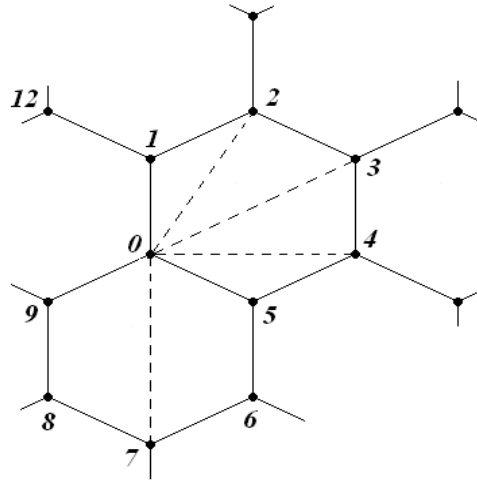


Рис. 3: Возможные соединения вершины 0 в составе внешней границы кластера.

□ Достаточно доказать, что $S_{1,j} = 0$, $j = 2, 3, 4$ и $S_{2,j} = 0$, $j = 3, 4$. Рассмотрим первую группу матричных элементов. Вершины 0 и 1 принадлежат ∂W . Для них существуют вершины $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in W$ такие, что $\mathbf{x} \phi 1$, $\mathbf{y} \phi 0$, а также существуют вершины $\mathbf{x}', \mathbf{y}' \notin W \cup \partial W$ такие, что $\mathbf{x}' \phi 1$, $\mathbf{y}' \phi 0$. Из каждой вершины \mathbf{x}' и \mathbf{y}' существуют пути на бесконечность, не пересекающиеся с W . Для вершины 1 такими вершинами \mathbf{x}, \mathbf{x}' могут быть 2 и 12 , а для вершины 0 таковыми могут быть вершины 5 и 9 . Тогда имеется четыре варианта выбора вершин \mathbf{x}, \mathbf{x}' и \mathbf{y}, \mathbf{y}' из представленных возможностей. Достаточно рассмотреть два из них, не сводящихся друг у другу зеркальным отражением относительно прямой, проходящей через $1, 0, 7$. В качестве двух таких возможностей мы выберем следующие. Точками \mathbf{x}, \mathbf{x}' служат 2 и 12 и вершинами \mathbf{y}, \mathbf{y}' , в первом случае, — 9 и 15 , а, во втором случае, наоборот, вершины 15 и 9 меняются местами.

В первый случае, существует непересекающиеся с W бесконечные пути из вершин 1 и 0 , которые проходят, соответственно, через вершины 12 и 5 . Рассмотрим линию в плоскости, в которой размещена решётка. Эта линия состоит из первого пути по рёбрам решётки и приходит из бесконечности в вершину 12 , далее, из последовательности рёбер $\langle 12, 1 \rangle$, $\langle 1, 0 \rangle$, $\langle 0, 5 \rangle$ и из второго пути из вершины 5 на бесконечность. Линия делит плоскость на части так, что вершины \mathbf{x} и \mathbf{y} находится в разных частях. Тогда, вершины \mathbf{x} и \mathbf{y} не могут быть вершинами одного и того же кластера W , так как любой путь из вершины \mathbf{x} в вершину \mathbf{y} по ребрам решётки обязательно пересечёт эту линию, а пересечь он её может только в одной из вершин решётки. Следовательно в

рассмотренном варианте невозможно соединение ребра $\langle \mathbf{1}, \mathbf{0} \rangle$ ни с одним из рёбер $\langle \mathbf{0}, \mathbf{j} \rangle$, $j = 2, 3, 4$.

Во втором случае аналогичным образом рассматривается линия на плоскости, которая состоит из пути, приходящего из бесконечности в вершину $\mathbf{1}$ без пересечения с кластером W , ребра $\langle \mathbf{1}, \mathbf{0} \rangle$, диагонали из вершины $\mathbf{0}$ вершину \mathbf{j} представленной на рис.3 грани гексагональной решётки с вершинами $\mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}, \mathbf{4}, \mathbf{5}$ и пути из вершины \mathbf{j} на бесконечность по рёбрам решётки без пересечения с W . Эта линия разделяет плоскость на части так, что вершины \mathbf{x} и \mathbf{y} находятся в разных частях. Поэтому, они не могут быть вершинами одного и того же кластера W , так как любой путь по рёбрам решётки из вершины \mathbf{y} в вершину \mathbf{x} обязательно пересечёт указанную линию и такое пересечение возможно только в одной из вершин, входящих в состав этой линии.

Полученные в обоих из рассмотренных случаев противоречия показывают, что $S_{1,j} = 0$ при $j = 2, 3, 4$.

Рассмотрим вторую группу матричных элементов S_{23}, S_{24} . Построим линию на плоскости размещения решётки, составленную из пути, который приходит в вершину $\mathbf{2}$ из бесконечности без пересечения с кластером W (он должен существовать, так как вершина $\mathbf{2}$ принадлежит ∂W), последовательного прохождения диагоналей, определяемых парами вершин $\mathbf{2}, \mathbf{0}$ и $\mathbf{0}, \mathbf{j}$, где $j = 3, 4$ на грани решётки, представленной на рис.3, и затем пути из вершины \mathbf{j} на бесконечность. Эта линия разделяет плоскость на две части и кластер W должен располагаться полностью в одной из них.

Очевидно, что $S_{23} = 0$, так как кластер W не может располагаться справа от построенной линии согласно принятому на ней направлению, так как в противном случае вершина $\mathbf{0}$ не имеет смежных с ней вершин из W . С другой стороны, кластер W не может находится слева от этой линии, так как в этом случае путь из вершины $\mathbf{0}$, уходящий на бесконечность без пересечения с W , который должен существовать согласно определению вершины из внешней границы, будет также находиться в левой части плоскости. Тогда, этот путь разделяет левую часть плоскости снова на две части. Кластер W должен полностью располагаться в одной из частей, и поэтому одна из вершин $\mathbf{2}$ или \mathbf{j} не может принадлежать внешней границе, так как ей не будет соответствовать никакая смежная с ней вершина из W . Полученное противоречие доказывает равенство $S_{24} = 0$. ■

Т е о р е м а 4. Матрица \mathcal{S} представляется формулой

$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & G & G^+ \\ G^+ & \mathbf{0} & G \\ G & G^+ & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где посредством $\mathbf{0}$ обозначена нулевая матрица и матрица.

□ Так как из лемм 5 и 8 следует $S_{3,4} = S_{3,2} = S_{2,3} = 0$, то в силу леммы 4, матрица F в формуле (11) является нулевой.

На основании свойства $S_{1,j} = S_{1,14-j}$ и лемм 7 и 8, находим

$$S_{1,12} = S_{1,2} = 0; \quad S_{1,11} = S_{1,3} = 0; \quad S_{1,10} = S_{1,4} = 0; \quad S_{1,9} = S_{1,5} = 0.$$

Тогда, первая строка в матрице G^+ в формуле (11) и, следовательно, первый столбец в матрице G – нулевые. Остальные элементы матрицы G равны 1, так как на основании указанного выше критерия для определения единичных значений матричных элементов имеем $S_{ij} = 1$ при $i = 1 \div 4, j = 6, 7, 8$ см. рис.4-7. ■

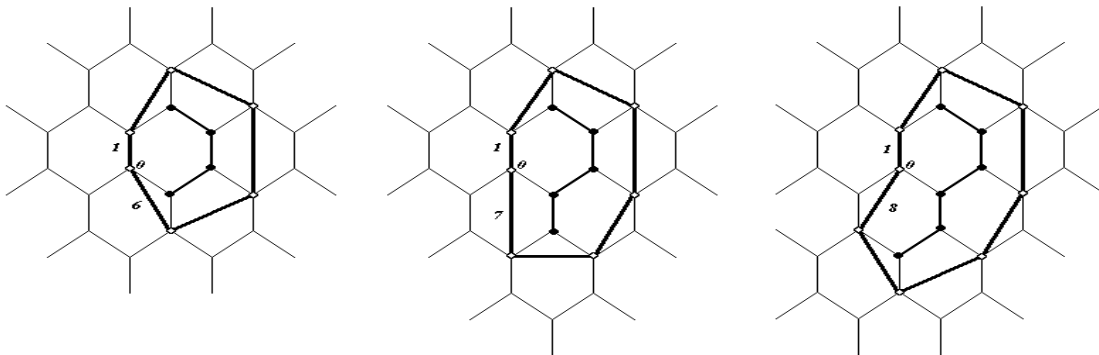


Рис. 4: Кластеры, содержащие ребро $1-0$.

З а м е ч а н и е. Из вида матрицы \mathcal{S} следует, что $n_* = 7$.

На основании Теоремы II Приложения, положив в ней $n = 3, m = 4, A = \mathcal{S}, A^{(1)} = \mathbf{0}, A^{(2)} = G, A^{(3)} = G^+$, заключаем, что максимальное собственное число λ_0 матрицы \mathcal{S} совпадает с максимальным собственным числом матрицы

$$B = \mathbf{0} + G + G^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

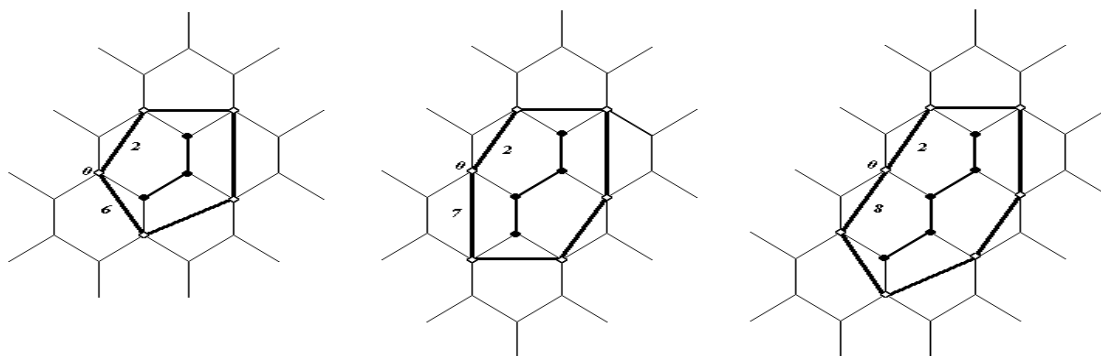


Рис. 5: Кластеры, содержащие ребро 2-0.

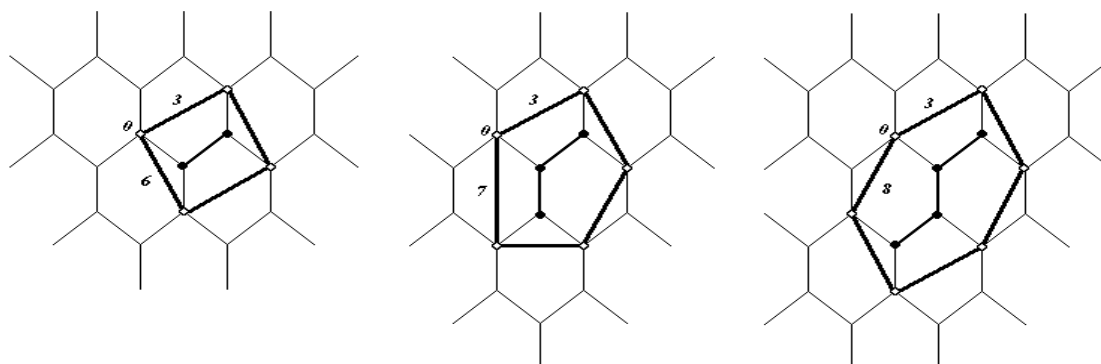


Рис. 6: Кластеры, содержащие ребро 3-0.

Ранг этой матрицы, очевидно, равен двум. Тогда она имеет два нулевых собственных числа. Поэтому, её характеристическое уравнение имеет вид

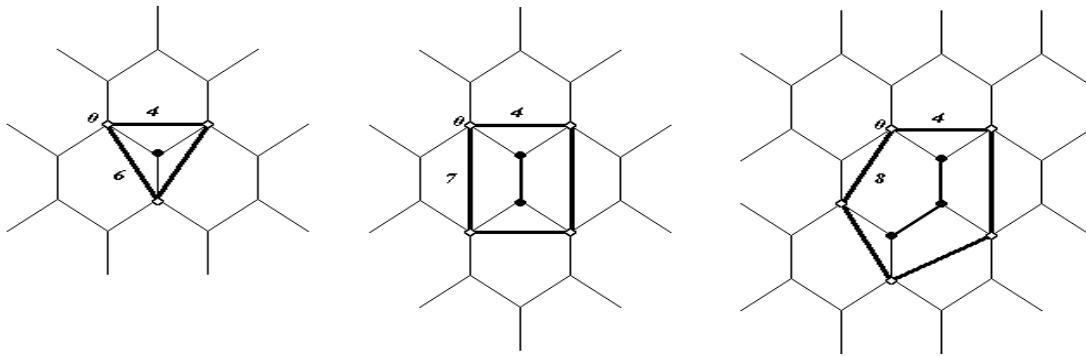
$$\det(B - \lambda \mathbf{1}) = (\lambda^2 - \lambda \xi_1 + \xi_2) \lambda^2 = 0,$$

где $\xi_1 = \text{Sp } B$, $\xi_2 = [\text{Sp } B^2 - (\text{Sp } B)^2]/2$. Поэтому $\xi_1 = \text{Sp } B = 6$, и так как диагональные элементы матрицы B^2 равны $(B^2)_{ii} = 3, 13, 13, 13$, то $\xi_2 = 3$. Следовательно число λ_0 является наибольшим корнем квадратного уравнения $\lambda^2 - 6\lambda - 3 = 0$. Откуда получаем $\lambda_0 = 3 + 2\sqrt{3}$. Таким образом, мы доказали следующее утверждение.

Т е о р е м а 5. Максимальное собственное число λ_0 матрицы S равно $3 + 2\sqrt{3} \approx 6,46$.

Из теоремы 5 и следствия из теоремы 3, непосредственно, следует

Основное утверждение. Порог перколяции c_* для бернуллиевского поля на гексагональной решётке не превосходит числа $2(1 - \sqrt{3}/3)$.

Рис. 7: Кластеры, содержащие ребро $4-0$.

Литература

1. Вирченко Ю.П. Перколяция // Энциклопедия Математическая физика. – Москва: Российская энциклопедия. – 1998. – С.346-347.
2. Yu.P.Virchenko, Tolmacheva Yu.A. Revision of the upper estimate of percolation threshold in square lattice // Matematicheskaya fizika, analiz, geometriya. – 2003. – 10. – 1. – P.29-39.
3. Kesten H., Percolation Theory for Mathematicians / H.Kesten. – Boston: Birkhäuser, 1982. – 420p. (пер. на рус. яз. Кестен Х. Теория просачивания для математиков. – М. Мир, 1986ю – 390с.)
4. Virchenko Yu.P., Tolmacheva Yu.A. Method of Sequential Approximative Estimates in Descrete Percolation Theory // Studies in Mathematical Physics Research. ed. Charles V. Benton. – New York: Nova Science Publishers, 2004. – P.155-175.
5. Вирченко Ю.П., Толмачёва Ю.А. Мажорантные оценки порога перколяции бернуллиевского поля на квадратной решётке // Украинский математический журнал. – 2005. – 57. – 10. – С.1315-1326.
6. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц / Ф.Р.Гантмахер - М.: Наука. – 1966.
7. М.В. Меньшиков, Молчанов С.А., Сидоренко А.Ф. Теория перколяции и некоторые приложения // Итоги науки и техники. сер.теор. вер., мат. стат. и теор.кибер. – Москва: ВИНТИ,1986. – 24. – С.53-110.

Приложение

Л е м м а I. Пусть B – $m \times m$ -матрица с неотрицательными элементами, для которой существует число $\mu > 0$ и вектор с неотрицательными компонентами $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{b} = \langle b_1, \dots, b_m \rangle$ такие, что имеет место неравенство

$$\mu b_k \leq \sum_{l=1}^m B_{kl} b_l, \quad k = 1 \div m. \quad (\text{П1})$$

Тогда максимальное по модулю собственное число $\lambda(B)$ матрицы B положительно и удовлетворяет неравенству $\lambda(B) \geq \mu$.

□ Применим неравенство (П1) N раз. Индукцией по N получаем

$$\mu^N b_k \leq \sum_{l=1}^m (B^N)_{kl} b_l. \quad (\text{П2})$$

Докажем сначала неравенство (П1) в случае, когда матрица B , заведомо, имеет только одномерные собственные подпространства. Пусть $\mathbf{c}^{(r)} = \langle c_k^{(r)}; k = 1 \div m \rangle$, $r = 1 \div m$ – собственные векторы матрицы B с собственными числами λ_r . Будем считать, что λ_r упорядочены в порядке убывания модулей чисел λ_r (при совпадении модулей, они упорядочиваются по величине фазы). Разложим вектор

$$\mathbf{b} = \sum_{r=1}^m \xi_r \mathbf{c}^{(r)}, \quad \xi_r \in \mathbb{C}, r = 1 \div m.$$

Тогда

$$B^N \mathbf{b} = \sum_{r=1}^m \xi_r \lambda_r^N \mathbf{c}^{(r)},$$

и поэтому неравенство (П2) представляется в виде

$$\mu^N b_k \leq \sum_{r=1}^m \xi_r \lambda_r^N c_k^{(r)}. \quad (\text{П3})$$

Найдётся номер $k \leq m$ такой, что $b_k > 0$. Рассмотрим неравенство (П3) для этого номера. Среди всех $r = 1 \div m$ найдётся минимальный номер r_0 такой, что $\xi_{r_0} c_k^{(r_0)} \neq 0$. Тогда неравенство (П3) переписывается в виде

$$\mu^N b_k \leq \sum_{r=r_0}^m \xi_r \lambda_r^N c_k^{(r)},$$

либо, извлекая корень N -й степени из обеих положительных частей неравенства,

$$\mu b_k^{1/N} \leq \lambda_{r_0} \left[\sum_{r=r_0}^m \xi_r (\lambda_r / \lambda_{r_0})^N \mathbf{c}_k^{(r)} \right]^{1/N} = |\lambda_{r_0}| \left| \sum_{r=r_0}^m \xi_r (\lambda_r / \lambda_{r_0})^N \mathbf{c}_k^{(r)} \right|^{1/N}.$$

Последнее равенство возникает в связи с тем, что правая часть (ПЗ) должна быть положительной. Перейдём к верхнему пределу $N \rightarrow \infty$. При этом $\lim_{N \rightarrow \infty} b_k^{1/N} = 1$. Ввиду ограниченности суммируемого выражения в правой части неравенства, её верхний предел не превосходит единицы. Тогда $\mu \leq |\lambda_{r_0}|$. По определению, в силу теоремы Фробениуса, $|\lambda_{r_0}| \leq \lambda(B)$.

Посредством добавления к матрице B , некоторой матрицы с неотрицательными элементами, сколь угодно близкой к нулевой матрице в топологии пространства \mathbb{R}^{m^2} , можно изменить её таким образом что все её собственные подпространства станут одномерными. Это следует из того, что условие кратности решений характеристического уравнения $\det(B - \lambda \mathbf{1}) = 0$ для собственных чисел, которое выражается с помощью дополнительного уравнения $\frac{d}{d\lambda} \det(B - \lambda \mathbf{1}) = 0$, вырезает некоторое дифференцируемое многообразие ко-размерности единица в пространстве \mathbb{R}^{m^2} допустимых матриц B . При таком добавлении малой матрицы, матрица B перейдёт в матрицу B_ϵ такую, что $B_\epsilon \rightarrow B$ при $\epsilon \rightarrow +0$.

В общем случае, неравенство (П1) доказывается следующим образом. Пусть \mathbf{b} – собственный вектор матрицы B , соответствующий собственному числу $\lambda(B)$. Так как $(B_\epsilon)_{kl} \geq B_{kl}$ при $k, l = 1 \div m$, то

$$\lambda(B)b_k = \sum_{l=1}^m B_{kl}b_l \leq \sum_{l=1}^m (B_\epsilon)_{kl} b_l.$$

Следовательно, для неё имеет место (П1), и при этом она имеет только одномерные собственные подпространства. Поэтому $\mu \leq \lambda(B_\epsilon)$. После этого, переходим к пределу $\epsilon \rightarrow +0$. ■

Т е о р е м а I. Пусть $n \times n$ -матрица A с неотрицательными элементами составлена из m^2 блоков – прямоугольных матриц $B^{(k,l)}$, имеющих, соответственно, p_k строк и s_l столбцов, $k, l = 1 \div m$, $m \leq n$, $p_1 + p_2 + \dots + p_m = n$,

$$s_1 + s_2 + \dots + s_m = n,$$

$$A = \begin{pmatrix} B^{(1,1)} & B^{(1,2)} & \dots & B^{(1,m)} \\ B^{(2,1)} & B^{(2,2)} & \dots & B^{(2,m)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B^{(m,1)} & B^{(m,2)} & \dots & B^{(m,m)} \end{pmatrix}. \tag{П4}$$

Определим матричные элементы квадратной $m \times m$ -матрицы B формулой

$$B_{kl} = \max \left\{ \sum_{j=1}^{s_l} B_{ij}^{(k,l)}; i = 1 \div p_k \right\}.$$

Тогда, максимальные по модулю собственные числа $\lambda(A)$ и $\lambda(B)$, соответственно, матриц A и B положительны и удовлетворяют неравенству $\lambda(B) \geq \lambda(A)$.

□ Матрица B также как и матрица A обладает неотрицательными элементами. Согласно теореме Фробениуса [6], максимальные по модулю собственные числа матриц A и B положительны. Согласно этой же теореме, у матриц B и A существуют собственные векторы с неотрицательными компонентами, соответствующие этим собственным числам. Обозначим их $\mathbf{b} = \langle b_1, \dots, b_m \rangle$, $b_j \geq 0$, $j = 1 \div m$; $\mathbf{a} = \langle a_1, \dots, a_n \rangle$, $a_i \geq 0$, $i = 1 \div n$. Тогда

$$\sum_{j=1}^n A_{ij}a_j = \lambda(A)a_i, \quad \sum_{l=1}^m B_{jl}b_l = \lambda(B)b_j.$$

Введём вектор $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} = \langle c_1, \dots, c_m \rangle$ с компонентами $c_k = \max\{a_i; s_1 + \dots + s_{k-1} < i \leq s_1 + \dots + s_k\}$, $k = 1 \div m$. Разбиением суммирования по $k = 1 \div m$ в обеих частях первого равенства введём повторное суммирование: первое – по группам из s_1, \dots, s_m номеров, а второе – внутри каждой из этих групп. В результате, получим

$$\sum_{j=1}^n A_{ij}a_j = \sum_{l=1}^m \sum_{j=s_1+\dots+s_{l-1}+1}^{s_1+\dots+s_l} A_{ij}a_j \leq \sum_{l=1}^m c_l \sum_{j=s_1+\dots+s_{l-1}+1}^{s_1+\dots+s_l} A_{i,j+s_1+\dots+s_{l-1}}.$$

Производя замену $i \Rightarrow p_1 + \dots + p_{k-1} + i$, $i = 1 \div p_k$, последнее неравенство перепишем в виде

$$\lambda(A)a_{i+p_1+\dots+p_{k-1}} = \sum_{j=1}^n A_{i+p_1+\dots+p_{k-1},j}a_j \leq$$

$$\leq \sum_{l=1}^m c_l \sum_{j=s_1+\dots+s_{l-1}+1}^{s_1+\dots+s_l} A_{i+p_1+\dots+p_k, j+s_1+\dots+s_{l-1}} = \sum_{l=1}^m c_l \sum_{j=1}^{s_l} B_{ij}^{(k,l)}.$$

Вычисляя максимум по $i = 1 \div p_k$ от обеих частей неравенства, получим

$$\lambda(A)c_k \leq \sum_{l=1}^m \left(\max_{i=1 \div p_k} \left\{ \sum_{j=1}^{s_l} B_{ij}^{(k,l)} \right\} \right) c_l = \sum_{l=1}^m B_{kl} c_l. \quad (\text{П5})$$

Неравенство (П5) совпадает с (П1), если положить $\mu = \lambda(A)$ и заменить \mathbf{b} на \mathbf{c} . Тогда, из утверждения леммы I следует утверждение теоремы. ■

Т е о р е м а II. Пусть $\langle A^{(1)}, \dots, A^{(n)} \rangle$ – упорядоченный набор $m \times m$ -матриц с неотрицательными элементами. Пусть, далее, $nm \times nm$ -матрица A составлена из $m \times m$ -матриц $B^{(k,l)}$

$$A = \begin{pmatrix} B^{(1,1)} & B^{(1,2)} & \dots & B^{(1,n)} \\ B^{(2,1)} & B^{(2,2)} & \dots & B^{(2,n)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B^{(n,1)} & B^{(n,2)} & \dots & B^{(n,n)} \end{pmatrix}, \quad (\text{П6})$$

где каждый из упорядоченных наборов $\langle B^{(i,1)}, \dots, B^{(i,n)} \rangle$, $i = 1, \dots, n$ получается некоторой зависящей от номера строки в (П6) перестановкой \mathbf{P} набора $\langle A^{(1)}, \dots, A^{(n)} \rangle$ из группы \mathbb{P}_n перестановок чисел $\langle 1, 2, \dots, n \rangle$. Тогда максимальное собственное число матрицы A совпадает с максимальным собственным числом $n \times n$ -матрицы $B = A^{(1)} + \dots + A^{(n)}$.

□ Матрица A имеет неотрицательные элементы. Поэтому, согласно теореме Фробениуса, её максимальное по модулю собственное число $\lambda(A)$ положительно. Этому собственному числу соответствует собственный вектор $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{nm}$, $\mathbf{a} = \langle a_1, \dots, a_{nm} \rangle$, $a_i \geq 0$, $i = 1 \div nm$, $A\mathbf{a} = \lambda(A)\mathbf{a}$, что означает

$$\sum_{j=1}^{nm} A_{ij} a_j = \lambda(A) a_i, \quad i = 1 \div nm. \quad (\text{П7})$$

Определим вектор $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} = \langle c_1, \dots, c_m \rangle$, $c_j \geq 0$, $j = 1 \div m$, где

$$c_j = \max\{a_{j+sm}; s = 0, \dots, n-1\}, \quad j = 1 \div m.$$

Тогда, заменяя $i = k + pm$, $j = l + sm$, $s, p = 0, 1, \dots, n-1$ в равенстве (П7) находим, что имеет место неравенство

$$\lambda(A)a_{k+pm} = \sum_{s=0}^{n-1} \sum_{l=1}^m A_{k+pm, l+sm} a_{l+sm} \leq \sum_{l=1}^m \left(\sum_{s=0}^{n-1} A_{k+pm, l+sm} \right) c_l.$$

Беря максимум от обеих частей неравенства по $p = 0, 1, \dots, n - 1$, получим

$$\lambda(A)c_k \leq \sum_{l=1}^m B_{kl}c_l,$$

где

$$B_{kl} = \max \left\{ \sum_{s=0}^{n-1} A_{k+pm, l+sm}; p = 0, 1, \dots, n - 1 \right\}$$

– матричные элементы матрицы $B = A^{(1)} + \dots + A^{(n)}$. Эта формула следует из равенства

$$\sum_{s=0}^{n-1} A_{k+pm, l+sm} = \sum_{s=0}^{n-1} \left(A^{(P(s+1))} \right)_{kl},$$

где перестановка $P \in \mathbb{P}_n$ определяется числом p , задающим номер строки в блочной матрице (П6). Сделав замену переменной суммирования $P(s+1) \Rightarrow s$, находим, что последнее выражение равно

$$\sum_{s=0}^{n-1} \left(A^{(P(s+1))} \right)_{kl} = \sum_{s=1}^n A_{kl}^{(s)} = B_{kl},$$

и сумма в (П4) не зависит от p .

Применяя утверждение Теоремы I к матрице A , в результате, получим неравенство $\lambda(B) \geq \lambda(A)$. С другой стороны, возьмём собственный вектор \mathbf{b} матрицы B с неотрицательными компонентами, соответствующий собственному числу $\lambda(B)$. Определим вектор $\mathbf{c}' = \underbrace{\langle \mathbf{b}, \mathbf{b}, \dots, \mathbf{b} \rangle}_n$. Для этого вектора имеем

$$A\mathbf{c}' = \langle B\mathbf{b}, B\mathbf{b}, \dots, B\mathbf{b} \rangle = \lambda(B)\mathbf{c}',$$

то есть $\lambda(B)$ – собственное число матрицы A с собственным вектором \mathbf{c}' . Согласно определению числа $\lambda(A)$, имеем $\lambda(A) \geq \lambda(B)$. Из двух полученных неравенств следует, что $\lambda(A) = \lambda(B)$. ■

CLUSTER DECOMPOSITION OF PERCOLATION PROBABILITY ON THE HEXAGONAL LATTICE

E.S.Antonova, Yu.P.Virchenko

Belgorod State University,

Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: antonova_e_s@mail.ru

The upper estimate of the percolation threshold of the Bernoulli random field on the hexagonal lattice is found. It is done on the basis of the cluster decomposition. Each term of the decomposition is estimated using the number estimate of cycles on the hexagonal lattice which may be external borders of every possible finite clusters containing the fixed lattice vertex.

Key words: percolation probability, hexagonal lattice, finite cluster, external border, cluster decomposition, percolation threshold.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ДИФФУЗИОННОЙ ЗОНЫ ПРИ ОДНОВРЕМЕННОМ ПОВЕРХНОСТНОМ И ВНУТРЕННЕМ ОКИСЛЕНИИ СПЛАВОВ

Г.С. Абрамов, М.Г. Абрамов

Херсонский национальный технический университет,
Бериславское шоссе, Херсон, Украина.

Рассмотрены механизмы влияния зоны внутреннего окисления на фазовый состав окалины в процессе её роста и проведено количественное описание процесса взаимодействия поверхностного слоя с двухфазным подслоем. Рассмотрена кинетика одновременного роста слоя окалины и зоны внутреннего окисления.

Ключевые слова: внутреннее окисление, поверхностный слой, кинетика роста окалины.

1. Постановка задачи. Одним из важных и практически неизученных вопросов реакционной диффузии является выяснение особенностей механизма и кинетики процесса роста однофазного (или состоящего из смеси фаз) поверхностного слоя и лежащего под ним двухфазного подслоя типа зоны внутреннего окисления. Двухфазный подслоя в диффузионной зоне может формироваться как непосредственно при насыщении, что имеет место, например, при высокотемпературном окислении на воздухе сплавов с относительно небольшим содержанием (менее 10% вес.) легирующих элементов [1-4], так и в результате предварительной обработки материала, что довольно широко используется в химико-термической обработке (цементация, азотирование, борирование), однако теоретически изучено недостаточно.

Как отмечается в литературе [1-4], наличие двухфазного подслоя, содержащего мелкодисперсные частицы соединений (окислов, карбидов, нитридов), играет положительную роль, которая в основном проявляется в значительном увеличении адгезии поверхностного слоя, упрочнении приграничной к слою области сплава и, в случае высокотемпературного окисления, понижения скорости роста окалины [5].

Одновременно с ростом поверхностного слоя происходит и изменение структуры двухфазного подслоя в соответствии с закономерностями процессов типа внутреннего окисления [6-9]. Кроме того, следует ожидать, что рост слоя и двухфазного подслоя происходит не независимым образом: с одной стороны, частицы в диффузионной зоне влияют на фазовый состав слоя, с другой - наличие слоя изменяет структуру (распределение частиц, их число, средний

размер и суммарный объем) подслоя. В конечном итоге именно этим процессом и могут определяться эксплуатационные свойства материала.

Целью настоящей работы является теоретическое рассмотрение на примере высокотемпературного окисления бинарных сплавов различных случаев взаимодействия между окисной пленкой на поверхности (слой) и зоной внутреннего окисления (двухфазный подслой).

2. Построение и анализ теоретической модели. Взаимодействие между слоем окалины и зоной внутреннего окисления может происходить путем следующих основных механизмов:

1. Растворение дисперсных частиц в зоне внутреннего окисления перед внутренней границей окалины и последующее выделение окисла легирующего элемента на этой границе (механизм перерастворения частиц).

2. Захват дисперсных частиц окисла легирующего элемента движущейся внутренней границей окалины.

Механизм перерастворения частиц имеет ту же физическую природу, что и коалесценция, когда дисперсные частицы окисла легирующего элемента радиуса R являются неустойчивыми по отношению к внутренней поверхности окалины, для которой радиус кривизны является бесконечным. Для того, чтобы выяснить при каких условиях реализуется механизм перерастворения, проведем оценочный расчет кинетики этого процесса.

На рис.1 схематически изображена структура диффузионной зоны бинарного сплава после высокотемпературного окисления, состоящая из поверхностного слоя окалины ($y_1(t)$ – внутренняя граница слоя), зоны внутреннего окисления, содержащей частицы окисла легирующего элемента, и твердого раствора. Граница $y_2(t)$ на рис.1 условно обозначает максимально удаленное от $y_1(t)$ сечение зоны внутреннего окисления, начиная с которого дисперсные частицы не испытывают влияния внутренней границы окалины.

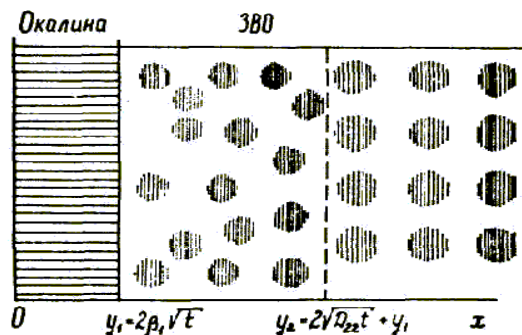


Рис.1. Схематическое изображение диффузионной зоны при одновременном внешнем и внутреннем окислении.

Можно предположить, что положение этой границы соответствует характерному расстоянию диффузии легирующего элемента:

$$y_2(t) = 2\sqrt{D_{22}t}, \quad (1)$$

где D_{22} – коэффициент диффузии легирующего элемента в твёрдом растворе. Используя (1), определим время начала растворения частиц в данном сечении зоны внутреннего окисления x_1 :

$$t_{\text{н.р.}} = \frac{x_1^2}{4D_{22}}. \quad (2)$$

Время t_p , необходимое для растворения частиц в сечении x_1 можно найти из выражения для скорости роста (растворения) частиц со средним размером \bar{R} при $\bar{R} \ll R_K$

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\alpha}{R^2} \left(\frac{\bar{R}}{R_K} - 1 \right) \approx -\frac{\alpha}{R^2}.$$

Откуда

$$t_p = \frac{\bar{R}_0^3}{3\alpha} + t_{\text{н.р.}}, \quad (3)$$

где $\bar{R}_0 = \bar{R}(t_{\text{н.р.}})$ – средний размер частиц к началу их растворения.

Теперь определим время t_d достижения внутренней границей окалина $y_1(t)$ сечения x_1 зоны внутреннего окисления. При параболическом законе её движения

$$y_1 = 2\beta_1\sqrt{t}$$

это время равняется

$$t_d = \frac{x_1^2}{4\beta_1^2}. \quad (4)$$

Тогда имеем очевидное условие полного растворения частиц в сечении x_1 :

$$t_d \geq t_p, \quad (5)$$

то есть время достижения слоем x_1 должно быть больше (или равно) времени растворения частиц.

Подставляя в (5) выражения (2)-(4), имеем

$$\frac{\sqrt{D_{22}}}{\beta_1^2} \cdot \frac{\left(\sqrt{D_{22}} - 2\beta_1\right)}{\left(\sqrt{D_{22}} + \beta_1\right)^2} \geq \frac{4}{3\alpha} \cdot \frac{\bar{R}_0^3}{x_1^2}.$$

Следовательно критическое сечение $x_{кр.}$, начиная с которого реализуется механизм перерастворения, определится следующим образом

$$x_{кр.} = \left[\frac{V_0 \beta_1^2 \left(\sqrt{D_{22}} + \beta_1 \right)^2}{\pi \alpha \left(\sqrt{D_{22}} - 2\beta_1 \right) \sqrt{D_{22}}} \right]^{1/2}, \quad (6)$$

где

$$V_0 = \frac{4}{3} \pi R_0^3.$$

Частицы, находящиеся в сечениях зоны внутреннего окисления с координатами меньшими, чем $x_{кр.}$, не успевают полностью раствориться и будут захвачены слоем.

Анализ формулы (6) показывает, что $x_{кр.}$ уменьшается с понижением скорости роста внутренней границы окалины, увеличением коэффициента диффузии легирующего элемента D_{22} и параметра α , характеризующего скорость растворения частиц. Поскольку

$$\alpha = \frac{2\sigma M_H D_{22} C_2^P}{\rho R_\Gamma T \omega_2 C_2^\Phi},$$

то $x_{кр.}$ будет уменьшаться с ростом коэффициента поверхностного натяжения σ на границе частица-твёрдый раствор, то есть с уменьшением стабильности окисла легирующего элемента.

Значения коэффициентов, входящих в (6), могут изменяться в достаточно широких пределах:

$$V_0 = 10^{-15} \div 10^{-21} \text{ см}; \quad \beta_1^2 = 10^{-10} \div 10^{-12} \text{ см}^2/;$$

$$D_{22} = 10^{-9} \div 10^{-11} \text{ см}^2/; \quad \alpha = 10^{-18} \div 10^{-22} \text{ см}^3/.$$

Соответственно и $x_{кр.}$ меняется от 10^{-6} см до бесконечности (при $D_{22} = \beta_1^2$ или $\alpha \approx 0$).

При значениях $x_{кр.} = 10^{-6}$ см механизм перерастворения реализуется практически мгновенно ($t_{н.р.} \approx 10$ с), а при $x_{кр.} \rightarrow \infty$ не имеет места вообще. В частности, в слой окалины будут захватываться только частицы ($x_{кр.} \rightarrow \infty$), когда окисел легирующего элемента является высокостабильным и поток легирующего элемента в твёрдом растворе зоны внутреннего окисления близок к нулю.

Перейдем теперь к количественному описанию процесса взаимодействия поверхностного слоя с двухфазным подслоем. Рассмотрим случай, когда поверхностный слой, состоящий из смеси соединений насыщающего компонента

соответственно с металлом-растворителем и легирующим элементом, растет за счет продвижения внутренней его границы (цементация, борирование, азотирование и т.п.). Для теоретического описания кинетики такого процесса сделаем следующие допущения:

- диффузия насыщающего компонента и легирующего элемента в образованном ими соединении пренебрежимо мала;
- легирующий элемент не входит в состав соединения металла-растворителя;
- формирующееся в момент прохождения внутренней границей слоя данного сечения соотношение между фазами в дальнейшем сохраняется.

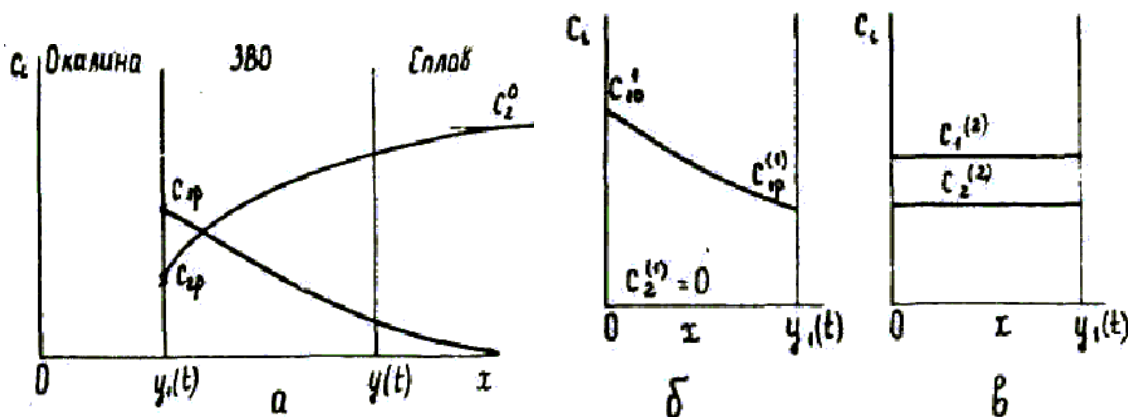


Рис.2. Распределение концентраций кислорода (C_1) и легирующего элемента (C_2) в слое и подслое при движении внутренней границы окалины $y_1(t)$: а) в твердом растворе; б) в окисле металла-растворителя (окалина); в) в окисле легирующего элемента (окалина).

В рамках сделанных упрощений система уравнений, описывающих кинетику формирования слоя и подслоя (рис.2), имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_1^{(1)}}{\partial t} = D_1 \frac{\partial}{\partial x} [1 - V_{2c}(x)] \frac{\partial C_1^{(1)}}{\partial x}, \quad x \leq y; \quad (7)$$

$$C_1^{(1)}(0, t) = C_{10}^{(1)}, \quad C_1^{(1)}(y_1, t) = C_{1p}^{(1)},$$

$$\frac{\partial C_{1c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{11} \frac{\partial C_1}{\partial x} + D_{12} \frac{\partial C_2}{\partial x} \right) (1 - V_2),$$

$$\frac{\partial C_{2c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{21} \frac{\partial C_1}{\partial x} + D_{22} \frac{\partial C_2}{\partial x} \right) (1 - V_2), \quad y_1 \leq x \leq y; \quad (8)$$

$$C_1(y_1, t) = C_{1p}, \quad C_2(y, t) = C_{2p},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_1}{\partial t} &= D_{11} \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + D_{12} \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} &= D_{21} \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + D_{22} \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2}, \quad x > y;\end{aligned}\quad (9)$$

$$C_1(\infty, t) = 0, \quad C_2(\infty, t) = C_2^0,$$

$$[C_{1c}^c(y_1) - C_{1c}(y_1)] \frac{dy_1}{dt} = J_1|_{x=y_1-0} - J_1|_{x=y_1+0}, \quad (10)$$

$$[C_{2c}^c(y_1) - C_{2c}(y_1)] \frac{dy_1}{dt} = - J_2|_{x=y_1+0},$$

$$J_1|_{x=y-0} = J_1|_{x=y+0}, \quad (11)$$

$$J_2|_{x=y-0} = J_1|_{x=y+0}.$$

Здесь y_1 – координата границы слой-подслой; y – координата границы подслоя-твердый раствор; $C_1^{(1)}(x, t)$ – концентрация насыщающего компонента в соединении металла-растворителя; $C_1(x, t)$ – концентрация насыщающего компонента в твёрдом растворе

$$C_{ic} = C_i + (C_i^{(2)} - C_i) V_2, \quad i = 1, 2$$

$$C_{1c}^c = C_1^{(1)} + (C_1^{(2)} - C_1^{(1)}) V_{2c},$$

$$C_{2c}^c = C_2^{(2)} V_{2c},$$

$C_2^{(2)}$ – концентрация легирующего элемента в его соединении с насыщающим компонентом; V_{2c} – объем соединения легирующего элемента в слое; V_2 – объем соединения легирующего элемента в подслое.

Из решения уравнений (7) – (9) определяются распределения концентраций насыщающего компонента в соединении металла-растворителя в слое $C_1^{(1)}(x, t)$, его концентрации и концентрации легирующего элемента $C_2(x, t)$ в твёрдом растворе. С помощью уравнений массового баланса (11) и соответствующего уравнения линии растворимости находится закон движения границы между подслоем и твердым раствором $y(t)$, а также значения равновесных концентраций компонентов на этой границе. Наконец, равновесные

концентрации компонентов на границе слой-подслой $C_{1p}^{(1)}$; C_{1p} ; $C_{2p}^{(1)}$; C_{2p} определяются из условий равновесия между соединениями металла-растворителя, легирующего элемента и твёрдого раствора (или с помощью соответствующего изотермического разреза диаграммы состояния), закон движения границы $y(t)$ и объем соединения легирующего элемента в слое на этой границе V_{2c} – из (10), а объем этого соединения в подслое V_2 – с помощью решения уравнения непрерывности для функции распределения частиц по размерам

$$\frac{\partial f}{\partial t_1} + \frac{\partial(fv_R)}{\partial R} = \mu(R, t_1),$$

где

$$\mu(R, t) = N_0 \exp(-K \cdot R_K^2) \cdot \delta(R - R_K). \quad (12)$$

Численное решение системы (7) – (12) проводилось при различных значениях параметра N_0 в (12), характеризующего скорость зарождения частиц, и $K = D_{22}(C_2^0 - C_2^1)$, определяющего скорость подвода атомов легирующего элемента к границе слой-подслой. Кроме того, были рассмотрены случаи "малой" и "большой" скорости движения границы слоя $y(t)$. Здесь следует отметить, что во всех вариантах закон скорости роста слоя оказался близок к параболическому: $y = \beta\sqrt{t}$. Результаты расчета представлены на рис.3,4,5.

На рис. 3 сопоставлены случаи, различающиеся скоростями роста поверхностного слоя при одинаковых (больших) значениях N_0 и K . Из рис.3а видно, что перед фронтом медленно растущего слоя дисперсные частицы соединения легирующего элемента в подслое практически отсутствуют; распределения числа этих частиц $N(x)$, среднего радиуса $\bar{R}(x)$ и объема $V_2(x)$ имеют максимум, что свидетельствует о растворении дисперсных частиц перед растущим слоем. При этом происходит значительное обогащение соединением легирующего элемента слоя ($V_{2c} \gg V_2$ и $V_{2c} \rightarrow 1$), таким образом, в данной ситуации реализуется механизм перерастворения частиц.

При достаточно большой скорости роста слоя (рис.3б) перед его движущимся фронтом растворяются наиболее мелкие дисперсные частицы в подслое: распределение $N(x)$ имеет максимум, а наибольшее значение \bar{R} имеют частицы на границе слой-подслой. Объем соединения легирующего элемента в слое V_{2c} значительно меньше, чем в случае, представленном на рис.3а, однако намного превышает его объем в подслое ($V_{2c} \gg V_2$). Последнее также объясняется перерастворением частиц, которое, как видно, имеет место даже при достаточно большой скорости роста слоя в случае значительных скоростей зарождения (большое N_0) и подвода легирующего элемента к слою (большое K).

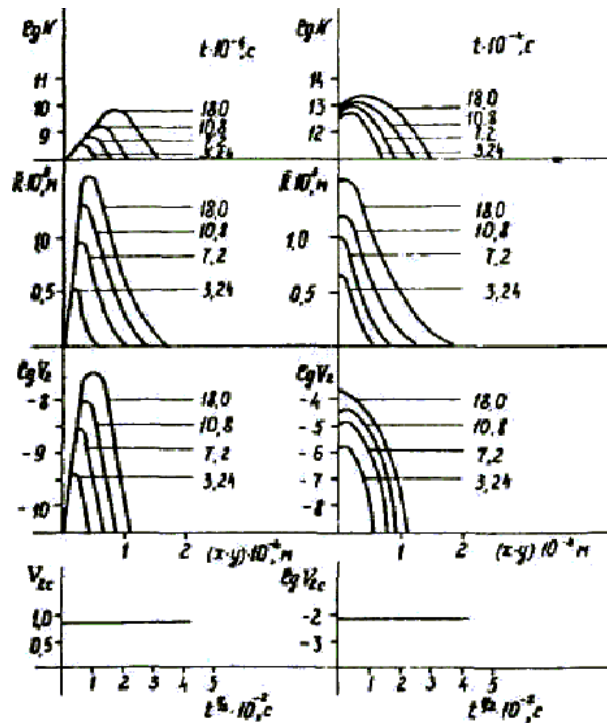


Рис.3. Кривые распределения числа частиц $N(x)$, среднего размера \bar{R} и суммарного объема частиц окисла легирующего элемента V_2 в зоне внутреннего окисления и кинетика изменения содержания окисла легирующего элемента V_{2c} в окалине при больших значениях N_0 и K и разных скоростях роста слоя: а) $\beta = 1,2 \cdot 10^{-7} \text{см}^2/\text{с}$; б) $\beta = 1,2 \cdot 10^{-5} \text{см}^2/\text{с}$.

Графики, приведенные на рис.4, построены для малой и большой скорости зарождения частиц в подслое N_0 . Остальные параметры системы (7 – 12) подобраны таким образом, чтобы был реализован случай больших скоростей роста слоя и подвода легирующего элемента. Из рис.4 видно, что в обоих вариантах характер зависимостей $N(x)$, \bar{R} , $V(x)$ качественно не отличается. Число частиц $N(x)$, естественно, выше при больших N_0 (рис.4а), но средний радиус дисперсных частиц \bar{R} практически одинаков в обоих случаях. Аналогично и объем соединения легирующего элемента в слое V_{2c} не изменяется при переходе от одного случая к другому. Отсюда следует, что при больших K и β средний радиус частиц в двухфазном подслое и фазовый состав слоя определяется скоростью диффузионного подвода легирующего элемента к растущему слою и не зависит от условий зарождения частиц в подслое.

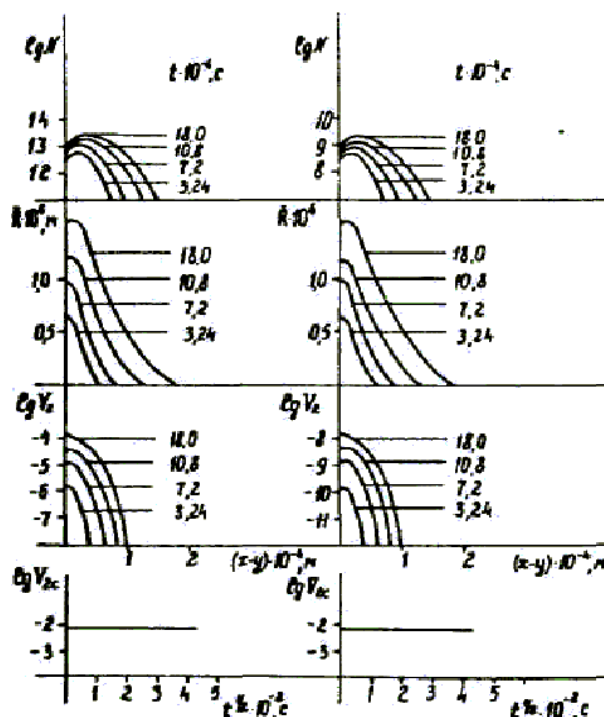


Рис.4. Кривые распределения числа частиц $N(x)$, среднего размера $\bar{R}(x)$ и суммарного объема частиц окисла легирующего элемента V_2 в зоне внутреннего окисления и кинетика изменения содержания окисла легирующего элемента V_{2c} в окалине при большой и малой скорости зарождения: а) $N_0 = 10^{16} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$; б) $N_0 = 10^{12} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$.

Наконец, на рис.5 показаны результаты расчета для случаев малой (рис.5а) и большой (рис.5б) скорости подвода легирующего элемента к слою. При малых K не происходит растворения частиц в подслое у фронта слоя (наибольшее значение $N(x)$; $V_2(x)$; $R(x)$ соответствует координате $x = y$). В силу этого, при малых K число частиц в подслое N больше, а их средний радиус \bar{R} меньше; объем V_{2c} , начиная с определенного времени (в рассматриваемом случае ~ 25 ч.) перестает быть постоянным и увеличивается со временем, что связано с реализацией механизма захвата частиц растущим слоем.

3. Выводы. Полученные результаты показывают, что механизм захвата имеет место при большой скорости роста слоя и малой скорости подвода легирующего элемента к этой границе, а механизм перерастворения, наоборот, при малой скорости роста и большой скорости подвода, то есть анализ, проведенный выше качественно верен.

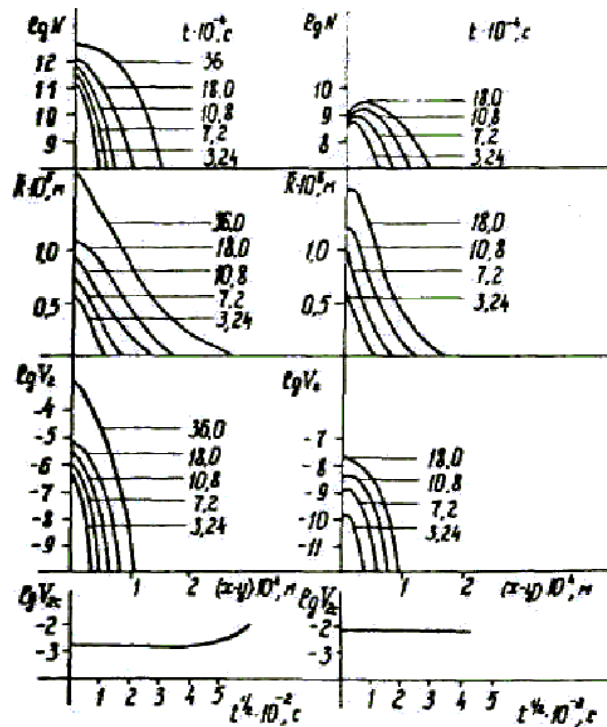


Рис.5. Кривые распределения числа частиц $N(x)$, среднего размера $\bar{R}(x)$ и суммарного объема частиц окисла легирующего элемента V_2 в зоне внутреннего окисления и кинетика изменения содержания легирующего элемента V_{2c} в окалине при большой и малой скорости подвода легирующего элемента: а) $K = 10^{-14} \text{ см}^2/\text{с}$; $C_2^{(1)} = 0,5$; $C_1^{(2)} = 0$; $D_{11} = 2 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$; $D_{22} = 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$; б) $K = 10^{-12} \text{ см}^2/\text{с}$; $C_2^{(1)} = 0,6$; $C_2^{(2)} = 0,4$; $D_{12} = -10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$.

Следует подчеркнуть, что при перерастворении частиц может происходить заметное изменение фазового состава слоя, но при этом и сильно изменяется структура двухфазного подслоя; при захвате – структура подслоя практически не меняется, но при этом нет значительного обогащения слоя соединением легирующего элемента. Этот момент может быть существенен для практики: например, при высокотемпературном окислении очевидно важно, чтобы с одной стороны, окалина была обогащена высокостабильным окислом легирующего элемента, а с другой – структура зоны внутреннего окисления сохранялась мелкодисперсной. В такой ситуации трудно ожидать, что в сплавах с каким-то преимущественным механизмом взаимодействия между окалиной и зоной внутреннего окисления могут быть реализованы одновременно высокие жаростойкие и жаропрочные свойства. Исключение здесь, видимо, составляют сплавы, при внутреннем окислении которых реализуется случай Вагнера при $V_2 \gg C_2^0$. Во всех других случаях требуется предварительный анализ с целью оценки возможных высокотемпературных эксплуатационных свойств данного сплава.

Литература

1. Кипарисов С.С. Внутреннее окисление и азотирование сплавов / С.С.Кипарисов, Б.В.Левинский. – М.: Металлургия, 1979. – 200с.
2. Данелия Е.П. Внутреннеокисленные сплавы / Е.П. Данелия, В.М.Розенберг. – М.: Металлургия, 1978. – 232с.
3. Rapp R.A. Kinetics, microstructures and mechanism of internal oxidation // Corrosion. – 1965. – 21;12. – P.382-400.
4. Meijering J.L. Internal oxidation in alloys // Advances in material research. – 1971. – 5;1. – P.1-81.
5. Whittle D.P., Stringer J. Improvement in high temperature oxidation, resistance by additions of reactive elements or oxide dispersions // Philosoph. Trans.A. – 1980. – 295. – P.309-328.
6. Абрамов Г.С. Особенности кинетики роста дисперсных частиц в сплавах при больших временах внутреннего окисления // Вестник ХНТУ. – 2001. – 3(12). – С.7-11.
7. Абрамов Г.С., Абрамов М.Г. Закономерности асимптотической стадии процесса внутреннего окисления бинарных сплавов // Вестник ХНТУ. – 2002. – 1(14). – С.91-94.
8. Абрамов Г.С., Абрамов М.Г. Влияние степени пересыщения на кинетику роста окисных частиц и структуру поверхностно-окисленного слоя металлов // Вестник ХНТУ. – 2002. – 2(15). – С.13-16.
9. Абрамов Г.С. Моделирование кинетики роста дисперсных частиц на асимптотической стадии процесса внутреннего окисления // Вестник ХНТУ. – 2005. – 2(22). – С.9-13.

MODELING OF THE STRUCTURE FORMATION OF DIFFUSION ZONES AT SIMULTANEOUS SUPERFICIAL AND INTERNAL OXIDATION OF ALLOYS

G.S. Abramov, M.G. Abramov

Kherson national technical university,
Berislavsskoe shosse, Kherson, Ukraine.

Mechanisms of the internal oxidation zone influence on the phase composition of slag which are realized during the process of slag growth are considered. Quantitative description of the superficial layer interaction with the diphasic sublayer is done. The kinetics of simultaneous growth both the slag layer and the internal oxidation zone is analyzed.

Key words: internal oxidation, superficial layer, kinetics of slag growth.

ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЙ ИСТОЧНИК РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ МОЗАИЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ И ЕГО ПРАКТИЧЕСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ

Д.А. Бакланов, И.Е. Внуков, Ю.В. Жандармов, Зыонг Тхи Жанг,
С.А.Лактионова, Р.А. Шатохин

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

Анализируются перспективы создания источника рентгеновского излучения с перестраиваемой энергией на основе электронного ускорителя средних энергий и ориентированных кристаллов. Показано, что мозаичные кристаллы за счет вклада дифракции реальных фотонов тормозного излучения обеспечивают больший выход жёсткого излучения, по сравнению с совершенными. Установлено, что однокристалльная схема генерации излучения не применима для использования в медицинских целях из-за фона тормозного излучения в месте расположения объекта облучения. Обсуждаются достоинства и недостатки двухкристалльной схемы, в которой один из кристаллов установлен непосредственно на пучке электронов для генерации излучения, а другой используется для его монохроматизации и параллельного переноса. Предложена методика отбора кристаллов с необходимыми характеристиками по соотношению вкладов параметрического рентгеновского излучения и дифрагированного тормозного излучения в выход регистрируемого излучения.

Ключевые слова: параметрическое рентгеновское излучение, мозаичность, выход излучения, дифрагированное тормозное излучения, структура кристалла.

1. Введение

В течении последних двадцати лет активно изучаются механизмы генерации рентгеновского излучения, возникающего при взаимодействии быстрых заряженных частиц с периодическими структурами (см., например, [1]). Интерес к таким исследованиям обусловлен поиском новых источников рентгеновского излучения с перестраиваемой длиной волны, альтернативных накопителям. Одним из таких механизмов является параметрическое рентгеновское излучение (ПРИ) быстрых электронов в кристаллах. Преимуществами ПРИ перед другими источниками, основанными на использовании излучения быстрых частиц в веществе, является возможность варьирования энергии фотонов изменением ориентации кристалла или положения объекта облучения

и меньшие дозовые нагрузки, поскольку ПРИ испускается под большими углами к направлению электронного пучка.

В первом приближении ПРИ может рассматриваться как когерентное рассеяние собственного электромагнитного поля частицы на электронных оболочках периодически расположенных атомов кристалла [2,3]. Предполагается, что наиболее перспективным является использование этого типа излучения в медицинских целях, где востребованы малогабаритные источники жёсткого квазимонохроматического рентгеновского излучения ($\omega \geq 20$ кэВ, $\Delta\omega/\omega \leq 5\%$) [4] для целей просвечивающей рентгенографии и ангиографии по краю полосы фотопоглощения [5-7] и ряда других приложений.

Измерения характеристик ПРИ, проведенные для почти всех известных кристаллов с совершенной структурой: алмаз, кремний, германий, вольфрам, кварц, фторид лития (см. [1,8,9] и цитируемую там литературу), показали, что выход излучения слабо зависит от кристалла и недостаточен для практической реализации источника, основанного на этом механизме излучения. Способы увеличения выхода излучения, предложенные в последнее время (см. например, [6,10,11] и цитируемую там литературу), так же не нашли практического применения. Использование в качестве мишеней рентгеновских зеркал [10] и многослойных кристаллических мишеней [6], в которых основным механизмом получения регистрируемого излучения является дифракция фотонов переходного излучения, требует энергии электронов $E_e \geq 500$ МэВ, что сопоставимо с накопителями и поэтому экономически не целесообразно. Многократное прохождение электронов через рентгеновское зеркало или тонкую кристаллическую мишень в циклическом ускорителе [11] сопровождается накоплением угла многократного рассеяния и потерей частиц на стенках ускорительной камеры. Выход излучения, зарегистрированный в таких измерениях, сопоставим с получаемым для обычных толщин мишеней в экспериментах по генерации ПРИ ($\sim 0.3 - 1$ мм).

В работах [12,13] обращено внимание, что использование идеальных мозаичных кристаллов позволяет существенно увеличить выход излучения за счёт вклада дифрагированных фотонов тормозного (ДТИ) или переходного излучений (ДПИ), в зависимости от условий эксперимента. В цитируемых работах вклад ДТИ (ДПИ) в выход регистрируемого излучения в несколько раз превышал вклад собственно ПРИ и хорошо описывался теорией дифракции рентгеновского излучения в мозаичных кристаллах [14]. Согласие результатов измерений для мозаичных кристаллов пиролитического графита [12] и алмаза [13] с расчётом позволяет сопоставить совершенные и мозаичные

кристаллы с точки зрения их использования для генерации жёсткого рентгеновского излучения и оценить возможные преимущества и недостатки.

2. Оценка выхода излучения

Как отмечено выше, мозаичные кристаллы способны обеспечить большую интенсивность квазимонохроматического излучения за счет дополнительного вклада механизма ДТИ, чем совершенные кристаллы. Однако, поскольку и для этих кристаллов выход ПРИ остается значительным, необходим учёт вклада и этого механизма в наблюдаемые характеристики излучения. Как показано в ряде экспериментальных работ (см., например, [15] и цитированную там литературу), кинематическая теория ПРИ описывает результаты измерений для энергий электронов от нескольких МэВ до единиц ГэВ и совершенных кристаллов с погрешностью не хуже 10-15%. Поэтому для расчета выхода ПРИ использовалась формула спектрально-углового распределения, полученная в кинематическом приближении в работе [16],

$$\frac{d^2N}{dZd\Omega} = \frac{\alpha\omega^3|\chi_{\vec{g}}|^2}{2\pi\epsilon_0^{3/2}\beta(1-\epsilon_0^{1/2}\vec{\beta}\vec{n})} \sum_{\nu} \left[\frac{(\omega\vec{\beta} - \vec{g})\vec{e}_{\vec{k}\nu}}{(\vec{k}_{\perp} + \vec{g}_{\perp})^2 + \frac{\omega^2}{\beta^2}\{\gamma^{-2} + \beta^2(1 - \epsilon_0)\}} \right]^2. \quad (1)$$

Здесь и далее используется система единиц $\hbar = m_e = c = 1$. В этой формуле $\epsilon_0 = 1 - \omega_p^2/\omega^2$, где ω_p - плазменная частота среды, $\vec{\beta} = \beta\vec{n}_0$ - вектор скорости электрона, \vec{n}_0, \vec{n} - единичные векторы в направлении налетающего электрона и излученного фотона (с энергией ω и импульсом \vec{k}), \vec{g} - вектор обратной решетки, $\vec{e}_{\vec{k}\nu}$ - поляризационные векторы, $\vec{e}_{\vec{k}1} = \frac{[\vec{n}, \vec{n}_0]}{[|\vec{n}, \vec{n}_0|]}$, $\vec{e}_{\vec{k}2} = [\vec{e}_{\vec{k}1}, \vec{n}]$, \perp - индекс, обозначающий проекции векторов на плоскость, перпендикулярную к \vec{n}_0 . Остальные обозначения являются общепринятыми. Через $|\chi_{\vec{g}}|^2$ обозначена величина

$$|\chi_{\vec{g}}|^2 = |S(\vec{g})|^2 \left[-\frac{\omega_p^2 f(\vec{g})}{\omega^2 z} \right]^2 \exp(-2W). \quad (2)$$

В формуле (2) $|S(\vec{g})|^2$ - структурный фактор, $\exp(-2W)$ - фактор Дебая-Уоллера, $f(\vec{g})$ - Фурье-компонента пространственного распределения электронов в атоме кристалла, ($f(0) = z$, где z - число электронов в атоме), рассчитываемая в соответствии с результатами [17].

Зависимость спектрально-углового распределения ПРИ от угла между направлением движения электрона и плоскостью кристалла учитывалась в со-

ответствии с методикой, предложенной в работе [18]. Расходимость электронного пучка внутри кристалла и поглощение фотонов ПРИ учитывались по методике, описанной в [12,19].

Как показано в [20] полная интенсивность ПРИ практически не зависит от мозаичности кристалла. В условиях коллимации излучения наличие мозаичности приводит к уширению ориентационных зависимостей и угловых распределений ПРИ, а при сопоставимости характерного угла вылета $\Theta_{ph} = \sqrt{\gamma^{-2} + \omega_p^2/\omega^2}$ фотонов ПРИ и характерного угла мозаичности σ_m , уменьшает выход излучения за счёт переотражения фотонов ПРИ [19,21]. Мозаичность кристаллов учитывалась путем расчета спектра для разных блоков мозаики с учетом их распределения в мишени. Более подробно влияние мозаичности на характеристики регистрируемого излучения будет проанализировано ниже.

Известно (смотри [14] и цитируемую там литературу), что по степени совершенства кристаллы можно классифицировать по двум факторам: размерам правильных блоков или участков в кристалле, и степени их взаимной разориентации. В соответствии с первым фактором все кристаллы можно разделить на два класса а и б. В кристаллах класса а отдельные участки достаточно велики для того, чтобы проявилось заметное влияние эффекта первичной экстинкции, то есть их линейный размер сопоставим с длиной первичной экстинкции. В кристаллах класса б размер правильных блоков мал, поэтому эффект первичной экстинкции практически не наблюдается. В соответствии со вторым фактором кристаллы также можно разделить на два класса – α и β . В кристаллах класса α блоки почти параллельны друг другу, их взаимная разориентация мала, поэтому вклад эффекта вторичной экстинкции велик. В кристаллах класса β блоки распределены нерегулярно, поэтому вклад эффекта вторичной экстинкции мал.

Комбинируя эти факторы можно условно классифицировать кристаллы по степени совершенства на четыре группы от $a\alpha$ до $b\beta$. Пределом класса $a\alpha$, когда возможная разориентация микроблоков меньше области полного отражения рентгеновских лучей («столика» Дарвина), является идеальный совершенный кристалл, а класса $b\beta$ – идеальный мозаичный кристалл. Следует отметить, что принадлежность к этим классам не является раз и навсегда заданной, поскольку это зависит от длины экстинкции, которая, в свою очередь, зависит от порядка отражения и энергии фотонов [14]. То есть для разных порядков отражения или значимо отличающихся энергий фотонов один и тот же образец может относиться к разным классам.

Известно, что отражающая способность рентгеновского излучения кристаллами непосредственным образом связана с совершенством их структуры. Кристаллы класса $a\alpha$ обеспечивают наименее узкую кривую качания (FWHM ~ 20 -30 угловых секунд), хорошо описываемую динамической теорией дифракции рентгеновских лучей в совершенных кристаллах. По этой причине их интегральная отражающая способность невелика. Кристаллы с нарушенной структурой обладают большей интегральной отражающей способностью. Максимальной отражающей способностью и наиболее широкой кривой качания обладают мозаичные кристаллы класса $b\beta$ или, как их иногда называют, идеальные мозаичные кристаллы. Их отражающая способность, так же как и кристаллов класса $b\alpha$, хорошо описывается теорией дифракции рентгеновских лучей в мозаичных кристаллах, однако для кристаллов класса $b\alpha$ необходимо учитывать вторичную экстинкцию, которая уменьшает интегральную отражающую способность.

Кристаллы класса $a\alpha$ иногда можно представить в виде набора кристаллитов, то есть совершенных кристаллов малых размеров, каждый из которых отражает рентгеновское излучение в соответствии с динамической теорией дифракции. Отражающая способность такого кристалла как целого близка к отражающей способности совершенного кристалла с такими же размерами, если размеры кристаллита больше длины поглощения излучения. В противном случае, отражающая способность такого кристалла больше, чем у совершенного, поскольку излучение может отразиться от кристаллитов, расположенных глубже по ходу пучка [14]. Здесь необходимо подчеркнуть, что только в идеальном совершенном и идеальном мозаичном кристаллах интегральная отражающая способность хорошо описывается соответствующими теориями для любых энергий фотонов и порядков отражения. В остальных случаях необходимо учитывать размеры блоков и их распределение по углам разориентации относительно основного направления, что, как правило, неизвестно.

Характерные параметры описанной выше классификации кристаллов - ширина «столика» Дарвина $\Delta\Theta$ и длина первичной экстинкции l_{ex} зависят от порядка отражения и энергии фотонов [14]. Для неполяризованного излучения и отсутствия поглощения можно записать [14]

$$\Delta\Theta = 2 \cdot \gamma \Delta\theta_0, \quad (3)$$

где $\Delta\theta_0 = 2 \cdot \delta / \sin 2\Theta$ - поправка к углу Брэгга Θ из-за преломления волны в кристалле, $\delta = (\omega_p/\omega)^2/2$ - отличие показателя преломления от 1, $\gamma =$

$\frac{F(\vec{g})}{2F(0)}(1 + \cos(2\Theta))$, а $F(\vec{g}) = S(\vec{g})f(\vec{g})$ – структурный множитель.

В качестве оценки длины первичной экстинкции, можно использовать выражение

$$l_{ex} = d/(2\bar{\xi} \sin \Theta), \quad (4)$$

где $\exp(-2\bar{\xi})$ – ослабление интенсивности первичной волны при пролете через одну плоскость

$$2\bar{\xi} = \frac{\pi d^2 N F(\vec{g})}{n} \frac{e^2}{mc^2}. \quad (5)$$

Здесь N – концентрация рассеивающих центров, d – межплоскостное расстояние, n – порядок отражения.

При использовании кристаллов для генерации интенсивных пучков рентгеновского излучения на него падает или в нём рождается расходящийся фотонный пучок с непрерывным спектром, часть фотонов которого затем отражается и регистрируется детектором с фиксированным угловым расположением. В такой постановке эксперимента несовершенство структуры приводит к уширению спектра детектируемого излучения и увеличению его интенсивности. То есть для кристалла класса а α регистрируемое излучение наименее интенсивно, а ширина спектра и ориентационной зависимости (ОЗ), в основном, определяется углом коллимации излучения. Для кристалла класса b β интенсивность излучения максимальна, а ширина ориентационной зависимости и спектра излучения определяются, в основном, мозаичностью кристалла [19].

Основным достоинством мозаичных кристаллов является дополнительный вклад в регистрируемый спектр дифрагированных реальных фотонов. Для электронов средних энергий ($E_e \leq 100$ МэВ) основным источником фотонов является тормозное излучение. Для релятивистских электронов и мягких фотонов ($\omega \ll E_e$) спектрально-угловое распределение интенсивности тормозного излучения (ТИ) на единицу длины пути в аморфном веществе при отсутствии эффекта плотности Тер-Микаэляна [22], то есть при выполнении условия $\omega \gg \gamma\omega_p$, может быть представлено в виде [23]

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{\gamma^2}{\pi L} \frac{1 + \gamma^4 \theta^4}{(1 + \gamma^2 \theta^2)^4}, \quad (6)$$

где L – радиационная длина, а θ – угол вылета фотона.

В анализируемом случае на кристалл падает или в нем рождается расходящийся фотонный пучок с непрерывным спектром. Для отражения мононаправленного и моноэнергетического фотонного пучка от элемента мозаичного

кристалла объемом ΔV можно записать [14]

$$\int P(\theta) d\theta = Q\Delta V, \quad (7)$$

где $P(\theta)$ – отражающая способность кристаллического элемента под углом θ , пропорциональная распределению блоков мозаичности в кристалле [24]. Правая часть $Q\Delta V$ есть интегральное отражение от элемента ΔV , где величина Q – интегральная отражающая способность, зависит от параметров кристалла и энергии излучения следующим образом

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{N^2\lambda^3}{\sin(2\Theta)} |F_p| |F(\vec{g})|^2 \cdot \exp(-2W), \quad (8)$$

λ – длина волны, $S|(\vec{g})|^2$, $\exp(-2W)$ и $F(\vec{g})$ – те же самые величины, что и выше, $|F_p|$ – поляризационный множитель. Если вектор поляризации излучения перпендикулярен плоскости дифракции, то $|F_p| = 1$, в противоположном случае, $|F_p| = \cos^2 2\Theta$. Для неполяризованного пучка $|F_p| = (1 + \cos^2 2\Theta)/2$.

Пусть в мозаичном кристалле с распределением векторов обратной решетки $P(\vec{g})$ распространяется излучение со спектрально-угловым распределением $I(\omega, \vec{n})$, где ω и \vec{n} соответственно энергия и единичный вектор, направленный вдоль импульса фотона. Здесь $\vec{g} = |\vec{g}|\vec{\alpha}$, где $\vec{\alpha}$ – единичный вектор, описывающий отклонение микроблоков кристалла от среднего направления $\vec{g}_0 = \langle \vec{g} \rangle$. Вектор \vec{g}_0 перпендикулярен плоскости кристалла и развернут относительно оси z на угол $\pi/2 - \Theta_B$. Плоскость дифракции определяется векторами \vec{n}_0 и \vec{g} .

Исходя из закона Брэгга для фотона с энергией ω и направлением \vec{n} можно записать требование на направление вектора \vec{g} микроблока, на котором это фотон может дифрагировать,

$$\omega = \frac{\vec{g}\vec{n}}{\sqrt{\varepsilon_0}(1 - \vec{n}'\vec{n})} = \frac{|\vec{g}| \sin \Theta}{\sqrt{\varepsilon_0}(1 - \cos 2\Theta)}, \quad (9)$$

где \vec{n}' – вектор, описывающий направление движения дифрагированного фотона. Отсюда следует, что угол между направлениями векторов \vec{n} и \vec{g} должен удовлетворять условию

$$\sin \Theta = \frac{|\vec{g}|}{2\omega\sqrt{\varepsilon_0}}. \quad (10)$$

В мозаичном кристалле этому условию соответствует целый набор блоков мозаики удовлетворяющих уравнению

$$\sin \Theta = \frac{(\vec{g}\vec{n})}{|\vec{g}|} = \frac{[n_x g_x + n_y g_y + n_z g_z]}{|\vec{g}|}. \quad (11)$$

Из этого уравнения можно определить блоки мозаики, на которых этот фотон может дифрагировать, а затем определить направление вылета отраженного фотона \vec{n}' . Тогда плотность вероятности отражения фотона с фиксированными ω и \vec{n} в блоке мозаичного кристалла толщиной Δt вдоль направления движения фотона можно записать в виде

$$f(\omega, \vec{n}) = q(\omega, \vec{n})Q(\omega)\Delta t, \quad (12)$$

где $q(\omega, \vec{n})$ – коэффициент, учитывающий мозаичность кристалла,

$$q(\omega, \vec{n}) = \int P_m(\alpha_x(\omega, \vec{n}, \alpha_y), \alpha_y) d\alpha_y. \quad (13)$$

Здесь $P_m(\alpha_x, \alpha_y)$ – распределение мозаичности кристалла выражаемое через $\omega, \vec{n}, \alpha_y$ в соответствии с выражениями (8)-(10).

Для расчета выхода дифрагированных фотонов в апертуру коллиматора для каждого порядка отражения i спектрально-угловое распределение интенсивности излучения с учётом многократного рассеяния электронов в мишени $\frac{d^2 I(\omega, \vec{n})_{\text{ТИ}}^*}{d\omega d\Omega}$ свертывалось с плотностью вероятности дифракции по всем переменным, включая энергию, углы вылета фотонов θ_x и θ_y и толщину кристалла

$$Y_i = \int_{\Delta\omega_i} d\omega \int_T dt \iint_{\Delta\Omega} \frac{d^2 I(\omega, \vec{n})_{\text{ТИ}}^*}{d\omega d\Omega} S(\omega, \vec{n}, \vec{n}', t) Q(\omega) q(\omega, \vec{n}) d\theta_x d\theta_y, \quad (14)$$

где $S(\omega, \vec{n}, \vec{n}', t)$ – коэффициент, учитывающий поглощение излучения в материале мишени и геометрию эксперимента, T – толщина кристалла, $\Delta\Omega$ – угловой аксептанс, а $\Delta\omega_i$ – энергетический захват детектора для i -того порядка отражения, зависящий от угла коллимации и углового распределения излучения.

Согласно кинематической теории ПРИ для строго брэгговского направления интенсивность излучения равна нулю [2,3,15]. Поэтому в совершенных кристаллах дифракция фотонов ПРИ обычно не рассматривается. В мозаичных кристаллах для фотона, испущенного в одном из блоков мозаики, могут выполняться условия дифракции в другом блоке. Что бы учесть этот эффект для каждого фотона ПРИ с энергией ω и импульсом \vec{k} исходя из закона Брэгга в соответствии с (9)-(13) определялись блоки мозаики, на которых этот фотон может дифрагировать. Отсюда, учитывая распределение блоков мозаики и вероятность отражения, определялось ослабление пучка фотонов ПРИ на

пути от точки рождения до вылета из кристалла. Вторичная дифракция отраженных фотонов тормозного излучения на пути от области дифракции до вылета из кристалла рассчитывалась аналогичным образом. Более подробно методика расчёта выхода ДТИ в мозаичных кристаллах описана в [12,19].

3. Однокристалльная схема

На рис.1 приведена типичная схема для генерации и применения пучка ПРИ. Электронный пучок падает на кристалл, развернутый на угол $\Theta_B \approx \Theta_D/2$. Угол расположения детектора Θ_D выбирается так, чтобы в направлении детектора (объекта облучения) испускалось излучение с требуемой энергией. Варьирование энергии излучения осуществляется изменением угла расположения детектора и соответствующего поворота кристалла либо, при некоторой потере интенсивности, только при помощи поворота кристалла.

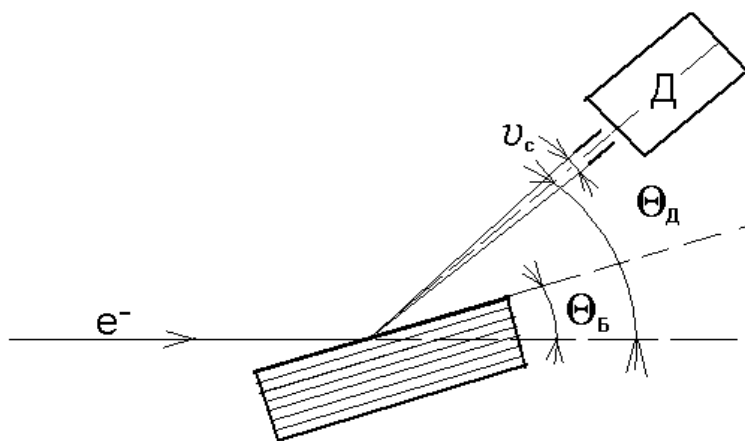


Рис. 1: Схема для генерации и применения пучка ПРИ.

Выход ПРИ пропорционален толщине кристалла, поэтому естественным способом повышения интенсивности излучения является увеличение толщины мишени. На рисунке 2 приведена расчетная зависимость выхода ПРИ для отражения (220) и $\Theta_B = \Theta_D/2$ от толщины кристалла кремния (кривая 1). Расчёт проведён для следующих условий: энергия электронов $E_e=45$ МэВ, расходимость электронного пучка $\vartheta_e=1.5$ мрад, объект облучения расположен под углом $\Theta_D=16.7^\circ$ ($\omega \sim 33$ кэВ). Круглый коллиматор диаметром 5 мм расположен на расстоянии 3 м от кристалла ($\vartheta_c = 0.85$ мрад).

Использование мозаичных кристаллов класса b позволяет получить существенно больший выход излучения за счёт вклада ДТИ [12,13]. На этом же рисунке приведена зависимость выхода ДТИ для мозаичного образца с σ_m

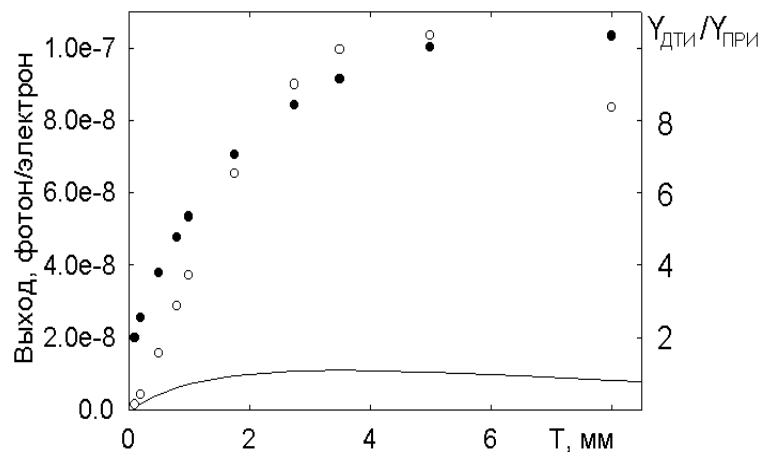


Рис. 2: Зависимость интенсивности ПРИ и ДТИ от толщины кристалла кремния. Кривая - ПРИ, \circ - ДТИ, \bullet - $Y_{\text{ДТИ}}/Y_{\text{ПРИ}}$.

$=1$ мрад и отношение выходов ДТИ и ПРИ. Из рисунка видно, что даже для $T=0.1$ мм выход ДТИ из мозаичного кристалла больше, чем выход ПРИ из совершенного. Поскольку выход ПРИ слабо зависит от мозаичности образца [20], а выход ДТИ из совершенного кристалла меньше выхода ПРИ [27], мозаичный кристалл практически всегда обеспечивает больший выход излучения, чем совершенный. Следует отметить, что при выполнении условия $\sigma_m < \vartheta_c$ спектр ДТИ уже спектра ПРИ [13], например, для $\sigma_m=0.6$ мрад и $T=3.5$ мм полная ширина спектра (на уровне 10% от максимума) $\Delta\omega_{\text{ДТИ}}=1.2$ кэВ меньше, чем для спектра ПРИ $\Delta\omega_{\text{ПРИ}}=1.95$ кэВ, а отношение интенсивностей ~ 8 .

Как видно из рисунка, максимум выхода ПРИ и ДТИ достигается для толщины кристалла порядка длины поглощения фотонов. Поэтому с уменьшением энергии фотонов преимущество мозаичных кристаллов перед совершенными падает. Например, для $E_e=45$ МэВ, кристалла кремния и энергии фотонов $\omega \approx 18$ кэВ отношение выходов ДТИ и ПРИ для мишени оптимальной толщины уменьшилось до ~ 4 [19].

Поиск или изготовление образцов для реализации преимущества мозаичных кристаллов представляет отдельную задачу, поэтому рассмотрим, какую интенсивность фотонного пучка можно получить при использовании распространенных и сравнительно дешевых кристаллов пиролитического графита, мозаичность которых согласно литературным данным варьируется в пределах $0.2^\circ - 0.5^\circ$. Недавно в работе [5] предложен проект установки для маммографии, использующей ПРИ электронов в таком кристалле, и показано, что

этот источник обладает рядом преимуществ перед традиционным на основе электронной пушки с молибденовым анодом.

На рис.3 приведены спектры для условий цитируемой работы: $E_e=35$ МэВ, угол коллимации излучения 1.24×80 мрад², толщина кристалла 10 мм. Угол расположения объекта облучения $\Theta_d = 2\Theta_B = 10.46^\circ$. Кривая 1 ($Y = 3.72 \cdot 10^{-6}$ фот./электр.) – спектр ПРИ, рассчитанный без учёта мозаичности кристалла. Именно такой спектр приведён и обсуждается в работе [5]. Кривая 2 ($Y = 4.70 \cdot 10^{-6}$ фот./электр.) рассчитана для $\sigma_m=4$ мрад и гауссовского распределения мозаичности, но без учёта дифракция фотонов ПРИ. С учетом этого эффекта $Y = 2.7 \cdot 10^{-6}$ фот./электр (кривая 3).

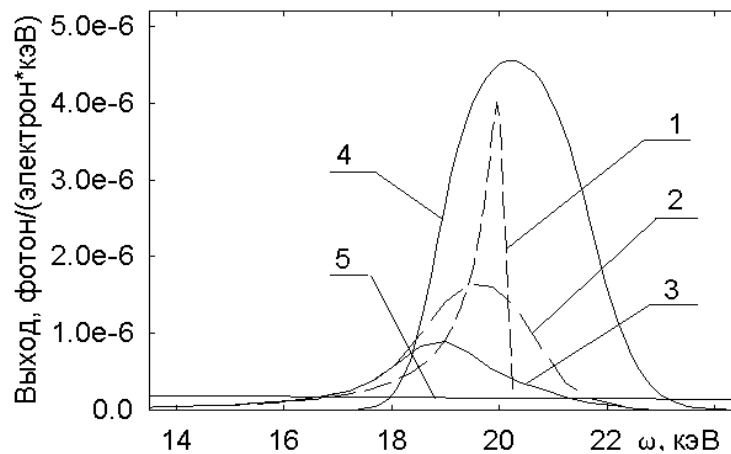


Рис. 3: Спектры излучения в мозаичном кристалле пиролитического графита с $\sigma_m=1$ мрад для условий работы [5]: $E_e=35$ МэВ, $\Delta\theta_x\Delta\theta_y=1.24 \times 80$ мрад², $T=10$ мм. Кривые: 1 - спектр ПРИ в совершенном кристалле; 2 - спектр ПРИ в мозаичном кристалле без учёта переотражения фотонов; 3 - спектр ПРИ с учётом переотражения; 4 - спектр ДТИ; 5 - спектр ТИ.

Из рисунка видно, что наличие мозаичности привело к уменьшению амплитуды в пике спектра и его сдвигу в область меньших значений ω , что обусловлено сильной зависимостью отражающей способности от энергии фотонов $\sim \omega^{-2}$ [14]. Этим же фактором обусловлен и больший выход ПРИ из мозаичного кристалла по сравнению с совершенным. Вторичная дифракция фотонов ПРИ уменьшает выход излучения почти в два раза и ещё больше смещает максимум в спектре, поскольку в направлении первичного пучка тормозного излучения наиболее сильно переотражаются фотоны с энергией, соответствующей максимуму в распределении блоков мозаики (см. зависимость 4).

Из приведённого на этом же рисунке спектра ДТИ (зависимость 4, $Y_{calc} = 1.32 \cdot 10^{-5}$ фот./электр.) видно, что, как и для мозаичного кристалла кремния,

выход ДТИ существенно превышает выход ПРИ и оценки полученные в цитируемой работе. Однако, ширина спектра ДТИ $\Delta\omega_{\text{дти}} \sim 2.86$ кэВ больше, чем спектра ПРИ $\Delta\omega_{\text{при}} \sim 2.25$ кэВ и, тем более, спектра ПРИ из совершенного (не существующего в природе) кристалла пиролитического графита $\Delta\omega_{\text{при}} \sim 0.6$ кэВ, что обусловлено большим значением σ_m по сравнению с углом коллимации излучения.

Основной проблемой, возникающей при использовании кристаллов оптимальной толщины для генерации излучения, является не ширина спектра, а большая величина фона тормозного излучения в месте расположения объекта облучения. По-видимому, это главная причина почему предложение авторов [5] осталось не реализованным. Из приведённого на рис. 3 спектра ТИ видно, что его вклад порядка 3% от амплитуды пика в спектре ДТИ.

Поскольку спектр ТИ тянется вплоть до конечной энергии электронов, число фотонов ТИ и ДТИ, попадающих на объект облучения при использовании кристаллов оптимальной толщины, как правило, оказываются сопоставимыми, а полная энергия на несколько порядков больше полной энергии полезного излучения. Например, для кристалла кремния толщиной 3.5 мм и условий рис. 2 $Y_{\text{дти}} \approx 9.4 \cdot 10^{-8}$ фот./электр., а $Y_{\text{ти}} \sim 7 \cdot 10^{-8}$ фот./электр., несмотря на то, что его уровень был меньше 1% от амплитуды в максимуме спектра ДТИ, а полная энергия ТИ $W_{\text{ти}} \sim 1 \cdot 10^{-4}$ кэВ/электрон почти на два порядка больше полной энергии полезного излучения $W_{\text{дти}} \approx 3.1 \cdot 10^{-6}$ кэВ/электрон. Для кристалла графита и условий [5] из-за большего фона ТИ соотношение полных энергий в несколько раз хуже.

Для подтверждения адекватности приведённых оценок можно сослаться на результаты эксперимента [28], где вклад фона ТИ в кристаллах фторида лития толщиной 5.8 мм и 1.55 мм был замечен даже для $E_e=57$ МэВ и углов наблюдения $\Theta_{\text{д}}=30^\circ$ и 60° . Ясно, что при использовании совершенных кристаллов оптимальной толщины и механизма ПРИ эти соотношения будут на порядок хуже. Соотношение доз от фонового и полезного излучения, определяемое протяжённостью и составом объекта облучения, будет несколько меньше соотношения полных энергий излучения и должно оцениваться отдельно.

4. Двухкристальная схема

Одним из решений проблемы высокого уровня фона в месте расположения объекта облучения может быть использование двухкристальной схемы. Недавно в работе [29] реализована система из двух совершенных кристал-

лов для генерации ПРИ в тонком кристалле и его последующей дифракции в другом, более толстом. Подобные схемы используются в двухкристальных монохроматорах ещё с тридцатых годов прошлого века [14]. Главное достоинство такой схемы – узкая ширина спектра приводит к низкой интенсивности излучения. При проведении исследований тонкой структуры поглощения рентгеновского излучения на этой установке типичное время экспозиции составляло десятки минут [29]. Если ширина спектра не является критичным параметром, например, для просвечивающей рентгенографии и ангиографии по краю полосы фотопоглощения, где $\Delta\omega/\omega \sim 2-3\%$ вполне допустимо, то использование мозаичных кристаллов вместо совершенных может увеличить выход излучения на несколько порядков [13].

На рис.4 приведена схема установки, реализующей этот метод. Как и в работе [29], электронный пучок падает на кристалл, установленный в гониометре и развернутый на угол Θ_B для получения требуемой энергии фотонного пучка, и сбрасывается в могильник. Рожденные в кристалле фотоны ДТИ и ПРИ проходят через коллиматор, расположенный под углом $\Theta_D = 2\Theta_B$ и вырезающий нужную область спектрально-углового распределения. Коллимированное излучение падает на второй кристалл, установленный в гониометре и развернутый на такой же угол (схема (n, -n) [14,30]), и отражается в направлении объекта облучения. Для изменения энергии фотонного пучка в соответствии с законом Брэгга меняется ориентация обоих кристаллов, положение коллиматора и второго кристалла, таким образом, чтобы трасса пучка дифрагированного излучения по-прежнему проходила через объект облучения. Одним из основных достоинств такой схемы является отсутствие необходимости перемещения объекта облучения при изменении энергии фотонов.

В зависимости от конкретной установки, реализующей предлагаемую схему, размеры второго кристалла могут быть выбраны такими, чтобы он перекрывал только требуемый телесный угол. В этом случае отсутствует необходимость в установке промежуточного коллиматора, что существенно упрощает реализацию метода. Для проведения измерений, требующих меньшей ширины спектра, например, исследований XAFS, мозаичные кристаллы могут быть заменены совершенными, и установлены в такой же геометрии, как и в [29].

Основным отличием от схемы [29], кроме установки мозаичных кристаллов вместо совершенных, является использование геометрии Лауэ вместо геометрии Брэгга. При использовании геометрии Брэгга для генерации жёсткого

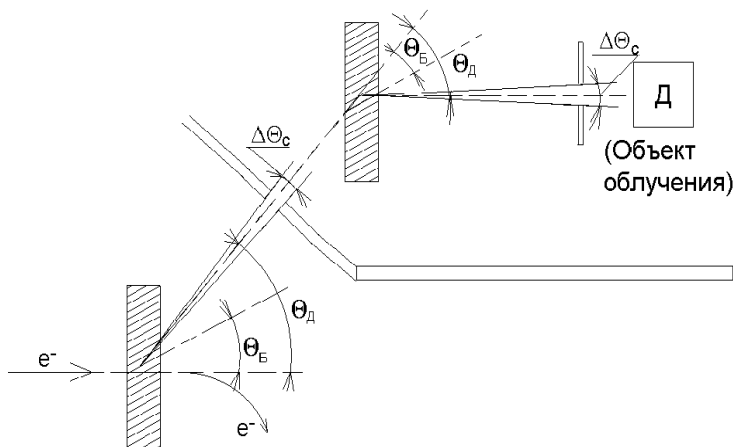


Рис. 4: Схема установки для реализации двухкристальной системы.

излучения ($\omega > 20$ кэВ, $\Theta_B \leq 10^\circ$) поперечный размер электронного пучка ($\Delta x \sim 2$ мм) приведёт к резкому увеличению продольного размера пучка излучения ($\Delta z = \Delta x / \text{tg } \Theta_B \sim 20$ мм) и, как следствие, к уширению спектра и уменьшению интенсивности излучения.

Результаты расчёта для идентичных кристаллов пиролитического графита толщиной 15 мм и мозаичностью $\sigma_m = 4$ мрад приведены на рис.5. Вторым кристаллом расположен под углом $\Theta_D = 6.4^\circ$ ($\omega \approx 33$ кэВ). Как и для меньших энергий фотонов (рис. 3) основной вклад в спектр после первого кристалла даёт ДТИ. Вклад ПРИ $Y_{\text{при}} = 1.68 \cdot 10^{-7}$ фот./электр. почти на порядок меньше вклада ДТИ $Y_{\text{дти}} = 1.54 \cdot 10^{-6}$ фот./электр., причём спектр ДТИ $\Delta\omega \approx 11$ кэВ уже спектра ПРИ $\Delta\omega \approx 16.2$ кэВ.

Как видно из рисунка, использование второго кристалла обеспечивает не только подавление фона ТИ, но и уменьшение ширины спектра излучения, попадающего на объект облучения. Уменьшение выхода излучения $Y = 2.38 \cdot 10^{-8}$ фот./электр. по сравнению с однокристалльной схемой обусловлено как сужением спектра, так и поглощением во втором кристалле. Тем не менее, с учетом дополнительного вклада дифрагированного во втором кристалле тормозного излучения (см. ниже) полученное значение выхода излучения почти в два раза больше, чем можно получить для этой же энергии фотонов и угла коллимации при помощи механизма ПРИ и совершенного кристалла кремния оптимальной толщины $Y = 1.57 \cdot 10^{-8}$ фот./электр. Причём ширина спектра $\Delta\omega_{\text{дти}} = 1$ кэВ в два раза меньше, чем для кремния $\Delta\omega_{\text{при}} = 1.95$ кэВ.

Основной недостаток однокристалльной схемы – большой фон тормозного излучения, при использовании двухкристалльной схемы приводит к дополни-

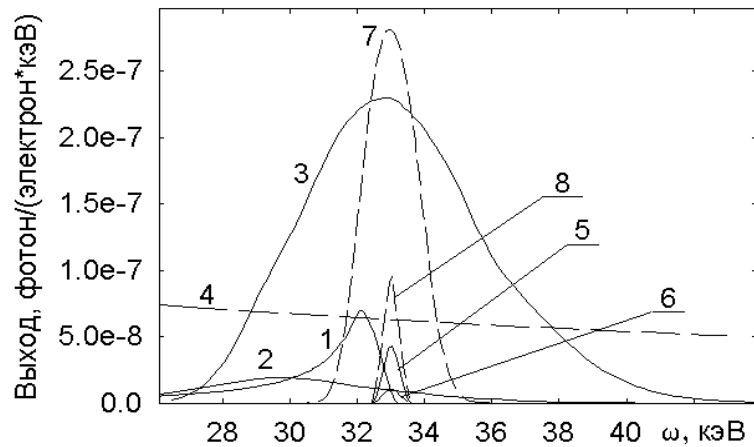


Рис. 5: Спектры излучения для мозаичных кристаллов пиролитического графита. $\sigma_m=4$ мрад, $E_e=45$ МэВ, $\Theta_D=6.4^\circ$, $\vartheta_c=1$ мрад, $T_1 = T_2=15$ мм. Кривые: 1 - спектр ПРИ в совершенном кристалле; 2 - спектр ПРИ в мозаичном кристалле; 3 - спектр ДТИ в мозаичном кристалле; 4 - спектр тормозного излучения на влёте во второй кристалл; 5 - спектр двукратно дифрагированного излучения; 6 - спектр дифрагированного тормозного излучения, попавшего на второй кристалл; 7 - спектр ДТИ в кристалле с $\sigma_m=1$ мрад и $T_1=5$ мм; 8 - спектр после второго кристалла с $\sigma_m=1$ мрад и $T_1=4$ мм.

тельному вкладу монохроматического излучения в месте расположения объекта облучения $Y = 0.55 \cdot 10^{-8}$ фот./электр. Фотоны ПРИ из первого кристалла так же могут дифрагировать во втором. Но из-за низкой интенсивности ПРИ в требуемой спектральной области вклад этого процесса в суммарный выход излучения не превышает долей процента.

Уменьшение интенсивности излучения, попадающего на облучаемый объект, как видно из рисунка теряется почти 80% фотонов с энергией $\omega=33$ кэВ, обусловлено большими значениями σ_m и толщин кристаллов. Уменьшение мозаичности до $\sigma_m=1$ мрад уменьшило оптимальные толщины до 5 мм и 4 мм для первого и второго кристаллов, соответственно, и увеличило выход излучения почти в два раза (см. кривые 7 и 8).

Для реализации достоинств мозаичных кристаллов при получении интенсивных пучков рентгеновского излучения необходимы образцы с малым z и $\sigma_m < 0.4-0.6$ мрад. Нижний предел σ_m и требуемые размеры микроблоков определяются границами применимости модели мозаичного кристалла класса b, а именно, $\sigma_m \gg \Delta\Theta$ и $l \ll l_{ex}$. Эти же кристаллы могут быть использованы и на пучках синхротронного излучения вместо кристаллов с асимметричной вырезкой или изогнутых кристаллов [31], когда нужна высокая интенсивность излучения и нет жестких требований на его монохроматичность. С точки зрения минимума поглощения весьма перспективными

представляются кристаллы нитрида и карбида бора. Следует отметить, что увеличение энергии электронов ведёт к квадратичному росту выхода ДТИ из-за сужения конуса тормозного излучения и ослабления влияния многократного рассеяния. Поэтому вышеприведенные значения выхода излучения на электрон следует рассматривать как оценочные.

5. Выбор кристаллов

Для большинства приложений, где требуется высокая монохроматичность излучения, применение кристаллов пиролитического графита ограничено из-за большого значения характерного угла мозаичности и, вследствие этого, большой ширины спектра дифрагированного излучения. Как отмечено в работах [13,19], такими же достоинствами должны обладать и другие кристаллы, удовлетворяющие условию $\sigma_m \gg \Delta\Theta$ и $l \ll l_{ex}$, то есть мозаичные кристаллы класса *b*. Выбор кристаллов с малой мозаичностью легко осуществляется с помощью обычных методов рентгеноструктурного анализа. Оценка размеров микроблоков и углов их относительной разориентации является более сложной экспериментальной задачей, которая обычными методами успешно решается только для поверхностных слоев (см., например, [34]).

Ширина «столика» Дарвина и длина первичной экстинкции зависят от порядка отражения и энергии фотонов. В связи с этим весьма интересно проанализировать результаты измерений для одного и того же несовершенного кристалла и разных энергий фотонов. Несмотря на преимущества мозаичных кристаллов перед совершенными [21,13] в экспериментах по генерации ПРИ, как правило, использовались совершенные кристаллы. Возможное влияние несовершенства структуры, даже если оно и отмечалось, не комментировалось, а сами измерения проводились для одного угла наблюдения. Можно отметить только измерения, выполненные на томском синхротроне для алмазных мишеней и углов наблюдения $\Theta_d=90^\circ$ [32] и $\Theta_d=4^\circ$ [13]. Предварительные результаты обоих экспериментов опубликованы в [35,36] для углов наблюдения $\Theta_d=90^\circ$ и $\Theta_d=4^\circ$, соответственно.

В качестве мишеней в обоих экспериментах использовались кристаллы, вырезанные из одного и того же образца природного алмаза [37], с размерами $6 \times 10 \times 0.35$ мм³ [32] и $6 \times 10 \times 2$ мм³ [13], и поверхностной мозаичностью $\sigma_m \approx 0.2$ мрад [38]. Ось $\langle 110 \rangle$ была практически перпендикулярна большой грани, а вертикальная и горизонтальная грани кристалла были параллельны плоскостям $(1\bar{1}0)$ и (001) .

На рис.6 приведены результаты измерения вертикального углового распределения выхода излучения для отражения (220) из кристалла естественного алмаза размерами $6 \times 10 \times 0.35$ мм³ в эксперименте [32] (точки) для следующих экспериментальных условий: энергия электронов 900 МэВ, угол наблюдения $\Theta_D = 90^\circ$, угол коллимации излучения $\vartheta_c = 1.88$ мрад. Кристалл установлен в геометрии Брэгга ($\Theta_B = 45^\circ$) так, что толщина мишени по ходу электронного пучка была ≈ 0.5 мм.

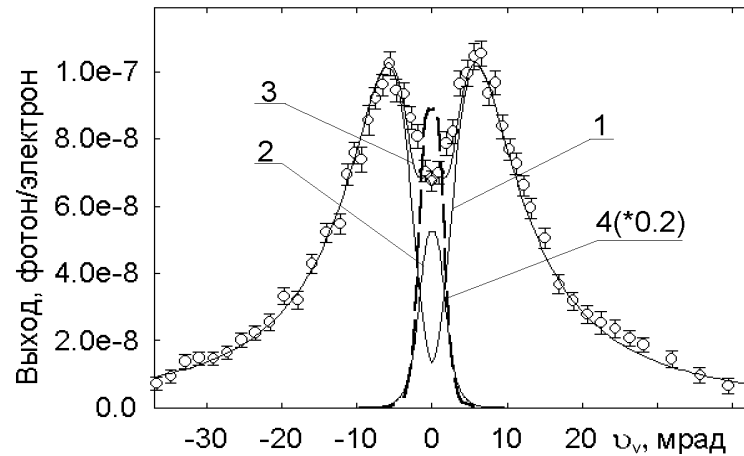


Рис. 6: Вертикальное угловое распределение фотонов первого разрешенного порядка отражения для эксперимента [32]. $E_0 = 900$ МэВ; $T = 0.5$ мм; $\Theta_D = 90^\circ$; $\vartheta_c = 1.88$ мрад. Точки – эксперимент. Кривые – расчет: 1 – ПРИ в совершенном кристалле; 2 – ДПИ в совершенном кристалле; 3 – ПРИ+ДПИ в совершенном кристалле; 4 – ДПИ в мозаичном кристалле класса $6a$.

Зависимость 1 представляет результаты расчёта по кинематической теории ПРИ [16] в предположении, что кристалл является совершенным. Как показано в работах [19,13], при выполнении условия $\sigma_m \ll \Theta_{ph}$, как в данном случае, мозаичность практически не сказывается на спектр и угловое распределение ПРИ. Как и в цитируемой экспериментальной работе из-за погрешности абсолютизации ($\sim 20-30\%$) результаты измерений нормированы на результаты расчёта в области углов вылета фотонов $\vartheta_v \geq 5$ мрад. Из рисунка видно, что расчетная зависимость хорошо описывает результаты эксперимента только для углов $\vartheta_v \geq 5-7$ мрад. Для меньших углов экспериментальные точки идут значимо выше расчетной кривой, что свидетельствует о вкладе излучения с более узким угловым распределением, чем ПРИ, то есть вкладе дифракции реальных фотонов. В данном случае $\omega \sim 6.97$ кэВ $\ll \gamma\omega_p \sim 67$ кэВ, что соответствует дифрагированному переходному излучению.

Зависимость 2 - результаты расчёта вертикального углового распределения выхода ДПИ, выполненного в соответствии с методикой работы [33], для

совершенного кристалла. В расчете учтены геометрические размеры детектора и поперечные размеры пучка электронов на кристалле [25]. Кривая 3 – результирующее угловое распределение ПРИ+ДПИ удовлетворительно описывает результаты эксперимента. Тем не менее, в центре углового распределения экспериментальная и расчетная зависимости несколько отличаются. Это может быть связано как с неопределенностью ряда параметров, используемых в процессе расчёта (поперечных размеров электронного пучка и его расходимости), так и, скорее всего, с мозаичностью кристалла (см. ниже).

Характерный угол мозаичности $\sigma_m \sim 0.2$ мрад сопоставим с шириной области полного отражения для этой энергии фотонов $\Delta\Theta \sim 0.02$ мрад. Поэтому по степени разориентации блоков этот кристалл следует отнести к классу α . Для проверки применимости к этому образцу приближения мозаичного кристалла класса b был проведен расчёт углового распределения ДПИ в рамках этого приближения по методике [26] (кривая 4). Из рисунка видно, что угловые распределения ДПИ для совершенного и мозаичного кристаллов подобны, но отличаются по интенсивности практически на порядок. Примерно такого соотношения и следовало ожидать поскольку для мозаичных кристаллов класса b отражающая способность $Q \sim N^2\lambda^2$ [14,24], то есть для относительно больших длин волн вероятность отражения рентгеновского излучения образцом такой толщины как и для совершенного кристалла близка к единице, а характерный угол мозаичности примерно на порядок больше ширины области полного отражения.

Зависимость 3 ближе к экспериментальным точкам, чем сумма зависимостей 2 и 4, поэтому кристалл алмаза, использованный в эксперименте [32], следует отнести к классу $a\alpha$, то есть размеры составляющих его кристаллитов больше длины первичной экстинкции $l_{ex} \sim 7$ $\mu\text{м}$. Различие между зависимостью 3 (ПРИ+ДПИ в совершенном кристалле) и результатами измерений обусловлено тем, что для фотонов с $\omega=6.97$ кэВ длина поглощения $l_a \sim 0.43$ мм $\gg l_{ex}$. Поэтому блоки, расположенные в глубине кристалла и разориентированные относительно блоков на поверхности на угол больше $\Delta\Theta$, могут давать вклад в выход регистрируемого излучения. Величина этот вклада очень мала по сравнению с соотношением величин σ_m и $\Delta\Theta$ (см. выше и рис. 6). Поэтому характерный размер кристаллитов значимо больше l_{ex} .

На рис.7 точками показана зависимость выхода фотонов первого порядка отражения от угла разориентации плоскости (110) относительно направления брэгговского отражения, полученная в эксперименте [13] после вычета фона, уровень которого не превышал 30% от выхода в максимуме. Эксперимент

выполнен в геометрии Лауэ на кристалле естественного алмаза с размерами $6 \times 8 \times 2$ мм³, вырезанном из того же образца, что и мишень, использованная в эксперименте [32]. Условия эксперимента: энергия электронов 500 МэВ, угол наблюдения $\Theta_{\text{Д}}=4^\circ$, энергия фотонов первого порядка отражения $\omega \sim 145$ кэВ, угол коллимации $\vartheta_c = 1.9$ мрад.

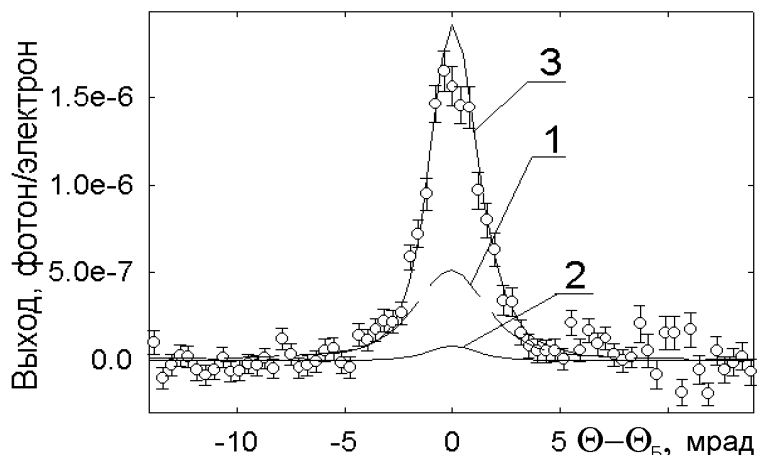


Рис. 7: Ориентационная зависимость выхода излучения для первого порядка отражения для эксперимента [13]. $E_0=500$ МэВ; $T=2$ мм; $\Theta_{\text{Д}} = 4^\circ$; $\vartheta_c=1.9$ мрад. Точки – эксперимент. Кривые – расчет: 1 – ПРИ в совершенном кристалле; 2 – ДТИ в совершенном кристалле; 3 – ПРИ+ДТИ в мозаичном кристалле класса $b\alpha$.

Здесь же (кривая 1) показана расчетная зависимость, полученная в рамках кинематической теории ПРИ. Основными факторами, определяющими форму ориентационной зависимости выхода излучения, являются угол коллимации излучения и многократное рассеяние частиц в кристалле. Поэтому измеренная и рассчитанная ОЗ достаточно близки по форме, но значительно отличаются по амплитуде. Разница в ширинах (FWHM) рассчитанной и измеренной зависимостей $\Delta\Theta_{\text{calc}}=3.97$ мрад и $\Delta\Theta_{\text{exp}} = (2.9 \pm 0.2)$ мрад превышает экспериментальную погрешность (шаг измерения ОЗ ≈ 0.4 мрад) и свидетельствует о вкладе излучения с более узким угловым распределением, чем ПРИ. Для экспериментальных условий цитируемой работы $\omega \approx 145$ кэВ $\gg \gamma\omega_p \sim 35$ кэВ, что соответствует дифрагированному тормозному излучению.

Оценка вклада ДТИ по методике работы [27] в предположении, что кристалл является совершенным, (кривая 2) показала, что в этом случае интенсивность ДТИ не превышает 25% от выхода ПРИ и не может объяснить результаты эксперимента. Учёт мозаичности кристалла по методике [12] в предположении однородного распределения блоков мозаики с размерами меньше длины первичной экстинкции $l_{ex} = 148$ мкм по толщине кристалла, то есть его

принадлежности к мозаичным кристаллам класса b , показал, что наблюдаемое различие действительно обусловлено мозаичностью кристалла. Результирующая зависимость ПРИ+ДТИ, рассчитанная с учетом мозаичности для обеих компонент, (кривая 3) близка к экспериментальной. Рассчитанные значения выхода $Y_{calc} = 1.94 \cdot 10^{-6}$ фот./электр., и ширины ориентационной зависимости $\Delta\Theta_{calc} = 2.67$ мрад удовлетворительно согласуются с результатами измерений $Y_{exp} = (1.63 \pm 0.008) \cdot 10^{-6}$ фот./электр. и $\Delta\Theta_{exp} = (2.9 \pm 0.2)$ мрад. Ошибки статистические и не включают погрешность определения числа электронов, прошедших через кристалл ($\sim 10-15\%$). Разница между результатами расчёта и эксперимента может быть обусловлена погрешностью нормировки, предположением об однородности распределения мозаичности по толщине кристалла и использованной оценкой σ_m . В зависимости от величины σ_m и соотношения "мозаичной" и "совершенной" компонент кристалла будет меняться выход излучения и ширина ОЗ.

Как уже отмечалось, оба мишени были вырезаны из одного и того же кристалла естественного алмаза. Следовательно, их микроструктура должна быть примерно одинаковой. Тем не менее, как показано выше, результаты измерений для них описываются в рамках разных моделей. Для угла наблюдения 90° результаты измерений описываются в рамках предположения, что это мозаичный кристалл класса $a\alpha$, тогда как из измерений для угла 4° следует, что там использовался мозаичный кристалл класса $b\alpha$.

Разное проявление структуры одинаковых кристаллов обусловлено разницей энергий регистрируемого излучения. С увеличением энергии фотонов l_{ex} возрастает, а $\Delta\Theta$ уменьшается. Поэтому с увеличением энергии фотонов для любого несовершенного кристалла становится применимым приближение мозаичного кристалла класса b . То есть, меняя угол наблюдения, можно отследить переход из одного описания в другое и, следовательно, оценить средние размеры микроблоков, из которых состоит используемый кристалл.

Теория ПРИ в кинематическом приближении описывает результаты измерений в совершенных кристаллах с погрешностью не хуже 10-15% [15]. Примерно с такой же точностью теория дифракции рентгеновского излучения в мозаичных кристаллах описывает выход дифрагированных реальных фотонов из кристаллов класса b [12]. Поэтому измерив угловые распределение или ориентационные зависимости выхода излучения под брэгговскими углами для нескольких углов наблюдения и сопоставив его с предсказаниями кинематической теорией ПРИ можно зарегистрировать вклад дифракции реальных фотонов и по его соотношению с выходом ПРИ сделать вывод о

средних размерах микроблоков, из которых состоит исследуемый образец.

В соответствии с (3)-(5) такое же изменение $\Delta\Theta$ и l_{ex} , как и при использовании разных углов наблюдения, происходит и с увеличением порядка отражения из-за уменьшения $F(\vec{g})$ и сомножителя n^{-1} . Поэтому информация о размерах блоков может быть получена и за более короткое время из измерений выхода излучения для одного угла наблюдения, но нескольких порядков отражения. Следовательно, из измерений угловых распределений или ориентационных зависимостей выхода излучения для одного угла наблюдения и разных порядков отражения и их сопоставления с результатами расчёта выхода ПРИ и ДТИ+ДПИ для совершенного кристалла и мозаичного кристалла класса b можно определить для какого порядка отражения начинается переход из одного описания в другое, то есть оценить средний размер блоков в исследуемом образце.

Измерения для нескольких углов наблюдения требуют больших временных затрат, как на проведение измерений, так и на перестановку детекторов излучения и выбор оптимальных режимов работы ускорителя и экспериментальной аппаратуры. Поскольку в эксперименте обычно уверенно регистрируется от 3 до 6-7 порядков отражения в зависимости от типа исследуемого кристалла и используемой регистрирующей аппаратуры (см., например, [12,32]), то измерение спектров излучения в каждой точке углового распределения или ориентационной зависимости для одного угла наблюдения являются более эффективным и информативным с точки зрения определения средних размеров микроблоков в исследуемом образце и оценки перспектив его применимости для получения интенсивных пучков квазимонохроматического рентгеновского излучения.

Дополнительным преимуществом такой постановки эксперимента с методической точки зрения, является тот факт, что отсутствует необходимость в точном определении выхода излучения на электрон, требуемая для корректного сравнения результатов измерений для разных углов наблюдения. Как правило, эта величина определяется с точностью не лучше 10-15%, что существенно усложняет интерпретацию результатов измерений. Проблема набора необходимой статистики для старших порядков отражения, обусловленная резким уменьшением выхода излучения с увеличением порядка отражения, может быть решена использованием фильтров, поглощающих мягкое излучение первых порядков отражения и практически не влияющих на выход более жесткого излучения (см., например, [32,39]).

6. Область возможных применений

Как отмечено во введении, с самого начала работ по обнаружению и исследованию ПРИ предполагалось, что основной областью применения этого типа излучения может стать медицина, где востребованы малогабаритные источники рентгеновского излучения с перестраиваемой энергией для лечения и диагностики (см., например, [6,7,31] и цитируемую там литературу). Опубликованные в последнее время работы по применению ПРИ также, в основном, посвящены медицинским применениям [28,29].

В последние десять лет началось активное использование в медицине пучков монохроматического рентгеновского излучения, получаемых на синхротронах. Это позволяет сопоставить параметры пучков, которые можно получить с помощью механизмов ПРИ и ДТИ в совершенных и мозаичных кристаллах, с требуемыми для этой области применения.

Наиболее известным и требовательным к интенсивности и монохроматичности пучка излучения является метод цифровой ангиографии. В этом методе исследования одновременно используются два пучка квазимонохроматичных фотонов с энергией выше и ниже порога фотопоглощения используемого реагента. Для ангиографии сердца и крупных сосудов в качестве реагента используется йод $\omega_K=33.17$ кэВ, а для бронхографии легких – ксенон с $\omega_K=34.56$ кэВ. Различают артериальную и венозную коронарную ангиографию по месту ввода реагента в организм обследуемого пациента. Последняя предпочтительнее из-за меньшего риска при введении реагента, но требует существенно большей интенсивности излучения из-за его низкой концентрации в исследуемом органе.

Для реализации метода требуются большие потоки излучения $\sim 10^{11}$ фотон/(мм²·с) (см. например, [40]), что в первую очередь обусловлено необходимостью проведения обследования в течение одной фазы сердечного цикла (~ 0.25 с). Требования к монохроматичности излучения не очень жесткие $\Delta\omega/\omega \leq 1\%$, что позволяет использовать изогнутые кристаллы и кристаллы с асимметричной вырезкой для увеличения интенсивности излучения. Известны методы и с использованием одного фотонного пучка [41] с энергией выше порога фотопоглощения реагента. Для реализации метода требуется примерно такая же интенсивность и монохроматичность, как в предыдущем случае.

Другой областью применения монохроматических пучков рентгеновского излучения является компьютерная томография. Следует отметить, что здесь главным преимуществом монохроматических пучков по сравнению с непре-

рывными пучками от рентгеновских трубок на энергию 150-200 кэВ является уменьшение поглощенной дозы. При одинаковом соотношении сигнал/шум использование монохроматического излучения уменьшает дозовые нагрузки примерно в два раза [4,5,7]. Использование монохроматического излучения с соответствующей энергией является необходимым при компьютерной томографии с использованием реагентов (I, Ba, Gd) [31], позволяющей более точно определить внутреннюю структуру исследуемого органа. Из-за меньших ограничений во времени по сравнению с коронарной ангиографией требуемые потоки на несколько порядков меньше, то есть $\sim 10^6 - 10^7$ фотон/(мм²·с) на площади ~ 100 см².

Еще одной областью применения пучков жесткого рентгеновского излучения может стать радиационная терапия злокачественных опухолей [42]. Многие опухоли обладают повышенной способностью адсорбировать некоторые элементы (йод, платина). При облучении их пучками рентгеновского излучения с энергиями на 15-20 кэВ выше, чем порог фотопоглощения реагента, фотоэлектроны теряют свою энергию вблизи точки рождения, то есть непосредственно внутри опухоли. Сечение взаимодействия фотонов таких энергий с биологической тканью достаточно мало, поэтому доза облучения, полученная организмом не велика. Требуемые потоки и монохроматичность излучения $\sim 10^7 - 10^8$ фотон/(мм²·с) и $\Delta\omega/\omega \leq 1-2\%$, соответственно.

Одним из уже традиционных применений квазимонохроматического рентгеновского излучения в медицине является маммография, то есть диагностика злокачественной опухоли молочной железы на ранних стадиях заболевания. В этом методе диагностики объект исследования облучают пучком монохроматического излучения с целью обнаружения более плотных участков, то есть зародышей опухоли. Традиционно такие исследования ведутся с использованием рентгеновских трубок большой мощности с молибденовым анодом. Для монохроматизации пучка излучения он пропускается через молибденовый фильтр (см., например, [5] и цитируемую там литературу). Как отмечено в цитируемой работе, энергия фотонов $\omega \approx 17$ кэВ, получаемых в таких установках, не всегда достаточна. Для получения оптимального соотношения сигнал/шум и минимизации поглощенной дозы в зависимости от размеров объекта исследования необходимо менять энергию фотонов от 17 кэВ до 25 кэВ, что в традиционной схеме невозможно. Требуемые потоки и монохроматичность излучения $\sim 10^5$ фотон/(мм²·с) на объекте площадью 100 см² и $\Delta\omega/\omega \leq 5-10\%$, соответственно.

Параметры фотонных пучков, достижимые с помощью излучения быст-

рых электронов в совершенных и мозаичных кристаллах, зависят от характеристик используемого ускорителя: энергии электронов и среднего тока. Если считать, что энергия ускорителя 100 МэВ, а средний ток $5 \mu\text{А}$ как в эксперименте [29], то при использовании двухкристальной схемы и мозаичных кристаллов с $\sigma_m \leq 0.4-0.6$ мрад можно добиться потоков излучения $\sim 10^6$ фотон/(мм²·с) для энергии квантов $\omega=33$ кэВ, что может быть достаточно для применения в компьютерной томографии и радиационной терапии онкологических заболеваний. Так как с уменьшением энергии фотонов выход ДТИ и ПРИ электронов средних энергий возрастает пропорционально λ^2 , то для использования в маммографии, где нужны меньшие энергии фотонов, можно использовать и ускоритель на меньшие энергии.

Как показано выше, применение однокристальной схемы генерации излучения в медицине невозможно. Тем не менее, поскольку достижимые значения выхода излучения в этом случае почти на два порядка выше, то такие пучки могут найти свое применение там, где условие отсутствия дополнительного вклада непрерывного тормозного излучения не являются определяющими.

7. Заключение

Результаты проведенных исследований можно сформулировать следующим образом.

1. Использование мозаичных кристаллов вместо совершенных существенно увеличивает выход квазимонохроматического рентгеновского излучения. Эти кристаллы наиболее эффективны для генерации жестких фотонов ($\omega > 20$ кэВ), поскольку большая длина поглощения позволяет увеличить толщину кристалла и выход излучения. Мозаичность $\sigma_m < \vartheta_c$ обеспечивает увеличение выхода излучения без заметного ухудшения монохроматичности излучения.

2. Однокристальная схемы генерации излучения практически не пригодна для применения в медицинских целях из-за большого фона тормозного излучения в месте расположения объекта излучения при использовании кристаллов оптимальной толщины и низкой эффективности для малых толщин.

3. Использование мозаичных кристаллов с $\sigma_m \sim 0.2-0.6$ мрад вместо совершенных в двухкристальной схеме генерации излучения позволяет существенно увеличить выход жестких фотонов при некотором ухудшении монохроматичности.

4. Зависимость интенсивности излучения быстрых электронов в кристалле от несовершенства его структуры позволяет ставить задачу отбора образцов

с требуемой структурой и свойствами по характеристикам регистрируемого излучения.

5. Регистрация выхода излучения под брэгговскими углами (ДПИ+ПРИ+ДТИ) для разных углов наблюдения (разных порядков отражения) и сопоставление с результатами расчёта для этих экспериментальных условий позволяет получить информацию о характерных размерах блоков, из которых состоит исследуемый образец, и его применимости для получения интенсивных пучков квазимонохроматического рентгеновского излучения.

6. При использовании ускорителя с соответствующими параметрами двухкристалльная схема генерации квазимонохроматического рентгеновского излучения с использованием мозаичных кристаллов с $\sigma_m \sim 0.2-0.6$ мрад может найти применение в маммографии, компьютерной томографии и радиационной терапии онкологических заболеваний.

Авторы выражают благодарность соавторам работ [12,32,35,36] за участие в разработке и реализации методик, использованных в процессе исследований, и помощь при проведении измерений. Работа выполнена при частичной поддержке программы внутренних грантов БелГУ.

Литература

1. Rullhusen R. Novel Radiation Sources Using Relativistic Electrons / R.Rullhusen, X.Artru, P.Dhez. – World Scientific: Singapore. – 1999.
2. Гарибян Г.М., Ян Ши, Квантовая макроскопическая теория излучения равномерно движущейся заряженной частицы в кристалле // ЖЭТФ. – 1971. – 61. – С.930-943.
3. Барышевский В.Г., Феранчук И.Д. О переходном излучении гамма-квантов в кристалле // ЖЭТФ. – 1971. – 61. – С.944-948.
4. Baldelli P., Taibi A., Tuffanelli A., Gambaccini M. Dose comparison between conventional and quasimonochromatic systems for diagnostic radiology // Physics in Medicine and Biology. – 2004. – 49. – P.4125-4146.
5. Peistrup M.A., Xizing Wu, Kaplin V.V., Uglov S.R., Cremer J.T., Rule D.W., Fiorito R.B. A design of mammography units using a quasimonochromatic X-ray source // Review of Scientific Instruments. – 2001. – 72. – P.2159-2170.

6. Takashima Y., Aramitsu K., Endo I. et al. Observation of monochromatic and tunable hard X radiation from stratified Si single crystals // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 1998. – 145. – P.25-30.
7. Freudenberger J., Hell E., Knupher W. Perspectives of medical X-ray imaging // Nucl. Instr. and Meth. A. – 2001. – 466. – P.99-104.
8. Барышевский В.Г., Дубовская И.Я. Дифракционные явления в процессах спонтанного и коллективного излучения релятивистских заряженных частиц в кристаллах // Итоги науки и техники. Сер. Пучки заряженных частиц и твердое тело. М.: ВИНТИ. – Т.4. – 1991. – С.129-225.
9. Лобко А.С. Экспериментальные исследования параметрического рентгеновского излучения / А.С. Лобко – Минск: БГУ, 2006. – 201с.: ил-ISBN 985-485-593-7.
10. Kaplin V.V., Uglov S.R., Zabaev V.N., Piestrup M.A., Gary C.K. Observation of bright monochromatic X-rays generated by relativistic electrons passing through a multilayer mirror // Appl. Phys. Lett. – 2000. – 76. – P.3647-3649.
11. Kaplin V.V., Uglov S.R., Bulaev O.F., Goncharov V.J., Voronin A.A., Peistrup M.A., Gary C.K., Nasonov N.N., Fuller M.K. Tunable, monochromatic X-rays using the internal beam of a betatron // Applied Physics Letters. – 2002. – 80. – P.3427-3429.
12. Bogomazova E.A., Kalinin B.N., Naumenko G.A., Padalko D.V., Potylitsyn A.P., Sharafutdinov A.F. and Vnukov I.E. Diffraction of real and virtual photons in a pyrolytic graphite crystal as source of intensive quasimonochromatic X-ray beam // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. – 201. – P.276-291.
13. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Шатохин Р.А. Использование мозаичных кристаллов для генерации интенсивных пучков рентгеновского излучения // Письма ЖТФ. – 2007. – 33;14. – С.87-94.
14. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей / Р. Джеймс – М.: Изд. Иностран. Лит. – 1950, 464 с.
15. Brenzinger K.-H., Limburg B., Backe H. et al. How narrow is the linewidth of parametric X-ray radiation // Phys. Rev. Lett. – 1997. – 79. – P.2462-2465.

16. Nitta H. Kinematical theory of parametric X-ray radiation // Phys. Lett. A. – 1991. – 158. – P.270-274.
17. Cromer D.T. and Waber J.T. Scattering factors computed from relativistic Dirac-Slater wave functions // Acta Cryst. – 1965. – 18. – P.104-109.
18. Potylitsin A. Influence of Beam Divergence and Crystal Mosaic Structure Upon Parametric X-Ray Radiation Characteristics // arXiv:cond-mat/9802279, v1 26 Feb 1998.
19. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Нечаенко Д.А., Шатохин Р.А. Влияние мозаичности кристаллов на характеристики параметрического рентгеновского излучения // Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. – 2006. – 744, сер.физ., "Ядра, частицы, поля"; 3(31). – С.51-65.
20. Афанасьев А.М., Агинян М.А. Излучение ультрарелятивистских частиц при прохождении через идеальные и мозаичные кристаллы // ЖЭТФ. – 1978. – 74;2. – С.570-579.
21. Внуков И.Е., Жандармов Ю.В., Шатохин Р.А. Источник рентгеновского излучения с перестраиваемой энергией для медицинских целей // Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. – 2008. – 808, сер.физ., "Ядра, частицы, поля"; 2(38). – С.25-36.
22. Тер-Микаэлян М.Л. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях / М.Л.Тер-Микаэлян – Ереван: Изд. АН АРМ ССР. – 1969, 459с.
23. Базылев В.А. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях / В.А.Базылев, Н.К.Жеваго. – Москва: Наука, 1987. – 272с.
24. Chabot M., Nicolai P., Wohrer K., Rozet J.P., Touati A., Chetioui A., Vernhet D. and Politis M.F. X-ray reflectivities at low and high order of reflection of flat highly oriented pyrolytic graphite crystals // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 1991. – 61. – P.377-384.
25. Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Науменко Г.А., Падалко Д.В., Потылицын А.П. Параметрическое рентгеновское излучение электронов в мозаичных кристаллах // Известия ВУЗов. Физика. – 2001. – 44. – 3. – С.53-65.

26. Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Кирьяков А.А., Науменко Г.А., Падалко Д.В., Потылицын А.П. Мягкая компонента излучения каналированных электронов в кристалле кремния // Известия ВУЗов. Физика. – 2001. – 44;3. – С.71-80.
27. Бакланов Д.А., Балдин А.Н., Внуков И.Е., Нечаенко Д.А., Шатохин Р.А. Соотношение вкладов дифрагированного тормозного излучения и параметрического рентгеновского излучения в совершенных кристаллах // Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. – 2007. – 763, сер.физ., "Ядра, частицы, поля"; 1(33). – С.41-56.
28. Sones B., Danon Y., Block R.C. Lithium fluoride (LiF) crystal for parametric X-ray (PXR) production // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2005. – 227. – P.22-31.
29. Hayakawa Y., Sato I., Hayakawa K., Tanaka T., Mori A., Kuwada T., Sakai T., Nogami K., Nako K., Sakae T. Status of the parametric X-ray generator at LEBRA. Nihon University // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2006. – 252. – P.102-110.
30. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика / З.Г.Пинскер – М.: Наука; 1982. – 392с.
31. Arfelli F. Synchrotron light and imaging system for medical radiology // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. – 2000. – 454. – P.11-25.
32. Балдин А.Н., Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Каратаева Е.А. О вкладе дифракции реальных фотонов в наблюдаемые спектры параметрического рентгеновского излучения электронов в совершенных кристаллах // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2006. – вып.4. – С.72-85.
33. Adishev Y.N. et al. Angular distribution of X-ray radiation by 500 MeV electrons in a tungsten crystal // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2003. – 201. – P.114-122.
34. Ohler M., Baruchel J., Moore A.W., Galez Ph., Freund A. Direct observation of mosaic blocks in highly oriented pyrolytic graphite // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 1997. – 129. – P.257-260.
35. Верзилов В.А., Внуков И.Е., Зарубин В.В. и др. Экспериментальное исследование параметрического рентгеновского излучения в образцах из

- алмаза и графита. // Тез. докл. XXVII Межд. конф. по физике взаимодей. заряж. частиц с кристаллами. – М.: Изд. МГУ, 1997. – С.72.
36. Chefonov O.V., Kalinin B.N., Naumenko G.A., Padalko D.V., Potylitsin A.P., Vnukov I.E. Radiation from relativistic electron in carbon samples with different structure at large angles ($\gg \gamma^{-1}$) // IV International Symposium "Radiation from relativistic electrons in periodic structures" September 13-16, 1999, Lake Baikal, Russia.
37. Потылицын А.П. Исследование электромагнитного излучения ультра-релятивистских электронов в кристаллах // Известия ТПУ. – 2000. – 301(1). – С.55-60.
38. Розум Е.И. Изготовление, исследование и некоторые применения монокристаллических мишеней для каналирования // ред. жур. Известия ТПУ. Физика. – Томск, 1979. – деп. В ВИНТИ 03.10.79, № 3459
39. Амосов К.Ю., Андреяшкин М.Ю., Верзилов В.А. и др. Параметрическое рентгеновское излучение в мозаичном кристалле пиролитического графита // Письма в ЖЭТФ. – 1994. – 60. – Вып.7. – С.506-510.
40. Dix W.-R., Dill T., Hamm C.W., Jung M., Kupper W., Lohmann M., Reime V. and Ventura R. Intravenous coronary angiography with synchrotron radiation at HASYLAB // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. – 1999. – 654. – P. 1043-1046.
41. Takeda T., Itai Y., Wu J., Ohtsuka S., Hyodo K., Ando M., Nishimura K., Hasegawa S., Akatsuka T., Akisada M. Two-dimensional intravenous coronary arteriography using above K-edge monochromatic synchrotron x-ray // Acad. Radiol. – 1995. – 2. – P.602-608.
42. Thomlinson W., Suortti P., Chapman D. Recent advances in synchrotron radiation medical research // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A. – 1999. – 543. – P.288-296.

TUNABLE X-RAY SOURCE BASED ON MOSAIC CRYSTALS USING FOR PRACTICAL APPLICATIONS

**D.A. Baklanov, I.E. Vnukov, Yu.V. Zhandarmov, Zyong Tkhi Zhang,
S.A.Laktionova, R.A. Shatokhin**

Belgorod State University,

Studencheskaya str., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: vnukov@bsu.edu.ru

The creation prospect of the X-ray source with tunable wavelength on the base of the middle energy electron accelerator and oriented crystals is analyzed. It is proved that the mosaic crystals provide the essentially greater yield of hard radiation than perfect crystals due to the contribution of diffracted bremsstrahlung. It is shown that the one-crystal scheme of the X-ray generation is not acceptable for medicine applications due to the contribution of bremsstrahlung background at the location of irradiated object. The double-crystal scheme is analyzed when one of crystals is located directly on the electron beam for the radiative generation and the other is used for its monochromatization and parallel transfer of the X-ray beam. The choosing method of crystals possessing necessary characteristics on contributions of the parametric X-ray and the diffracted bremsstrahlung into the radiation yield is proposed.

Key words: parametric X-ray radiation, crystal structure, mosaicity, radiation yield, diffracted bremsstrahlung, diffraction.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЗАКРУЧЕННОГО ВОЗДУШНОГО СТОЛБА, МОДЕЛИРУЮЩЕГО ВИХРЕВУЮ ТРУБУ

З.А.Кабиллов, А.В.Ковалев, Н.В.Малай

Белгородский государственный университет,
Студенческая,14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: kovalev_a_v@mail.ru.

В настоящей статье представлены обобщенные результаты экспериментального моделирования вихревого движения газа. Описана экспериментальная установка и приведены графики результатов эксперимента.

Ключевые слова: вихревое движение газа, вихревая труба.

1. Введение. Вихревые эффекты широко используются в современной технике [1,2]. Имеется обширный экспериментальный материал, полученный при исследовании различных устройств, с закрученными газовыми и жидкостными потоками. Эмпирические зависимости, выведенные на основе этих результатов, позволяют разрабатывать новые в техническом отношении устройства, но приемлемой теории явлений, происходящих, например, в вихревых трубах и в других устройствах, использующих закрученные потоки, в настоящее время не существует. Это обстоятельство в существенной мере ограничивает возможности повышения термодинамического КПД вихревых и струйных аппаратов. Предприняты попытки [3-5] обобщить и проанализировать выдвинутые различными авторами гипотезы, однако четкого физического представления о структуре и эволюции вихревых потоков пока нет. Это связано, в первую очередь, с тем, что большая часть экспериментальных данных, на которых базируются высказываемые гипотезы, относятся к исследованиям технических устройств конкретного назначения, созданных по конструктивным соображениям, а не на основе представлений о физических явлениях, происходящих в естественных или в созданных вихрях. Для достаточно глубокого изучения вихревого движения изменяющихся сред требуется не только теоретическое моделирование изучаемых явлений, но и физический эксперимент на реальных упрощенных моделях, результаты которого позволили бы проанализировать и описать отдельные аспекты явлений.

Целью данной и последующих работ является экспериментальное моделирование вихревого движения газа или жидкости в ограниченных пространствах для определения термодинамических параметров сложных течений, влияния на них различных внешних факторов, и разработка алгоритма создания искусственных вихрей с заданными параметрами. Конкретной задачей исследования является разработка вихревых труб с улучшенными характеристиками. Этот тип вихревых аппаратов имеет техническую перспективу, в частности, в холодильной технике. Принцип работы этих устройств основан на эффекте Ранка [6] (Ранка - Хильша), обнаруженного в 1931 году.

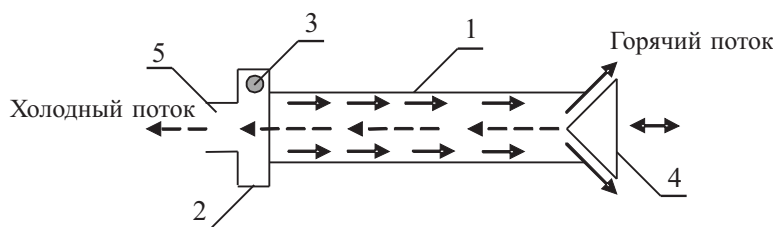


Рис. 1: Схема вихревой трубы: 1 – камера разделения, 2 – сопловой блок, 3 – вход исходного потока, 4 – дроссель, 5 – диафрагменный выход.

Простейшая вихревая труба [6], схема которой приведена на рис.1, представляет собой цилиндрическую трубу (камеру разделения – 1), в которую, через сопловой блок – 2 и вход – 3, тангенциально вводится газовый или жидкостной поток, закручивающийся в камере разделения. Под действием инерционных сил образуется свободный поток винтообразной структуры (периферийный), который, достигая дросселя – 4, затормаживается и разделяется на два потока. Один из них – горячий выходит, обтекая дроссель, а другой – вынужденный вихрь (холодный поток), формирующийся вдоль оси, поворачивает навстречу свободному вихрю и выходит через диафрагму – 5. Разница температур горячего и холодного потока может достигать 100 и более кельвинов. Основным недостатком вихревых энергоделителей является невысокое значение адиабатного КПД, не превышающего 0,24.

2. Эксперимент. В качестве экспериментальной модели использовался стационарный вращающийся воздушный столб в цилиндрической трубе, заглушенной с одного конца.

Первой задачей, которую необходимо было решить в ходе модельных экспериментов, являлось определение распределения давления в закрученных потоках. Она решалась с помощью экспериментальной установки, схема которой приведена на рис.2. Установка представляет собой цилиндрическую трубу длиной 500 мм с внутренним диаметром 46 мм. По образующей цилиндра

дра просверлены десять отверстий малого диаметра для введения зондов. В качестве зонда использовалась игла медицинского шприца с внешним диаметром 0,5 мм. Конец иглы обрезан под прямым углом, поэтому воздушный поток любого направления обтекал зонд в перпендикулярном направлении.

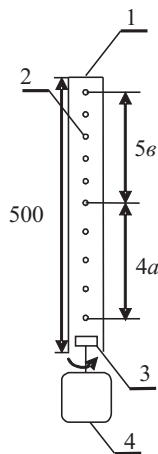


Рис. 2: Схема расположения измерительных зондов: 1 – труба, 2 – отверстия для зондов, 3 – крестовина, 4 – электродвигатель; $a = 50$ мм, $b = 40$ мм.

Задвигая или выдвигая зонд из отверстия можно измерять приращение (отрицательное) статического давления в закрученном столбе воздуха в радиальном направлении выбранного сечения от оси до стенки трубы.

Давление измерялось с помощью стандартного наклонного манометра марки ММГ-2400(5)-1,0. Зонды последовательно перемещались из одного отверстия в другое, причем в каждом сечении проводилось 5 измерений: на оси трубы, на расстоянии 5 мм от оси, 10 мм, 15 мм, и непосредственно у стенки (23 мм). Вращение воздушного столба осуществлялось электродвигателем УЛ-062, на вал которого насажена крестовина из двух перпендикулярных друг другу пластин размером 20×40 мм. Максимальная скорость вращения двигателя - 5000 оборотов в минуту. Для исключения систематических погрешностей, связанных с неточностью изготовления и крепления крестовины, измерения проводились при вращении двигателя как по часовой, так и против часовой стрелки. Полученные данные усреднялись, в связи с чем возможная генерация осевого движения воздуха (вентиляторный эффект) крестовиной также исключалась.

Для определения направлений движения слоев вращающегося воздушно-

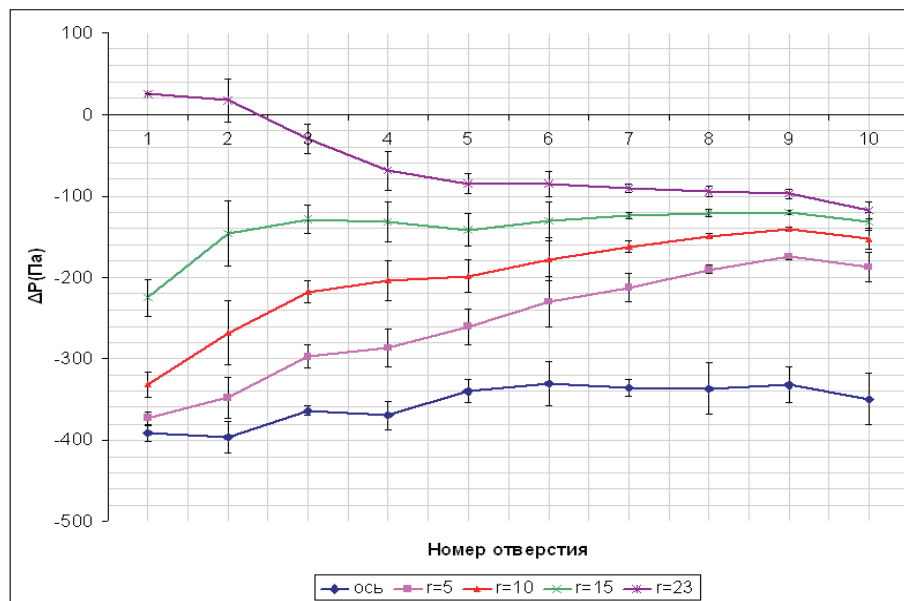


Рис. 3: Изменение статического давления по высоте столба.

го столба использовался зонд с загнутым под 90° концом. Поворачивая зонд, можно определить как полный напор, так и приращения статического давления, например, в положениях зонда "по потоку". Позиционируя зонд в положениях максимального полного напора, можно оценить угол наклона струй при образовании винтообразного потока.

На рис.3 приведен график изменения статического давления по высоте трубы для оси и слоев, отстоящих от оси на 5, 10, 15 и 23 мм. Как видно, в первом сечении, находящимся на 35 мм выше крестовины, разброс давлений максимален. В пристеночном слое давление несколько превышает атмосферное, а во всех других наблюдается разрежение, максимальное по оси трубы. По мере удаления от крестовины величина разрежения на оси практически остается постоянной, в других же слоях формируется упорядоченное движение с близкими значениями статического давления, что означает образование стационарного вихря в форме трубы с толщиной "стенки" примерно 18 мм. Приосевое ядро с низким давлением имеет диаметр около 10 мм.

На рис.4 приведены зависимости радиального изменения давления в трех сечениях. Как видно, в третьем от крестовины сечении, давление по радиусу изменяется практически линейно (кривая 1), а в десятом, отстоящем от заглушенного торца на 35 мм, (кривая 3) оно резко возрастает по радиусу на протяжении 5 мм, а затем практически стабилизируется.

Замеры с помощью поворотного углового зонда показали, что в периферийных слоях образуется восходящий поток винтообразной структуры. Век-

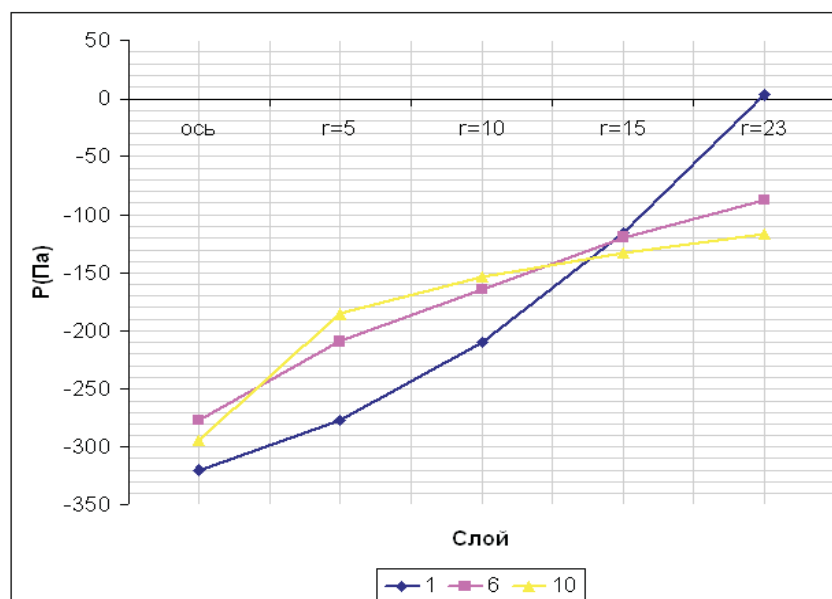


Рис. 4: Зависимость радиального изменения давления в трех сечениях.

тор скорости имеет наклон относительно горизонтальной плоскости в $40 - 45^\circ$. При его торможении у заглушенного торца происходит перетекание газа из периферийных слоев в центральное ядро, в результате чего образуется осевой противоположный поток, направление вращения которого из-за малых размеров с достоверностью установить не удалось.

В дальнейшем предполагается измерение температурных полей в закрученном потоке с помощью термозондов, изготовленных из таких же медицинских игл.

Литература

1. Вихревой эффект и его применение в технике // Материалы 2-й Всесоюзной научно-технической конференции. – Куйбышев: КуАИ, 1976.
2. Вихревой эффект и его промышленное применение // Материалы 3-й Всесоюзной научно-технической конференции. – Куйбышев: КуАИ, 1981.
3. Меркулов А.П. Вихревой эффект и его применение в технике / А.П.Меркулов. – М.: Машиностроение, 1969.
4. Пиралишвили Ш.А., Поляев В.М., Сергеев М.Н. Вихревой эффект. Эксперимент, теория, технические решения / Ш.А.Пиралишвили. – М.: УН-ПЦ "Энергомаш", 2000.

5. Гуцол А.Ф. Эффект Ранка // Усп. Физ. Наук. – 1997. – 167;6. – С.665-687.
6. Мартынов А.В., Бродянский В.М. Что такое вихревая труба? / А.В.Мартынов. – М.: Энергия, 1976.

DETERMINATION OF PARAMETERS OF INVOLUTE AIR COLUMN WHICH IS THE VORTICAL TUBE MODEL

Z.A.Kabilov, A.V.Kovalev, N.V.Malay

Belgorod state university,

Studencheskaya St., 14, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: kovalev@mail.ru

Generalized results of the experimental modelling of the vortical motion in gases are presented. The experimental device is described and experimental graphs are presented.

Key words: gas vortical motion, vortical tube.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ КРЕМНИЯ, ОБРАБОТАННОГО СФОКУСИРОВАННЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ Ga В НЕМАТИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ

И.С.Кучеев, Ю.С.Тучина

Белгородский государственный университет,

Студенческая 14, Белгород 308007, Россия, e-mail: kucheev@bsu.edu.ru

Экспериментально продемонстрирована возможность визуализации участков поверхности кремния подвергшихся воздействию фокусированных пучков ионов Ga в нематической ячейке. При малых дозах облучения визуализация основана на перераспределении приложенного к ячейке напряжения между жидкокристаллическим слоем и кремнием, в поверхностном слое которого облученные участки обладают повышенной проводимостью по сравнению с высокоомным обедненным слоем кремния необлученных участков. С ростом дозы облучения визуализация осуществляется благодаря изменению исходной ориентации нематика на поверхности обработанного ионами кремния. Предполагается, что гомеотропная ориентация вызвана проявлением аморфных свойств облученного кремния, а наклонная ориентация обусловлена изменением гидрофильных/гидрофобных свойств поверхности облученного кремния.

Ключевые слова: нематик, кремний, сфокусированный ионный пучок, полевой эффект, ионы.

1. Введение. Хорошо известно, что фокусированные ионные системы (FIB) широко используются при разработке микро/наноструктур [1,2,3], в нанолитографии [4], для изготовления сенсоров в биологических исследованиях [5, 6]. Разработка новых приборов и новых процессов, которые включают в себя FIB системы требуют и новые методы регистрации взаимодействия ионных пучков с поверхностью. Очевидно, если дозы облучения таковы, что под действием ионного пучка происходит разрушение и распыление материала подложки, регистрация (визуализация) таких изменений поверхности не вызывает трудностей и может быть осуществлена традиционными методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Однако задача регистрации взаимодействия ионов с поверхностью усложняется при малых дозах облучения, при которых нет явного изменения рельефа поверхности и при этом области облучения имеют микроскопические размеры. Особенно это касается поверхности кремния, наиболее технологичного и наиболее широко используемого материала в качестве многофункциональных "платформ" в разработке микро/оптоэлектронных приборов. Это

обусловлено тем, что при проникновении незначительного числа высокоэнергетических ионов в приповерхностные слои кремния формируются зарядовые ловушки, что сопровождается увеличением поверхностной проводимости, и, следовательно, ухудшаются параметры приборов. В связи с несомненной перспективностью использования фокусированных пучков ионов, в данной работе была рассмотрена возможность регистрации жидким кристаллом поверхности кремния, который подвергся воздействию ионных пучков Ga.

Эксперимент. В эксперименте использовался монокристаллический кремний p - типа проводимости с удельным сопротивлением 4,5 Ом·см. Облучение выполнялось пучком фокусированных ионов Ga с энергией 30 кэВ в двойном (электроны, ионы) микроскопе FEI Quanta 200 3D. Облучение кремния производилось в растровом или точечном режимах.

В растровом режиме, при токе пучка 10 pA и времени экспозиции 10 секунд, на поверхности кремния была облучена прямоугольная с размерами 180×150 мкм. После ионного облучения, в этом же микроскопе, поверхность была исследована в электронном сканирующем режиме (РЭМ). Изменений поверхности кремния в области ионного облучения выявлено не было. Облученный образец кремния исследовался атомным силовым микроскопом (Integra NT-MDT). Каких-либо изменений рельефа на поверхности также не было обнаружено.

Далее образец кремния был использован в качестве подложки в жидкокристаллической ячейке сэндвич типа. Противоположная кремниевой подложки поверхность представляла собой стеклянную пластинку с прозрачным проводящим слоем окиси индия, который в свою очередь, был покрыт полиамидной пленкой, натертой в одном направлении для задания планарной ориентации молекул жидкого кристалла. Толщина слоя жидкого кристалла задавалась фторопластовыми прокладками и составляла 5 мкм. Использовался нематический жидкий кристалл 5СВ, который заправлялся в ячейку в изотропной фазе. После перехода жидкого кристалла в нематическую фазу были проведены поляризационные исследования сформировавшейся текстуры жидкого кристалла. Анализ сформировавшейся ориентации нематика показал, что последняя является однородной и признаков влияния облученной поверхности кремния на ориентацию молекул не обнаружено, рис.1а.

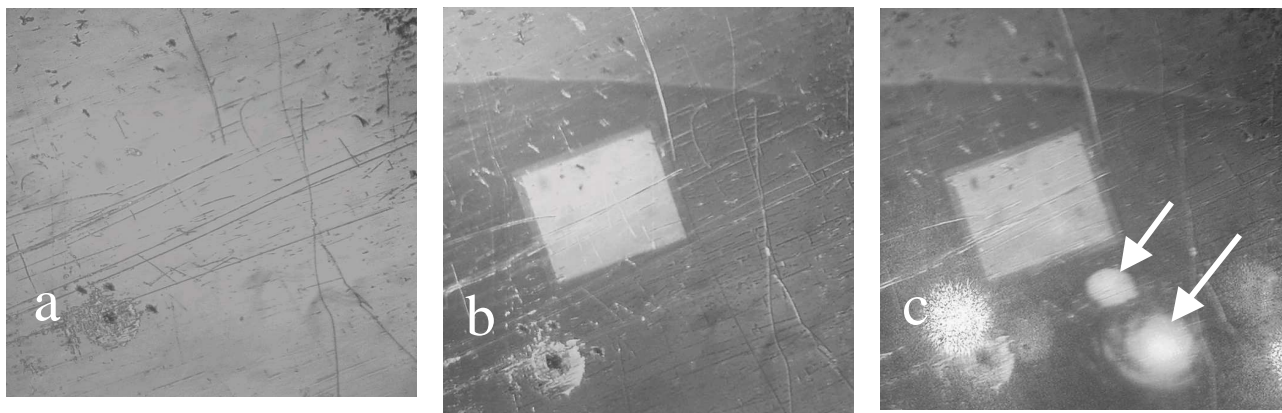


Рис.1. а) исходная ориентация нематика в ячейке, б) визуализация облучённого участка кремния в ячейке, с) переориентация нематика в области лазерных пятен на поверхности кремния; напряжение, В: а) – 0, б) – 2,8, с) – 2,8; частота 400 Гц.

Визуализация облученного участка кремния может осуществляться при возбуждении ячейки переменным напряжением, рис.1б, причем визуализация наступает не мгновенно после приложения напряжения, а с некоторой временной задержкой после момента включения напряжения. Рис.2 демонстрирует зависимость времени задержки от величины приложенного напряжения. Хорошо видно, что задержка длится от нескольких секунд при малых напряжениях и достигает нескольких десятых секунды при увеличении напряжения. Учитывая, что классическая реакция нематика на внешнее напряжение составляет несколько десятых секунды [7], мы связываем процесс визуализации с зарядовыми процессами, протекающими в слое нематика. В результате накопления ионного заряда в слое нематика у поверхности кремния, последняя обедняется основными носителями заряда благодаря эффекту поля. Поэтому приповерхностный слой кремния становится высокоомным и, следовательно, в результате перераспределения напряжения между кремнием и слоем нематика, часть приложенного к ячейке напряжения падает на высокоомном слое в кремнии. Однако в области кремния, облученного ионным пучком, высокоомный слой не формируется. Это обусловлено тем, что облученная ионами поверхность кремния имеет повышенную проводимость благодаря возникшим ловушкам носителей заряда. Вследствие такого перераспределения напряжения, к слою нематика, который располагается над облученным участком поверхности кремния, прикладывается большее напряжение, чем к слою нематика над обедненной поверхностью кремния. Поэтому нематик над облученной областью кремния переориентирован в большей

степени, чем над не облученной поверхностью. Наличие или отсутствие обедненного высокоомного слоя в кремнии достоверно проверяется с помощью возбуждения структуры лазерным (He-Ne, 0,63 мкм) лучем. В области лазерного пятна на поверхности кремния, в случае обеднения поверхности, будет иметь место переориентация нематика (рис.1в, области переориентации отмечены стрелками). Если участок поверхности кремния не обеднен, как это имеет место в случае облучения его ионным пучком, переориентация в области лазерного пятна не происходит.

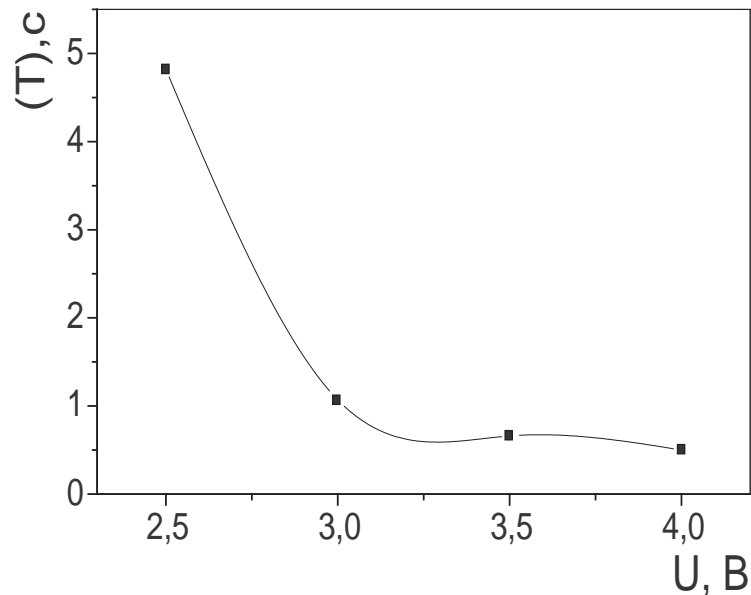


Рис.2. Зависимость времени задержки (Т) начала визуализации облученной поверхности кремния в жидкокристаллической ячейке от величины приложенного напряжения U. Частота 400 Гц.

Далее доза облучения поверхности кремния была увеличена, а режим облучения был выбран точечным, при котором ионный пучок фокусируется в точку. Однако, из-за неустраняемого расплывания пучка имеет место гауссовское распределение ионов по сечению пучка. Поэтому максимальное разрушение материала подложки будет иметь место в кратере, а прилегающая поверхность кремния будет облучаться дозой зависящей от расстояния до кратера. В качестве реперной метки был выбран прямоугольный n^+ карман. Исследование поверхности кремния с помощью РЭМ, после облучения ионным пучком в точечном режиме, показало, что есть некоторые изменения поверхности кремния в области облучения. К таким изменениям поверхности можно отнести появление светлого (1) и темного (2) кольцевых участков соответственно, рис.3а. Кратер на РЭМ изображении виден как черная точка

в центре области 1. Необходимо отметить, что контраст РЭМ изображений, на которых визуализируются области 1 и 2, без принятия дополнительных мер (например, выбор оптимального угла наблюдения) чрезвычайно низкий. Далее на облученный образец кремния наносился слой жидкого кристалла. Поляризационные исследования показали, что поверхность кремния, имеющая светлый фон на РЭМ изображении, вызывает формирование гомеотропной ориентации нематика (1), а поверхность, имеющая темный фон на РЭМ изображении вызывает наклонную ориентацию нематика (2), рис.3б.

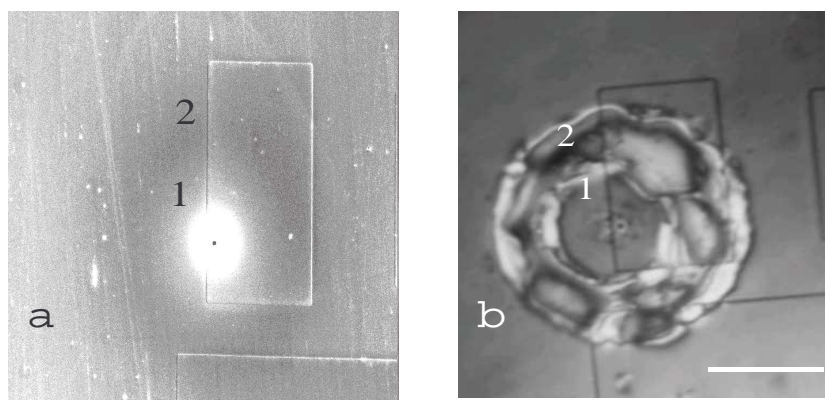


Рис.3. а) РЭМ изображение поверхности (под углом 52 град.) поверхности кремния, облученное ионным пучком, сфокусированным в точку; время экспозиции 5 минут; ток ионного пучка 0,3нА; б) ориентация нематика на поверхности кремния в области облучения (тот же участок, что и на рис.1а); метка – 120 мкм.

Основной фактор, который, по-видимому, ответственен за формирование гомеотропной ориентации нематика, является аморфное состояние поверхности кремния, которое появляется после облучения ее ионным пучком с соответствующей дозой. На это качественно указывает упомянутая выше хорошая корреляция между появлением гомеотропной текстуры нематика и светлого фона этой же поверхности кремния на РЭМ изображении. Другой фактор, который, по-видимому, ответственен за наклонную ориентацию нематика, обусловлен гидрофильностью/гидрофобностью поверхности кремния. Кремний, благодаря имеющимся на его поверхности гидроксильным группам [8] имеет тенденцию ориентировать полярный нематик 5СВ гомеотропно. Вследствие облучения поверхности имеет место адсорбция ионов Ga и частичное химическое замещение гидроксильных групп на ионы Ga [9], с соответствующей частичной потерей гидрофильности и, соответственно, тенденцией ориентировать нематик гомеотропно.

3. Заключение. Таким образом, в работе показано, что участки поверхности кремния, облученные ионным пучком Ga регистрируются с помощью нематического жидкого кристалла. Для малых доз облучения, при которых нет изменения исходной ориентации нематика на поверхности кремния, визуализация основана на регистрации изменения поверхностной проводимости кремния. Визуализация при более высоких дозах облучения поверхности кремния осуществляется благодаря изменению исходной ориентации нематика и формированию гомеотропной или наклонной ориентации в зависимости от дозы облучения.

Авторы выражают благодарность за предоставленную возможность использовать оборудование центра коллективного пользования БелГУ.

Литература

1. Matsui S. // Nucl.Instrum. Methods.B. – 2007. – 25. – P.7758.
2. Assayag G.B. et al // J.Vac.Sci.Technol.B. – 1995. – 13. – P.2772.
3. Т.Нoshino // J.Vac.Sci.Technol.B. – 2006. – 24;6. – P.2538-2543.
4. C.Satriano, S.Carnazza, A.Licciardello // J.Vac.Sci.Technol. A. – 2003. – 21;4. – P.1145-1151.
5. S. Arscott, D.Troadec // Nanotechnology. – 2005. – 16. – P.2295-2302.
6. K. Arshak, M.Mihov // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. – 2005. – 7;1. – P.193-198.
7. Блинов Л.М. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов / Л.М.Блинов. – М.:Наука, 1978. – 84с.
8. Kim J.B., Kim K.C., Ahn H.J., Hwang B.H., Hyun D.Ch., Baik H.K. // Appl. Phys. Lett. – 2007. – 90. – P.3515.
9. Zhang X.G. Electrochemistry of Silicon and Its Oxide / X.G.Zhang. – New York: Klumer Academic Press/Plenum Publishers, 2001. – 61p.

VISUALIZATION OF SILICON SURFACE TREATED BY FOCUSED BEAM OF Ga IONS IN NEMATIC CELL

S.I.Kucheev, Yu.S.Tuchina

Belgorod State University,

Studencheskaya St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail: kucheev@bsu.edu.ru

We demonstrate the visualization possibility of silicon surface treated by focused ion beam in nematic cell. Using small dose of irradiation, the visualization is based on the redistribution of applied voltage between the depleted silicon surface and the liquid crystal layer. By the dose increasing, the visualization is attained due to the change of initial alignment of liquid crystal. It is supposed that homeotrop alignment is caused by the amorphous surface of irradiated silicon and the tilted alignment of liquid crystal is induced by the change of hydrophilic properties of surface.

Key words: nematic, silicon, focused ion beam, field effect, ions.

ФОТОФОРЕЗ КРУПНОЙ ЛЕТУЧЕЙ СФЕРИЧЕСКОЙ КАПЛИ ПРИ МАЛЫХ ПЕРЕПАДАХ ТЕМПЕРАТУРЫ В ЕЁ ОКРЕСТНОСТИ С УЧЕТОМ ТЕРМОДИФФУЗИИ

¹⁾Н.В. Малай, ²⁾Е.Р. Щукин, ¹⁾А.В. Лиманская

¹⁾Белгородский государственный университет,
Студенческая 14, Белгород, 308007, Россия,
e-mail: malay@bsu.edu.ru, limanskayaanna@mail.ru

²⁾Институт высоких температур РАН, e-mail: evgrom@yandex.ru

В приближении Стокса, проведено теоретическое описание стационарного движения крупной летучей аэрозольной частицы сферической формы в бинарной газовой смеси, на которую падает электромагнитное излучение. При рассмотрении движения предполагалось, что средняя температура поверхности частицы незначительно отличается от температуры окружающей ее газообразной среды. На основе решения газодинамических уравнений, получены аналитические выражения для силы и скорости фотофореза с учетом влияния движения среды и термодиффузии.

Ключевые слова: фотофорез в газах.

Введение. В газообразных средах с неоднородным распределением температуры возникает упорядоченное движение частиц, обусловленное действием сил молекулярного происхождения. Их появление вызвано передачей нескомпенсированного импульса частицам молекулами газообразной среды. Неоднородное распределение температуры в объеме частицы может возникнуть при ее нагреве или охлаждении источниками или стоками тепла, появление которых обусловлено поглощением электромагнитного излучения. В литературе такое движение частиц в газе называют фотофорезом [1]. Впервые такое явление наблюдал Эренхафт [1]. Он наблюдал движение частиц пыли, взвешенных в воздухе, в луче мощной лампы: некоторые частицы двигались по направлению к источнику излучения. Этот эффект нельзя было объяснить действием силы светового давления. Эренхафт назвал открытый им эффект фотофорезом. Движение частиц в направлении распространения света было названо положительным фотофорезом, а в обратном – отрицательным. Фотофорез может играть существенную роль в атмосферных процессах; создании установок, предназначенных для селективного разделения частиц по размерам; очистке промышленных газов от аэрозольных частиц и т. д. [2-4].

В опубликованных до настоящего времени работах по теории фотофоретического движения крупных летучих сферических капель при малых относительных перепадах температуры ($(T_{iS} - T_{e\infty})/T_{e\infty} \ll 1$, где T_{iS} – средняя температура поверхности частицы) не учитывалось влияние движения среды, т.е. учет конвективных членов теплопроводности на фотофорез [5-6] и термодиффузии. В работе, используя метод сращиваемых асимптотических разложений, проводится оценка этого явления.

1. Постановка задачи. Рассмотрим крупную летучую сферическую частицу (т. е. частицу, на поверхности которой может происходить фазовый переход) радиуса R , взвешенную в бинарной газовой смеси, один из компонентов которой (пусть, например, первый) состоит из молекул того же вещества, что и вещество частицы с температурой $T_{e\infty}$, плотностью ρ_e и вязкостью μ_e . На частицу падает электромагнитное излучение, которое неоднородно нагревает ее поверхность.

Газ, взаимодействуя с неоднородно нагретой поверхностью, начинает двигаться вдоль поверхности в направлении возрастания температуры. Это явление называется тепловым скольжением. Тепловое скольжение вызывает появление фотофоретической силы и силы вязкого сопротивления среды. Когда обе эти силы уравниваются друг друга, частица начинает двигаться равномерно. Скорость равномерного движения частицы называется фотофоретической скоростью U_{ph} .

При теоретическом описании фотофореза будем предполагать, что процесс испарения капли квазистационарен и происходит при малых относительных перепадах температуры, а времена тепловой и диффузионной релаксации много меньше времени испарения капли. Будем также считать, что относительная концентрация C_{1e} молекул испаряющего вещества подчиняется условию $C_{1e} \ll 1$ ($C_{1e} = n_{1e}/n_e$, $C_{2e} = n_{2e}/n_e$, $C_{1e} + C_{2e} = 1$, $n_e = n_{1e} + n_{2e}$, где n_{1e}, n_{2e} – соответственно концентрация молекул паров испаряющегося вещества и молекул второго компонента газовой смеси, не поглощаемого поверхностью капли). При $C_{1e} \ll 1$ основное влияние на процесс переноса молекул оказывает молекулярная диффузия. В связи с этим считается, что испарение капли в случае $C_{1e} \ll 1$ протекает в диффузионном режиме [7]. Капля в процессе движения сохраняет сферическую форму. Это справедливо, если силы внешнего давления малы по сравнению с давлением, вызванным межфазовым (жидкость – газ) поверхностным натяжением. Тогда справедливо условие $\sigma/R \ll \mu_e U/R$. Здесь σ – коэффициент поверхностного натяжения на границе раздела капля – бинарная газовая смесь, U – абсолютная величина

скорости газовой смеси относительно капли. Движение капли происходит при малых числах Пекле и Рейнольдса и коэффициенты теплопроводности, диффузии, динамической и кинематической вязкости будем считать постоянными величинами. Задача решается гидродинамическим методом, т. е. решаются уравнения газовой динамики с соответствующими граничными условиями и капля образована однородным и изотропным по своим свойствам веществом.

Движение капли удобно описывать в сферической системе координат r, θ, φ , начало которой жестко связано с центром ее масс. Полярную ось $z = r \cdot \cos \theta$ направлена в сторону распространения однородного потока излучения с интенсивностью I_0 – степень неоднородности распределения энергии излучения в капле зависит от оптических констант материала капли (m_s) и параметра дифракции (x_α). Выражение для плотности энергии излучения в капле, трансформируемой в тепло, можно записать в виде [6,8]

$$q_i = \frac{4\pi n_k a_k}{n_0 \lambda_0} I_0 B_k, \quad (1)$$

где $m_k = n_k + iak$, $x_\alpha = 2\pi R/\lambda_0$, n_k – показатель преломления, a_k – показатель поглощения, n_0 – показатель преломления среды, B_k – функция координат, рассчитываемая по теории Ми [6-8].

Результаты численных расчетов величины B_k , приведенные в [6-8], показали, что неоднородность распределения поглощенной в капле энергии увеличивается с увеличением ее радиуса, наибольшая неоднородность поглощаемой энергии имеет место в направлении распространения излучения. С ростом радиуса капля происходит заметное увеличение доли энергии излучения, поглощенной в теневой полусфере. Это связано с фокусирующим действием среды. Следует отметить, что этот эффект возрастает с ростом показателя преломления капли n_k . С дальнейшим увеличением радиуса капля происходит смещение максимума поглощения из теневой в освещенную полусферу вследствие возрастания доли поглощения. Расчеты также показали, что с уменьшением коэффициента поглощения степень неоднородности поглощения возрастает.

Поскольку систему отсчета мы связали с центром масс движущейся капли, то наша задача сводится к анализу обтекания частицы бесконечным плоскопараллельным потоком со скоростью U_∞ и определенная в такой системе координат скорость газа на бесконечности равна с обратным знаком скорости фотофореа, $U_\infty = -U_{ph}$.

В рамках сформулированных допущений распределения массовой скорости U , давления P и температуры T и относительной концентрации первого

компонента C_{1e} подчиняются следующей системе уравнений [9,10]

$$\mu_e \Delta \mathbf{U}_e = \nabla P_e, \quad (\nabla \cdot \mathbf{U}_e) = 0, \quad (2)$$

$$\mu_i \Delta \mathbf{U}_i = \nabla P_i, \quad (\nabla \cdot \mathbf{U}_i) = 0, \quad (3)$$

$$\rho_e c_{pe} (\mathbf{U}_e \cdot \nabla) T_e = \lambda_e T_e, \quad (\mathbf{U}_e \cdot \nabla) C_{1e} = D_{12} \Delta C_{1e}, \quad (4)$$

$$\rho_i c_{pi} (\mathbf{U}_i \cdot \nabla) T_i = \lambda_i T_i + q_i. \quad (5)$$

Система уравнений (2-5) решалась со следующими граничными условиями в сферической системе координат [11,12]

$$r = R, \quad n_{2e} U_r^e + D_{12} \frac{n_e^2 m_1}{\rho_e} \left(\frac{\partial C_{1e}}{\partial r} + \frac{k_T}{T_e} \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) = 0, \quad (6)$$

$$n_{1e} U_r^e - D_{12} \frac{n_e^2 m_2}{\rho_e} \left(\frac{\partial C_{1e}}{\partial r} + \frac{k_T}{T_e} \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) = n_{1i} U_r^i, \quad (7)$$

$$U_r^e - U_r^i = K_{TS} \frac{\nu_e}{RT_e} \frac{\partial T_e}{\partial \theta} + K_{DS} \frac{D_{12}}{R} \frac{\partial C_{1e}}{\partial \theta}, \quad (8)$$

$$T_e = T_i, \quad \frac{n_{1e} - n_{1S}}{n_e} = 0, \quad (9)$$

$$-\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial r} + \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} = L \frac{n_e^2 m_1 m_2}{\rho_e} D_{12} \left(\frac{\partial C_{1e}}{\partial r} + \frac{k_T}{T_e} \frac{\partial T_e}{\partial r} \right), \quad (10)$$

$$\mu_e \left(\frac{\partial U_\theta^e}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U_r^e}{\partial \theta} - \frac{U_\theta^e}{r} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial \sigma}{\partial T_i} \frac{\partial T_i}{\partial \theta} = \mu_i \left(\frac{\partial U_\theta^i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U_r^i}{\partial \theta} - \frac{U_\theta^i}{r} \right), \quad (11)$$

$$r \longrightarrow \infty, \quad U_r^e = U_\infty \cos \theta, \quad U_\theta^e = -U_\infty \sin \theta, \\ P_e = P_{e\infty}, \quad T_e = T_{e\infty}, \quad C_{1e} = C_{1\infty}, \quad (12)$$

$$r \longrightarrow 0, \quad |U_\infty| \neq \infty, \quad T_i \neq \infty, \quad P_i \neq \infty. \quad (13)$$

Здесь U_r и U_θ – радиальная и касательная компоненты массовой скорости; $\rho_e = \rho_{1e} + \rho_{2e}$, $\rho_{1e} = n_{1e} m_1$, $\rho_{2e} = n_{2e} m_2$, n_{1e} , m_1 и n_{2e} , m_2 – концентрация и

масса первого и второго компонента бинарной газовой смеси; $\rho_i = n_{1i}m_1$, n_{1i} – концентрация молекул вещества капли; n_{1s} – концентрация насыщенных паров вещества капли, зависящая от T_i ; L – удельная теплота фазового перехода; σ , c_p , λ , μ , ν , D_{12} – коэффициенты поверхностного натяжения капли, удельная теплоемкость при постоянном давлении, теплопроводность, динамическая и кинематическая вязкость и диффузии соответственно; $k_T D_{12}$ – называется термодиффузией, а k_T – термодиффузионным отношением. Как известно [9], термодиффузией называется перенос компонент газовых смесей или растворов под влиянием градиента температуры. Если разность температур поддерживается постоянной, то в объеме смеси возникает градиент концентрации, что вызывает так же и обычную диффузию. В стационарных условиях при отсутствии потока вещества термодиффузия уравнивается обычной диффузией, и в объеме возникает разность концентраций, которая может быть использована для разделения изотопов. Термодиффузия в растворах называется эффектом Соре (по имени швейцарского химика Ш.Соре, впервые в 1879-81гг. исследовавшего термодиффузию). Свойства термодиффузионного молекулярного переноса массы бинарных газовых систем широко используется в технике, промышленности, в частности, при расчетах и оптимизации процессов разделения изотопов и процессов массообмена [4,9,16]. В настоящее время наиболее надежным методом исследования термодиффузии в газах следует считать экспериментальные измерения. Уравнения, отображающие зависимость термодиффузионной постоянной от состава и температуры, можно получить аппроксимацией экспериментальных данных независимых исследований различных авторов. Относительные погрешности экспериментальных данных принимаются по оценкам авторов работ с учетом существующего мнения о точности и достоверности используемых экспериментальных методов. Из экспериментальных методов наибольшее распространение получили двухобъемные аппараты, с помощью которых проведена большая часть исследований; коэффициент термодиффузии сильно зависит от межмолекулярного взаимодействия, поэтому его изучение позволяет исследовать межмолекулярные силы в газах. Далее индексами "e" и "i" отмечаются величины, относящиеся к газу и капле, индексом "s" обозначены значения физических величин, взятых при средней температуре капли, а индексом " ∞ " обозначены значения физических величин, характеризующие внешнюю среду в невозмущенном потоке.

В граничных условиях на поверхности неравномерно нагретой капли учтено: непроницаемость поверхности капли для второго компонента бинарной

газовой смеси, состоящее из суммы потоков конвективного, диффузионного и термодиффузионного, учтена в (6); условие (7) отражает непрерывность потока первого (летучего) компонента бинарной газовой смеси при фазовом переходе и состоящее слева из суммы потоков конвективного, диффузионного и термодиффузионного, а справа – конвективный радиальный поток первого компонента внутри капли; граничное условие (8) показывает, что разность касательных составляющих внешней U_θ^e и внутренней U_θ^i скорости на поверхности капли складывается из суммы теплового и диффузионного скольжений; условие непрерывности температуры и концентрации в (9); непрерывность радиального потока тепла учтена в (10) – слева стоит разность потоков тепла вне и внутри капли, а справа – теплота фазового превращения единицы массы с учетом объемной термодиффузии; непрерывность касательных составляющих тензора полных напряжений вне и внутри капли учтено в (11).

На большом расстоянии от капли, т. е. при $r \rightarrow \infty$, справедливы граничные условия (12), а конечность физических величин, характеризующих каплю при $r \rightarrow 0$, учтена в (13).

Обезразмерим уравнения (2-5) и граничные условия (6 - 13), вводя безразмерные координату, скорость и температуру следующим образом: $y_k = x_k/R$, $t = T/T_{e\infty}$, $\mathbf{V} = \mathbf{U}/U_\infty$.

При $Re = (\rho_e U_\infty R) / \mu_e \ll 1$ набегающий поток оказывает лишь возмущающее влияние и поэтому решение уравнений гидродинамики следует искать в виде

$$\mathbf{V}_e = \mathbf{V}_e^{(0)} + \varepsilon \cdot \mathbf{V}_e^{(1)} + \dots, \quad P_e = P_e^{(0)} + \varepsilon \cdot P_e^{(1)} + \dots \quad (\varepsilon = Re). \quad (14)$$

Решение уравнения, описывающее распределение температуры вне капли, будем искать методом сращиваемых асимптотических разложений [13]. Внутренние и внешние асимптотические разложения обезразмеренной температуры и относительной концентрации первого компонента представим как

$$C_e(y, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\varepsilon) C_{en}(y, \theta), \quad t_e^*(\xi, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n^*(\varepsilon) t_{en}^*(\xi, \theta),$$

$$t_e(y, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\varepsilon) t_{en}(y, \theta), \quad t_e^*(\xi, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n^*(\varepsilon) C_{en}^*(\xi, \theta), \quad (15)$$

где $\xi = \varepsilon y$ – "сжатая" радиальная координата [13], $y = r/R$, $f_0(\varepsilon) = 1$.

При этом требуется, чтобы $\frac{f_{n+1}}{f_n} \rightarrow 0$, $\frac{f_{n+1}^*}{f_n^*} \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

(16)

Недостающие граничные условия для внутреннего и внешнего разложений вытекают из условия тождественности продолжения асимптотических разложений того и другого в некоторую промежуточную область, т. е.

$$t_e(y \rightarrow \infty, \theta) = t_e^*(\xi \rightarrow \infty, \theta), \quad C_{1e}(y \rightarrow \infty, \theta) = C_{1e}^*(\xi \rightarrow \infty, \theta). \quad (17)$$

Асимптотическое разложение внутри капли, как показывают граничные условия на поверхности частицы, следует искать в виде, аналогичном (15)

$$t_i(y, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\varepsilon) t_{in}(y, \theta). \quad (18)$$

Относительно функций $f_n(\varepsilon)$ и $f_n^*(\varepsilon)$ предполагается, что их порядок их малости по ε увеличивается с ростом n .

С учетом сжатой радиальной координаты имеем следующее уравнение для безразмерной температуры t_e^* и относительной концентрации C_{1e}^*

$$Pr \left(V_r^* \frac{\partial t_e^*}{\partial \xi} + \frac{V_\theta^*}{\xi} \frac{\partial t_e^*}{\partial \theta} \right) = \Delta^* t_e^*, \quad t_e^* \rightarrow 1 \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow \infty, \quad (19)$$

$$\beta_1 \left(V_r^* \frac{\partial C_{1e}^*}{\partial \xi} + \frac{V_\theta^*}{\xi} \frac{\partial C_{1e}^*}{\partial \theta} \right) = \Delta^* C_{1e}^*, \quad C_{1e}^* \rightarrow C_{1\infty} \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow \infty. \quad (20)$$

и, соответственно,

$$\mathbf{V}_e^*(\xi, \theta) = \mathbf{n}_z + f_1^* \mathbf{V}_e^{(1)*}(\xi, \theta) + \dots \quad (21)$$

Здесь Δ^* – осесимметричный оператор Лапласа, полученный из Δ заменой y на ξ ; $V_r^* = \mathbf{V}_r^*(\xi, \theta)$, $V_\theta^* = \mathbf{V}_\theta^*(\xi, \theta)$, $Pr = (\mu_e C_{pe}) / \lambda_e$ – число Прандтля, \mathbf{n}_z – единичный вектор в направлении оси z .

Вид граничных условий вдали от неравномерно нагретой капли указывает на то, что выражения для компонент массовой скорости V_r и V_θ в нулевом приближении имеют вид

$$V_r = \cos \theta \cdot G(y), \quad V_\theta = -\sin \theta \cdot g(y), \quad (22)$$

где $G(y)$ и $g(y)$ – произвольные функции, зависящие от безразмерной радиальной координаты y .

2. Поля относительной концентрации первого компонента, температур вне и внутри капли. При нахождении фотофоретической силы и скорости ограничимся поправками первого порядка малости по ε . Чтобы их найти, нужно знать поля температур вне и внутри частицы и относительную концентрацию первой компоненты бинарной газовой смеси. Последовательно определяя нулевые и первые члены разложения, и учитывая условия сращивания внутренних и внешних разложений аналогично [14,15], получаем

$$\begin{aligned}
 t_e^*(\xi, \theta) &= t_{e0}^* + \varepsilon \cdot t_{e1}^*, & t_e(\xi, \theta) &= t_{e0} + \varepsilon \cdot t_{e1}, & t_i(\xi, \theta) &= t_{i0} + \varepsilon \cdot t_{i1}, \\
 C_{1e} &= C_{e0} + \varepsilon \cdot C_{e1}, & C_{1e}^* &= C_{e0}^* + \varepsilon \cdot C_{e1}^*, \\
 t_{e0} &= 1 + \frac{\Gamma_0}{y}, & t_{i0} &= B_0 + \frac{C_0}{y} + \int_1^y \frac{\psi_0}{y} dy - \frac{1}{y} \int_1^y \psi_0 dy, \\
 C_{e0} &= C_{1\infty} + \frac{M_0}{y}, & t_{e0}^* &= 1, & C_{e0}^* &= C_{1\infty}, \\
 t_{e1}^* &= \frac{\Gamma_0}{\xi} \exp \left\{ \frac{Pr}{2} \xi (x - 1) \right\}, & C_{e1}^* &= \frac{M_0}{\xi} \exp \left\{ \frac{\beta_1}{2} \xi (x - 1) \right\}, \\
 \beta_1 &= \frac{\mu_e}{\rho_e D_{12}}, & \beta_0 &= \frac{\rho_i c_{pi} \lambda_e}{\lambda_i c_{pe} \rho_e}, & \omega_1 &= M_0 \beta_1, \\
 \psi_n &= -\frac{R^2}{\lambda_i T_\infty} y^2 \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 q_i P_n(x) dx \quad (n \geq 0), & x &= \cos \theta, & & (23) \\
 t_{i1} &= N_3 y + \cos \theta \left\{ B_1 y + \frac{C_1}{y^2} + \frac{1}{3} \left[y \int_1^y \frac{\psi_1}{y^2} dy - \frac{1}{y^2} \int_1^y \psi_1 y dy \right] + \right. \\
 &+ \left. \frac{\beta_0 Pr}{3} \left[y \int_1^y (\Omega - C_0) \left(A_4 + \frac{A_3}{y^2} \right) dy - \frac{1}{y^2} \int_1^y (\Omega - C_0) (A_4 y^3 + A_3 y) dy \right] \right\}, \\
 \omega_0 &= \Gamma_0 Pr, & c_0 &= \frac{1}{4\pi R \lambda_i T_{e\infty}} \int q_i dV, & z &= \cos \theta, & J_1 &= \frac{1}{V} \int q_i z dV, \\
 C_1 &= \frac{R J_1}{3 \lambda_i T_{e\infty}} + \frac{\beta_0 Pr}{3} \int_1^y (\Omega - C_0) (A_4 y^3 + A_3 y) dy, \\
 t_{e1} &= \frac{\omega_0}{2y} (N_1 - y) + \cos \theta \left\{ \frac{\Gamma}{y^2} + \omega_0 \left(\frac{1}{2} - \frac{A_1}{4y^3} + \frac{A_2}{2y} \right) \right\},
 \end{aligned}$$

$$C_{e1} = \frac{\omega_1}{2y} (N_2 - y) + \cos \theta \left\{ \frac{M}{y^2} + \omega_1 \left(\frac{1}{2} - \frac{A_1}{4y^3} + \frac{A_2}{2y} \right) \right\},$$

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3, \quad \Omega = \int_1^y \psi_0 dy,$$

где интеграл $\int q_i z dV$ имеет смысл дипольного момента плотности тепловых источников. Интегрирование ведется по всему объему частицы.

Постоянные интегрирования можем найти с помощью граничных условий (6) - (11). В частности, для A_2 имеем

$$A_2 = -\frac{3/2 + \mu_e/\mu_i}{1 + \mu_e/\mu_i} + \varepsilon \frac{D_{12} n_e^2 m_1}{R U_\infty n_{2e} a_1 (1 + \mu_e/\mu_i)} \times$$

$$\times \left\{ a_3 \frac{R J_1}{\lambda_i T_{e\infty}} \left(\frac{n_{2e} \Delta_1}{D_{12} n_e^2 m_1 a_3} - \Delta_2 \right) + \frac{3a_4}{8} \frac{1 + 4\mu_e/3\mu_i}{1 + \mu_e/\mu_i} \left(\frac{a_2}{a_4} \frac{n_{2e} \Delta_1}{D_{12} n_e^2 m_1} - \Delta_2 \right) \right\},$$

где $M_0 = C_{10S} - C_{1\infty}$,

$$\Delta_1 = K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{e0}} + K_{DS} D_{12} C_{1S}^* + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i}, \quad \Delta_2 = \frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \left(1 + 2 \frac{\mu_e}{\mu_i} \right),$$

$$a_1 = 1 + 2 \frac{\lambda_e}{\lambda_i} + L \frac{n_e^2 m_1 m_2 D_{12}}{\rho_e \lambda_i T_{e\infty}} \left(2C_{1S}^* - \frac{k_T}{t_{e0}} \left(\frac{\Gamma_0}{t_{e0}} - 2 \right) \right),$$

$$a_2 = \omega_0 \left(\frac{\lambda_e}{\lambda_i} + L \frac{n_e^2 m_1 m_2 D_{12}}{\rho_e \lambda_i T_{e\infty}} \frac{k_T}{t_{e0}} \right) + \omega_1 L \frac{n_e^2 m_1 m_2 D_{12}}{\rho_e \lambda_i T_{e\infty}},$$

$$a_3 = \frac{k_T}{t_{e0}} \left(\frac{\Gamma_0}{t_{e0}} - 2 \right) - 2C_{1S}^*,$$

$$a_4 = \omega_1 \left(1 + 2 \frac{\lambda_e}{\lambda_i} \right) - \omega_0 \left(2C_{1S}^* \frac{\lambda_e}{\lambda_i} - \frac{k_T}{t_{e0}} \left(1 + \frac{\lambda_e \Gamma_0}{\lambda_i t_{e0}} \right) \right),$$

$$\Gamma_0 = \frac{C_0 - (C_{10S} - C_{1\infty}) L \frac{n_e^2 m_1 m_2 D_{12}}{\rho_e \lambda_i T_{e\infty}}}{\frac{\lambda_e}{\lambda_i} + L \frac{n_e^2 m_1 m_2 D_{12}}{\rho_e \lambda_i T_{e\infty}} \frac{k_T}{t_{e0}}}, \quad B_0 = 1 + \Gamma_0 - C_0.$$

Среднее значение температуры поверхности t_{iS} связано со средней относительной температурой t_{eS} и относительной концентрацией первого компонента бинарной газовой смеси C_{eS} соотношением (24), в котором $t_{eS} = t_{e0} (y = 1)$, $t_{iS} = t_{i0} (y = 1)$, $C_{eS} = C_{e0} (y = 1)$

$$t_{eS} = t_{iS}, \quad M_0 = C_{10S} - C_{1\infty},$$

$$\frac{\lambda_e}{\lambda_i} \Gamma_0 = C_0 - L \frac{n_e^2 m_1 m_2 D_{12}}{\rho_e \lambda_i T_{e\infty}} \frac{k_T}{t_{e0}} \left(M_0 + \frac{k_T}{t_{e0}} \Gamma_0 \right). \quad (24)$$

3. Выражения для силы и скорости фотофореза. Сила, действующая на каплю, определяется интегрированием тензора напряжений по ее поверхности и в сферической системе координат находится по формуле [9-10]

$$\mathbf{F}_z = -4\pi R \mu_e U_\infty A_2 \mathbf{n}_z. \quad (25)$$

Откуда видим, что сила, действующая на крупную сферическую каплю при малых относительных перепадах температуры в ее окрестности, будет складываться из силы вязкого сопротивления среды \mathbf{F}_μ , фотофоретической силы \mathbf{F}_{ph} и силы, обусловленной движением среды \mathbf{F}_{dh} ,

$$\mathbf{F}_z = \mathbf{F}_\mu + \varepsilon (\mathbf{F}_{ph} + \mathbf{F}_{dh}). \quad (26)$$

Здесь $\mathbf{F}_\mu = 6\pi R \mu_e f_\mu U_\infty \mathbf{n}_z$, $\mathbf{F}_{ph} = -6\pi R \mu_e f_{dh} J_1 \mathbf{n}_z$, $\mathbf{F}_{dh} = -6\pi R \mu_e f_{dh} \mathbf{n}_z$,

$$f_\mu = \left(1 + \frac{2\mu_e}{3\mu_i} \right) / \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i} \right),$$

$$f_{ph} = \frac{2}{3\lambda_i T_{e\infty} a_1 \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i} \right)} \left(\Delta_1 - a_3 \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \Delta_2 \right),$$

$$f_{dh} = a_2 \frac{1 + \frac{4\mu_e}{3\mu_i}}{4R a_1 \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i} \right)^2} \left(\Delta_1 - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{a_4}{a_2} \Delta_2 \right).$$

Приравнивая общую силу \mathbf{F}_z к нулю, получаем общее выражение для скорости фотофореза

$$\mathbf{U}_p = -\varepsilon (\mathbf{U}_{ph} + \mathbf{U}_{dh}), \quad (27)$$

где

$$\mathbf{U}_{ph} = \frac{2J_1}{3\lambda_i T_{e\infty} a_1 \left(1 + \frac{2\mu_e}{3\mu_i}\right)} \left(\Delta_1 - a_3 \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \Delta_2 \right) \mathbf{n}_z,$$

$$\mathbf{U}_{dh} = \frac{a_2 \left(1 + \frac{4\mu_e}{3\mu_i}\right)}{4R a_1 \left(1 + \frac{2\mu_e}{3\mu_i}\right) \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i}\right)} \left(\Delta_1 - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{a_4}{a_2} \Delta_2 \right) \mathbf{n}_z.$$

Выражения (26) и (27) позволяют оценивать общую силу, действующую на испаряющуюся крупную каплю сферической формы и общую скорость движения при неравномерном нагреве ее поверхности с учетом движения среды.

Рассмотрим предельные случаи полученных выше формул. В случае если мы не учитываем движение среды, т.е. не учитываем конвективные члены в уравнениях теплопроводности, то получаем

$$F_{dh} = -\frac{3\mu_e}{\lambda_i T_{e\infty} R^2 a_1 \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i}\right)} \left(\Delta_1 - a_3 \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \Delta_2 \right) \int q_i(r, \theta) z dV, \quad (28)$$

$$U_{ph} = -\frac{1}{2\pi R^3 \lambda_i T_{e\infty} a_1 \left(1 + \frac{2\mu_e}{3\mu_i}\right)} \left(\Delta_1 - a_3 \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \Delta_2 \right) \int q_i(r, \theta) z dV. \quad (29)$$

Эти формулы позволяют оценивать влияние летучести на силу и скорость фотофореза крупной сферической капли.

Если мы рассматриваем не испаряющуюся каплю, то $n_{1S} \rightarrow 0$, $L \rightarrow 0$, $C_{1S} \rightarrow 0$, $C_{1S}^* \rightarrow 0$ и, следовательно,

$$F_{dh} = -\frac{3\mu_e}{\lambda_i T_{e\infty} R^2 \left(1 + 2\frac{\lambda_e}{\lambda_i}\right) \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i}\right)} \times$$

$$\times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{1}{4\pi R \lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \int q_i dV - 2 \right) \Delta_2 \right] \times$$

$$\times \int q_i(r, \theta) z dV, \quad (30)$$

$$U_{ph} = -\frac{1}{2\pi R^3 \lambda_i T_{e\infty} \left(1 + 2\frac{\lambda_e}{\lambda_i}\right) \left(1 + \frac{2\mu_e}{3\mu_i}\right)} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{1}{4\pi R \lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \int q_i dV - 2 \right) \Delta_2 \right] \times \\ & \times \int q_i(r, \theta) z dV. \quad (31) \end{aligned}$$

Если в формулах (30) - (31) перейти к пределу $\mu_i \rightarrow \infty$, $\sigma \rightarrow 0$, то получаем выражения для силы и скорости фотофореза твердой крупной аэрозольной частицы сферической формы [4]

$$\begin{aligned} F_{dh} &= - \frac{3\mu_e}{\lambda_i T_{e\infty} R^2 \left(1 + 2 \frac{\lambda_e}{\lambda_i} \right)} \times \\ & \times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{1}{4\pi R \lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \int q_i dV - 2 \right) \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \right) \right] \times \\ & \times \int q_i(r, \theta) z dV, \quad (32) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_{ph} &= - \frac{1}{2\pi R^3 \lambda_i T_{e\infty} \left(1 + 2 \frac{\lambda_e}{\lambda_i} \right)} \times \\ & \times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{1}{4\pi R \lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \int q_i dV - 2 \right) \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \right) \right] \times \\ & \times \int q_i(r, \theta) z dV. \quad (33) \end{aligned}$$

Из формул (28) - (33) видно, что величина и направление силы и скорости фотофореза определяется величиной и направлением дипольного момента плотности тепловых источников $\int q_i(r, \theta) z dV$.

В тех случаях, когда дипольный момент отрицательный (когда большая часть тепловой энергии выделяется в той части частицы, которая обращена к потоку излучения), частица движется в направлении падающего излучения. Если дипольный момент положительный (большая часть тепловой энергии выделяется в теневой части частицы), частица будет двигаться навстречу направления распространения излучения.

Плотность тепловых источников при увеличении интенсивности электромагнитного излучения возрастает линейно. Отсюда следует, что фотофоретическая сила и скорость с увеличением интенсивности электромагнитного излучения возрастает линейно.

При постоянной величине дипольного момента, увеличение радиуса R капли приводит к уменьшению фотофоретической силы и скорости обратно пропорционально R_2 и R_3 соответственно.

Фотофоретическая сила и скорость существенно зависят также от теплопроводности вещества капли. При $\lambda_i \rightarrow \infty$ (высоко теплопроводные частицы) сила и скорость фотофореза, при фиксированной величине дипольного момента, стремятся к нулю.

Чтобы оценить, какой вклад в силу и скорость фотофореза оказывает влияние движения среды (учет конвективных членов в уравнении теплопроводности), необходимо конкретизировать природу тепловых источников. Рассмотрим наиболее простой случай, когда частица поглощает излучение как черное тело. В этом случае поглощение происходит в тонком слое толщиной $\delta R \ll R$, прилегающем к нагреваемой части поверхности частицы.

При этом плотность тепловых источников внутри слоя толщиной δR определяется с помощью формулы

$$q_i = \begin{cases} -\frac{I_0}{\delta R} \cos \theta, & \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi, \quad R - \delta R \leq r \leq R, \\ 0, & 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \end{cases}$$

где I_0 – интенсивность падающего излучения. В этом случае интегралы легко считаются

$$\int_V q_i dV = \pi R^2 I_0, \quad \int_V q_i z dV = -\frac{2}{3} \pi R^3 I_0, \quad J_1 = -\frac{I_0}{2}$$

и мы получаем следующие выражения для фотофоретической силы и скорости абсолютно черных крупных нелетучих капель сферической формы с учетом влияния движения среды

$$F_{dh} = \frac{2\pi R_e \mu_e I_0}{\lambda_i T_{e\infty} \left(1 + 2\frac{\lambda_e}{\lambda_i}\right) \left(1 + \frac{\mu_e}{\mu_i}\right)} \times \\ \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2 k_T}{n_{2e} t_{eS}} \left(\frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} - 2 \right) \Delta_2 - \right]$$

$$-\frac{3}{16} Pr \frac{1 + 4\mu_e/3\mu_i}{1 + \mu_e/\mu_i} \left(K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i} - \frac{D_{12}m_1n_e^2 k_T}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_e} + \frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \right) \Delta_2 \right) \Big], \quad (34)$$

$$U_{ph} = \frac{I_0}{3\lambda_i T_{e\infty} \left(1 + 2\frac{\lambda_e}{\lambda_i}\right) \left(1 + \frac{2\mu_e}{3\mu_i}\right)} \times$$

$$\times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i} - \frac{D_{12}m_1n_e^2 k_T}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} - 2 \right) \Delta_2 - \right.$$

$$\left. - \frac{3}{16} Pr \frac{1 + 4\mu_e/3\mu_i}{1 + \mu_e/\mu_i} \left(K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} + \frac{R}{3\mu_i} \frac{\partial \sigma}{\partial t_i} - \frac{D_{12}m_1n_e^2 k_T}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_e} + \frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \right) \Delta_2 \right) \right]. \quad (35)$$

Если в формулах (34) - (35) устремить $\mu_i \rightarrow \infty$, $\sigma \rightarrow 0$, то получаем выражения для силы и скорости фотофореза абсолютно черной твердой крупной аэрозольной частицы сферической формы

$$F_{dh} = \frac{2\pi R_e \mu_e I_0}{\lambda_i T_{e\infty} \left(1 + 2\frac{\lambda_e}{\lambda_i}\right)} \times$$

$$\times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} - \frac{D_{12}m_1n_e^2 k_T}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} - 2 \right) \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{3}{16} Pr \left(K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} - \frac{D_{12}m_1n_e^2 k_T}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_e} + \frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \right) \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \right) \right) \right], \quad (36)$$

$$U_{ph} = \frac{I_0}{3\lambda_i T_{e\infty} \left(1 + 2\frac{\lambda_e}{\lambda_i}\right)} \times$$

$$\times \left[K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} - 2 \right) \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \right) - \right. \\ \left. - \frac{3}{16} Pr \left(K_{TS} \frac{\nu_e}{t_{eS}} - \frac{D_{12} m_1 n_e^2}{n_{2e}} \frac{k_T}{t_{eS}} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_e} + \frac{RI_0}{4R\lambda_e t_{eS} T_{e\infty}} \right) \left(\frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{2\rho_e} \right) \right) \right]. \quad (37)$$

Из (34) - (37) видно, что вклад движения среды на силу и скорость фотофореза пропорционален ω_0 , а поскольку мы рассматриваем диффузионный режим испарения, то ω_0 приближённо равно произведению числа Прандтля на относительный перепад температуры в окрестности испаряющейся капли, $\omega_0 \approx \Gamma_0 Pr$. Учитывая, что в газах число Прандтля порядка единицы и перепад температуры мал, то вклад движения среды (учет конвективных членов в уравнении теплопроводности) в чистый фотофорез будет небольшим. Это хорошо видно, когда мы переходим к абсолютно черному телу. В случае твердой частицы мы получили выражение $(1 - 3Pr/16)$, т.е. вклад около 19%.

Литература

1. Ehrenhaft F. Die photophorese // Physik. Zeitschr. – 1917. – 17. – S.353-358.
2. Береснев С.А., Коваль Ф.Д., Кочнева Л.Б., Суетин П.Е., Черемисин А.А. О возможности фотофоретической левитации частиц в стратосфере // Оптика атмосф. и океана. – 2003. – 16. – 1. – С.52-57.
3. Вальтберг А.Ю. Теоретические основы охраны атмосферного воздуха от загрязнения промышленными аэрозолями / А.Ю.Вальтенберг, П.М.Исянов, Ю.И.Яламов. - Санкт-Петербург: Ниногаз-фильтр, 1993. – 235 с.
4. Галоян В.С. Динамика капель в неоднородных вязких средах / В.С.Галоян, Ю.И.Яламов. – Ереван: Луйс, 1985. – 208с.
5. Щукин Е.Р. Избранные вопросы физики аэрозолей. Учебное пособие для студентов и аспирантов / Е.Р.Щукин, Ю.И.Яламов, З.Л.Шулиманова. – М.: МПУ, 1992. – 297с.

6. Ковалев Ф.Д. Экспериментальное исследование фотофореза в газах: Дис. канд. физ.-мат. наук: 01.04.14 / Ф.Д. Ковалев. – Урал. гос. ун-т. УГУ, 2003. – 133с.
7. Волковицкий О.А. Распространение интенсивного лазерного излучения в облаках / О.А.Волковицкий, Ю.С.Седунов, Л.П.Семенов. – Ленинград: Гидрометеоздат, 1982. – 312с.
8. Борен К. Поглощение и рассеяние света малыми частицами / К.Борен, Д.Хафмен. – М.: Мир, 1986. – 660с.
9. Ландау Л.Д. Гидродинамика / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. – М.: Наука, 1986. – 736с.
10. Хапфель Дж. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса / Дж.Хапфель, Г.Бреннер. – М.: Мир, 1960. – 630с.
11. Яламов Ю.И., Юшканов А.А. Диффузионное скольжение бинарной газовой смеси вдоль искривленной поверхности // ДАН СССР. – 1977. – 237;2. – С.303-306.
12. Яламов Ю.И., Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. О граничных условиях при обтекании неоднородно нагретым газом сферической поверхности малой кривизны // ДАН СССР. – 1980. – 254;2. – С.1047-1050.
13. Ван-Дайк М. Методы возмущений в механике жидкости / М.Ван-Дайк. – М.: Мир, 1967. – 310с.
14. Acrivos A., Taylor T.D. Heat and mass transfer from single spheres in stokes flow // J.phys.of fluids. – 1963. – 5;4. – P.387-394.
15. Малай, Н.В. Обтекание неравномерно нагретой капли потоком жидкости при произвольных перепадах температуры в ее окрестности / ИФЖ. – 2000. – 73;4. – С.1-11.
16. Брюханов О.Н. Тепломассообмен / О.Н.Брюханов, С.Н.Шевченко. – М.: Ассоциация строительных вузов; 2005. – 460с.

PHOTOPHORESIS OF THE LARGE FLYING SPHERICAL DROP AT SMALL DIFFERENCE TEMPERATURES IN ITS VICINITY TAKING INTO ACCOUNT THERMODIFFUSION

¹⁾N.V. Malay, ²⁾E.R. Shchukin, ¹⁾A.V. Limanskaya

¹⁾Belgorod State University,
Studencheskaya St., 14, Belgorod, 308007, Russia,
e-mail: malay@bsu.edu.ru, limanskayaanna@mail.ru

²⁾Institute of High Temperature RAS, e-mail: evgrom@yandex.ru

At the Stokes approximation, it is theoretically described the stationary motion of large evaporating aerosol spherical particle in the binary gas mixture on which acts the powerful electromagnetic radiation. It is supposed that the average temperature of the particle surface differs insignificantly from the temperature of gaseous medium. On the basis of the solution of gas dynamics equations, the analytical expression of the force and the velocity of photophoresis are obtained when the medium influence and the thermophoresis are taken into account.

Key words: photophoresis in gases.

АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ РЕАЛИЗАЦИЙ НОРМАЛЬНОГО МАРКОВСКОГО ПОЛЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ТОРА

А.С. Мазманишвили

Сумской государственный университет,
Сумы, Украина, e-mail: mazmanishvili@gmail.com

Рассмотрена задача построения алгоритма численной генерации нормальных двумерных марковских полей на цилиндрической поверхности и на поверхности тора. Эти поля обладают свойством однородности по отношению к сдвигам вдоль поверхностей, соответственно, цилиндра и тора. Описаны возможные перспективы применения нормальных марковских полей, реализованных на поверхности тора.

Ключевые слова: алгоритм, нормальное марковское поле, случайная реализация, тор, цилиндр.

1. Введение

Задачи численного стохастического моделирования начинаются с синтеза алгоритмов генерации случайных величин с необходимыми для данной задачи свойствами. При моделировании случайных полей, принимается допущение о евклидовой структуре пространства, в котором разыгрываются случайные события. Это допущение приводит к тому, что эти поля определяются на отрезке, в прямоугольнике, или, наконец, в многомерном гиперкубе [1, 2]. По этой причине, как правило, разрабатываемые алгоритмы опираются на прямоугольную декартову систему даже в тех случаях, когда исследуемый объект мало удобен при описании в этой системе. Именно такая ситуация имеет место при построении случайных полей на торе или цилиндре [2]. В то же время, алгоритмы генерации двумерных марковских полей, представленные в [3, 4], таковы, что они приспособлены только для генерации случайных полей, задаваемых на прямоугольнике, стороны которого параллельны декартовым осям на плоскости. Однако, в задачах машиностроения [5], технической электродинамики [6], навигации [7] и других в большинстве объекты не являются плоскими или прямоугольными, и их описание в прямоугольной декартовой системе координат неестественно и, вообще говоря, приводит к неудовлетворительным результатам.

Настоящая работа посвящена попытке построения алгоритма численной генерации нормального марковского случайного поля на поверхности тора. Поперечными сечениями такого поля, реализующимися вдоль большого радиуса R тора, являются марковские процессы Орнштейна-Уленбека, определённые на отрезке, равном длине соответствующей окружности, а затем продолженные периодически на всю числовую ось изменения угловой координаты (т.н. "броуновский мост"). Сечениями же случайного поля, которые реализуются на окружности заданного малого радиуса тора r , являются случайные процессы типа броуновского моста, построенные по такой же схеме но с периодом, равным соответствующей длине окружности. Тогда, внутри замкнутого прямоугольника, накрывающего тор, реализуется стационарное марковское гауссовское поле. В нашей работе построение алгоритма численной реализации указанного случайного поля основывается на иерархическом принципе. При этом на нижнем уровне иерархии используется стандартный генератор нормального "белого" шума $u(t)$ с интенсивностью (среднем квадратичным отклонением) σ . На его основе строятся случайные реализации процессов вдоль образующих тора. Последовательное заполнение зацепленными броуновскими мостами и позволяет сгенерировать численно реализации марковского поля на поверхности тора.

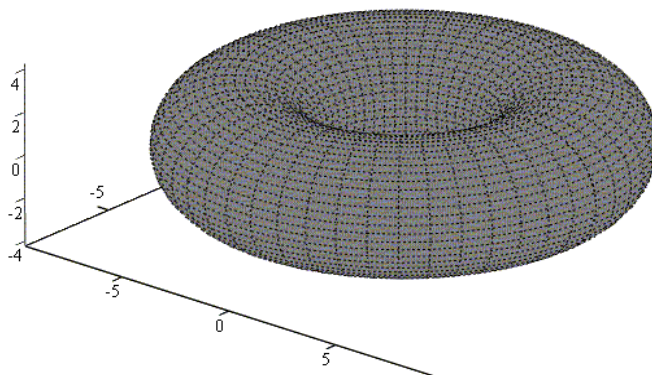


Рис. 1: Идеальный недеформированный тор с параметрами: $R = 6$, $r = 3$, $N = 40$, $M = 40$.

2. Алгоритм генерации нормальных двумерных марковских полей на поверхностях цилиндра и тора

Обозначим Δ_x – величину шага вдоль оси x на плоскости при численной реализации случайного поля, а Δ_y – величину шага вдоль оси y . Соответственно, N – число узлов по x , а M – число узлов вдоль оси y . Обозначим H –

случайное поле, которое является проекцией рассматриваемого нами случайного поля на совокупность узлов $\{h_{n,m}\}$, $n = 0 \div N$, $m = 0 \div M$. Обозначим, далее, ν_x, ν_y – декременты затухания нормального марковского поля, соответственно, вдоль продольной и поперечной координатных осей. Корреляторы этого поля в каждом двух соседних узлах равны

$$p = \exp(-\nu_x \Delta_x), \quad q = \exp(-\nu_y \Delta_y). \quad (1)$$

Рассмотрим сначала сечение случайного поля при $y = 0$, когда $m = 0$. Совместная плотность распределения вероятностей случайных значений поля в узлах с номерами $n = 0 \div N$ имеет, согласно [3, 5], вид

$$f_H(\{h_{n,0}\}) = \frac{1}{[2\pi\sigma^2(1-p^2)]^{N/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2(1-p^2)} \sum_{n=1}^N (h_{n,0} - ph_{n-1,0})^2 \right\}. \quad (2)$$

При этом справедливо следующее правило нумерации, обеспечивающее периодичность случайного поля $h_{N,0} = h_{0,0}$, $h_{N+1} = h_1$ и т.д. Пусть $u_{n,0}$ – генератор белого шума в рассматриваемых целочисленных точках, обладающий нулевым средним и $\langle u_{n,0}^2 \rangle = \sigma^2$, $n = 1, \dots, N$. Тогда из вида квадратичной формы в показателе экспоненты в плотности (2) следует система связей

$$h_{n,0} = ph_{n-1,0} + \alpha u_{n,0}, \quad n = 1, \dots, N \quad (3)$$

с постоянной

$$\alpha = \sqrt{(1-p^2)(1-p^{2N})^{-1}}, \quad (4)$$

которая необходима для нормировки вторых моментов поля. Набор значений поля в нулевом по x сечении ($m = 0$) может быть выражен явно через величины $u_{n,0}$ следующим образом

$$\begin{aligned} h_{1,0} &= \alpha (u_{1,0} + pu_{2,0} + p^2u_{3,0} + \dots + p^{N-1}u_{N,0}), \\ h_{2,0} &= \alpha (p^{N-1}u_{1,0} + u_{2,0} + pu_{3,0} + \dots + p^{N-2}u_{N,0}), \\ h_{3,0} &= \alpha (p^{N-2}u_{1,0} + p^{N-1}u_{2,0} + u_{3,0} + \dots + p^{N-3}u_{N,0}), \\ &\dots \\ h_{N,0} &= \alpha (pu_{1,0} + p^2u_{2,0} + p^3u_{3,0} + \dots + u_{N,0}). \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, на основе (5), построен броуновский мост при $n = 0$. При

выбранном значении α из (2) и (5) следуют выражения для безусловных средних

$$\langle h_{n,0} h_{n+k,0} \rangle = p^k \sigma^2, \quad k = 0, \dots, N. \quad (6)$$

Из формулы (6) вытекает свойство стационарности броуновского моста в нулевом сечении.

Рассмотрим сечение поля при $y = \Delta_y$, т.е. при $m = 1$. При фиксированном значении в нулевом сечении вдоль оси y , совместная плотность распределения вероятностей случайных значений поля имеет вид [3, 5]

$$f_H(\{h_{n,1}\}) = [2\pi\sigma^2(1-p^2)(1-q^2)]^{-N/2} \exp\left\{-\frac{Q_1}{2\sigma^2(1-p^2)(1-q^2)}\right\}. \quad (7)$$

где Q_1 – квадратичная форма относительно $\{h_{n,1}\}$

$$Q_1 = (h_{1,1} - ph_{0,1} - qh_{1,0} + pqh_{0,0})^2 + (h_{2,1} - ph_{1,1} - qh_{2,0} + pqh_{1,0})^2 + \dots \\ \dots + (h_{N,1} - ph_{N-1,1} - qh_{N,0} + pqh_{N-1,0})^2. \quad (7a)$$

При этом также действует циклическое правило нумерации $h_{N,1} = h_{0,1}$ и т.д. Из вида квадратичной формы (7a) вытекает, что значение поля $h_{n,1}$ связано с тремя "предыдущими" значениями. Тогда на основе плотности (7) можно прийти к следующей системе связей для броуновского моста в первом сечении

$$h_{n,1} = ph_{n-1,1} + qh_{n,0} - pqh_{n-1,0} + \alpha h_{n,1}, \quad n = 1, \dots, N. \quad (8)$$

Из (8) видно, что система величин $s_{n,1} = h_{n,1} - ph_{n,0}$, где $n = 1, \dots, N$, подчиняется тем же соотношениям, что и величины (3). Следовательно, два шага вычислений

$$s_{1,1} = \alpha (u_{1,1} + pu_{2,1} + p^2u_{3,1} + \dots + p^{N-1}u_{N,1}), \\ s_{2,1} = \alpha (p^{N-1}u_{1,2} + pu_{2,2} + p^2u_{3,2} + \dots + p^{N-2}u_{N,2}), \\ s_{3,1} = \alpha (p^{N-2}u_{1,3} + p^{N-1}u_{2,3} + pu_{3,3} + \dots + p^{N-3}u_{N,3}), \\ \dots \\ s_{N,1} = \alpha (pu_{1,N} + p^2u_{2,N} + p^3u_{3,N} + \dots + u_{N,N}). \quad (9)$$

и

$$h_{n,1} = ph_{n,0} + s_{n,1}, \quad n = 1, \dots, N \quad (10)$$

дадут искомый набор значений броуновского моста в первом сечении.

Рассмотрим сечение за номером m . Для него плотность распределения значений поля в узлах (n, m) следующая:

$$f_H(\{h_{n,m}\}) = [2\pi\sigma^2(1-p^2)(1-q^2)]^{-N/2} \exp\left\{-\frac{Q_m}{2\sigma^2(1-p^2)(1-q^2)}\right\}, \quad (11)$$

где Q_m – квадратичная форма относительно $\{h_{n,m}\}$,

$$Q_m = (h_{1,m} - ph_{0,m} - qh_{1,m-1} + pqh_{0,m-1})^2 + \\ + (h_{2,m} - ph_{1,m} - qh_{2,m-1} + pqh_{1,m-1})^2 + \dots \\ \dots + (h_{N,m} - ph_{N-1,m} - qh_{N,m-1} + pqh_{N-1,m-1})^2. \quad (11a)$$

Теперь, если в (9) и (10) везде заменить в y -ом индексе 0 на $m-1$ и 1 на m , то получим алгоритм нахождения набора значений броуновского моста в m -ом сечении. А именно, для произвольного m -го сечения заполнение его узлов осуществляется следующими двумя шагами:

$$s_{1,m+1} = \alpha (u_{1,m} + pu_{2,m} + p^2u_{3,m} + \dots + p^{N-1}u_{N,m}), \\ s_{2,m+1} = \alpha (p^{N-1}u_{1,m} + pu_{2,m} + p^2u_{3,m} + \dots + p^{N-2}u_{N,m}), \\ s_{3,m+1} = \alpha (p^{N-2}u_{1,m} + p^{N-1}u_{2,m} + pu_{3,m} + \dots + p^{N-3}u_{N,m}), \quad (12) \\ \dots \\ s_{N,m+1} = \alpha (pu_{1,m} + p^2u_{2,m} + p^3u_{3,m} + \dots + u_{N,m}).$$

и

$$h_{n,m} = ph_{n,m-1} + s_{n,m}, \quad n = 1, \dots, N. \quad (13)$$

Используя векторно-матричные обозначения, выражения (9) и (11) можно записать в компактной форме, введя циркулярные матрицы [9].

Объединяя формулу (5) и M раз повторенные формулы (11) и (12), получим итоговый алгоритм генерации значений поля на прямоугольнике, накрывающем поверхность цилиндра и образованном из $N \times (M+1)$ узлов с учетом их периодичности вдоль оси x . При выбранном значении α , из этих формул, плотностей (2), (7) и правила нумерации, учитывающего периодичность, получаем для математических ожиданий

$$\langle h_{n,m}h_{n+k,m+j} \rangle = p^k q^j \sigma^2, \quad k, j = 1, \dots, N, \quad \langle h_{n,m}^2 \rangle = \sigma^2. \quad (14)$$

Таким образом, во всех сечениях, сгенерированное на цилиндрической поверхности поле характеризуется свойствами однородности. Свойство марковости непосредственно вытекает из вида плотности условных вероятностей перехода (7). Построенное на цилиндре поле обладает свойствами нормальности и марковости в том смысле, что плотности условных вероятностей перехода имеют гауссовскую форму вдоль выбранных направлений.

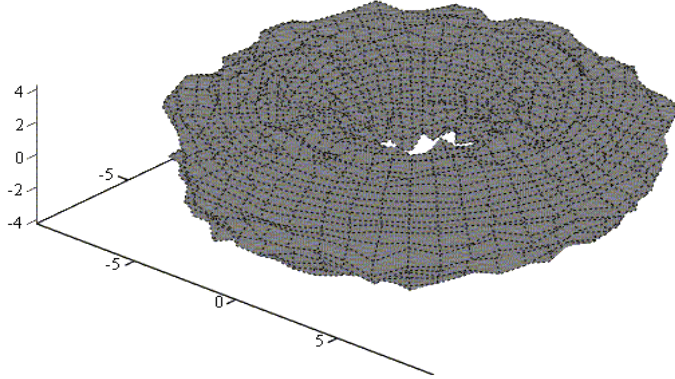


Рис. 2: Вид сбоку сгенерированного случайного поля на торе с параметрами: $p = 0.5$, $q = 0.5$, $\sigma = 0.2$ в виде случайной деформации тора, пропорциональной значению поля в каждой из точек. Сеткой показана связь случайных процессов в соседних узлах.

Теперь, с целью построения случайного поля на поверхности тора, осуществим замыкание построенного нами поля на поверхности цилиндра вдоль оси y . Заметим, что если в выражениях, описывающих замыкание вдоль оси x , везде выполнить замены по правилу $\{N \Rightarrow M, p \Rightarrow q\}$, то будет получено замыкание вдоль оси y . А именно, для произвольного n -го сечения заполнение его узлов осуществляется следующими двумя шагами:

$$\begin{aligned}
 t_{n+1,1} &= \beta (u_{n,1} + qu_{n,2} + q^2u_{n,3} + \dots + q^{M-1}u_{n,M}) , \\
 t_{n+2,2} &= \beta (q^{N-1}u_{n,1} + qu_{n,2} + q^2u_{n,3} + \dots + q^{M-2}u_{n,M}) , \\
 t_{n+1,3} &= \beta (q^{M-2}u_{n,1} + q^{M-1}u_{n,2} + qu_{n,3} + \dots + q^{M-3}u_{n,M}) , \\
 &\dots \\
 t_{n+1,M} &= \beta (qu_{n,1} + q^2u_{n,2} + q^3u_{n,3} + \dots + u_{n,M})
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

и

$$h_{n,m} = qh_{n-1,m} + t_{n,m} , \quad m = 1, \dots, M . \tag{16}$$

При этом введена новая нормировочная постоянная, необходимая для сохранения вторых моментов амплитуды вещественного поля,

$$\beta = \sqrt{(1 - q^2)(1 - q^{2M})^{-1}}. \quad (17)$$

В результате указанного замыкания будет построено случайное поле на поверхности цилиндра, ориентированного вдоль оси x .

Совместное действие двух замыканий приведет к построению стохастического поля на поверхности тора. При этом для сохранения вторых моментов значений поля должна быть использована новая нормировочная постоянная

$$\gamma = \alpha\beta = \sqrt{(1 - p^2)(1 - p^{2N})^{-1}(1 - q^2)(1 - q^{2M})^{-1}}. \quad (18)$$

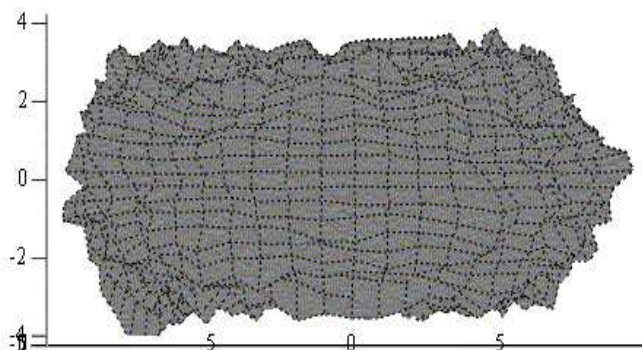


Рис. 3: Сгенерированная случайная реализация поля на торе (вид сбоку).

3. Применение алгоритмов генерации нормальных двумерных марковских полей на поверхностях цилиндра и тора

Рассмотрим геометрическую интерпретацию нормального двумерного марковского поля на цилиндрической и торической поверхностях. Тор характеризуется двумя радиусами – азимутальным R и радиусом r кругового сечения плоскостью, проходящей через центр тора перпендикулярно к азимутальной плоскости. Соответственно при заданных R и r уравнения, определяющие тор, можно параметризовать с помощью двух азимутальных углов: φ – угол в плоскости XOY , проходящей перпендикулярно оси OZ , и ψ – фазовый угол кругового сечения. Задав сетку из $N \times M$ узлов, множество узлов на торе

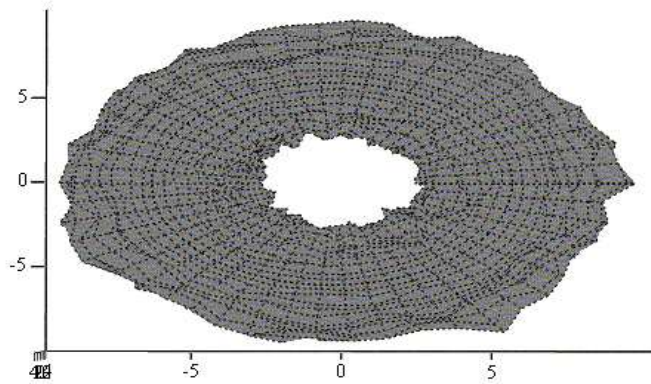


Рис. 4: Сгенерированная случайная реализация поля на торе (вид сверху).

можно определить формулами

$$\begin{aligned} X_{n,m} &= (R + r \sin \psi_n) \cos \varphi_m, \\ Y_{n,m} &= (R + r \sin \psi_n) \sin \varphi_m, \\ Z_{n,m} &= r \cos \psi_m. \end{aligned} \quad (19)$$

Наложение случайного поля H со случайными значениями $\{h_{n,m}\}$ в узлах выбранной сетки осуществляется на основе выражений

$$\begin{aligned} X_{n,m} &= [R + (r + h_{n,m}) \sin \psi_n] \cos \varphi_m, \\ Y_{n,m} &= [R + (r + h_{n,m}) \sin \psi_n] \sin \varphi_m, \\ Z_{n,m} &= (r + h_{n,m}) \cos \psi_m. \end{aligned} \quad (20)$$

Случайное поле H , синтезированное в узлах сетки, стационарно, поскольку для него, с учетом нормировки (15), справедливо соотношение (13), гарантирующее инвариантность средних относительно сдвигов вдоль координатных осей. При программировании оказываются более удобными аналоги формул (2), (9), (10), (12), выполненные в терминах векторов и циркулярных матриц [9]. Из рисунков 2-4 можно заметить самосогласованное поведение значений поля, изменение сечений – случайных процессов, а также их связь в соседних узлах.

5. Выводы

Таким образом, иерархический подход синтеза реализаций случайного поля на двумерной поверхности дает возможность численно генерировать марковские поля на поверхности тора. По существу развиваемый метод отличается от метода генерации полей на плоскости [9] только действием двойного правила периодичности, а в роли стационарного распределения вероятностей выступают броуновские мосты. Область применения подобных случайных полей достаточно широка. Они возникают всякий раз, когда необходим учет случайного изменения некоторой "идеальной" поверхности. Недостатком реализованного подхода является неаналитическое введение азимутальных периодичностей броуновских мостов. Возможность применения подобного подхода для пространственных тел более сложной структуры, например, таких как сфера, остается открытой.

Литература

1. Бусленко Н.П. Метод статистических испытаний / Н.П.Бусленко, Ю.А.Шрейдер. – М.: Физматгиз,1961. – 280с.
2. Харин Ю.С. Практикум на ЭВМ по математической статистике / Ю.С.Харин, М.Д.Степанова. – Минск: "Университетское", 1987. – 304с.
3. Nabibi A. Two-Dimensional Bayesian Estimate of Image // Proc. IEEE. – 1972. – 60;7. – P.878-883.
4. Хусу А.П. Шероховатость поверхностей / А.П.Хусу, Ю.Р.Витенберг, В.А.Пальмов. – М.: Наука,1975. – 344с.
5. Шифрин Я.С. Вопросы статистической теории антенн / Я.С.Шифрин. – М.: Советское радио,1970. – 384с.
6. Ярлыков М.С. Статистическая теория навигации / М.С.Ярлыков. – М.: Радио и связь,1985. – 344с.
7. Рытов С.М. Введение в статистическую радиофизику / С.М.Рытов. – М.: Наука,1966. – 404с.
8. Мазманишвили А.С., Щербань В.Е. Моделирование марковских случайных последовательностей и алгоритм генерации однородного двумерного марковского поля // Электронное моделирование. – 1996. – 18;2. – С.93-95.

9. Воеводин В.В. Матрицы и вычисления / В.В.Воеводин, Ю.А.Кузнецов. – М.: Наука. – 1984. - 320с.
10. Мазманишвили А.С. Алгоритм генерации нормального марковского поля на поверхности идеального цилиндра // Электронное моделирование. – 1998. – 20;6. – С.65-69.

THE GENERATION ALGORITHM FOR RANDOM REALIZATIONS OF THE NORMAL MARKOVIAN FIELD ON TORUS SURFACE

A.S.Mazmanishvili

Sumy State University, Sumy, Ukraine, e-mail: mazmanishvili@gmail.com

The paper deals with the generation problem of normal two-dimensional Markovian fields on cylindrical and torus surfaces. The generation algorithm for such fields is developed. Generated fields are homogeneous. The numerical example of generated field is given.

Key words: algorithm, normal markov field, random realization, torus, cylinder.

О ПОЛЕ ТЕМПЕРАТУРЫ, ВОЗНИКАЮЩЕМ ПРИ ДВИЖЕНИИ НАГРЕТОЙ ЧАСТИЦЫ В ВЯЗКОЙ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ГАЗООБРАЗНОЙ СРЕДЕ

Н.В. Малай, А.В. Глушак

Белгородский государственный университет,
ул. Победы 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: malay@mail.ru

В приближении Стокса, получено распределение температуры в окрестности неравномерно нагретой крупной частицы сферической формы. Используя метод, сращиваемых асимптотических разложений, учтено влияния движения газообразной среды на поле температуры. При решении конвективного уравнения теплопереноса учитывался степенной вид зависимости коэффициентов молекулярного переноса (вязкости и теплопроводности) и плотности газообразной среды от температуры.

Ключевые слова: поле температуры, метод сращиваемых асимптотических разложений.

Введение. Значимость процесса теплообмена, как в природе, так и в технике определяется, прежде всего, тем, что свойства тел самым существенным образом зависят от их теплового состояния, которое в свою очередь само определяется условиями теплообмена [1]. Эти условия оказывают существенное влияние на процессы изменения состояния вещества, механические, магнитные и другие свойства тел. Кроме того при проектировании экспериментальных установок, в которых необходимо обеспечить направленное движение нагретых частиц; при разработке методов тонкой очистки газов от аэрозольных частиц; при математическом моделировании процесса осаждения частиц в разнотемпературных плоскопараллельных каналах и т.п. необходимо знать поле температуры в их окрестности. В случае малых относительных перепадов температуры в окрестности частицы, т.е. когда $(T_S - T_{e\infty})/T_{e\infty} \ll 1$ (T_S – средняя температура поверхности частицы, $T_{e\infty}$ – температура жидкости вдали от нее) в научной литературе имеется достаточно количество работ посвященных этой тематике, например, [2, 3].

В данной работе рассмотрен процесс теплообмена при значительных перепадах температуры в окрестности частицы $(T_S - T_{e\infty})/T_{e\infty} \sim 0(1)$ с учетом зависимости коэффициентов молекулярного переноса (вязкости жидкости μ_e и теплопроводности частицы λ_i) от температуры и влияния движения среды на теплообмен.

При описании свойств газообразной среды и частицы рассматривается степенной вид зависимости динамической вязкости и теплопроводности от температуры [4, 5]. Таким образом,

$$\begin{aligned}\mu_e &= \mu_{e\infty} t_e^\beta, & \lambda_e &= \lambda_{e\infty} t_e^\alpha, & \rho_e &= \rho_{e\infty} t_e, & \lambda_i &= \lambda_{i\infty} t_i^\omega, \\ \mu_{e\infty} &= \mu_e(T_{e\infty}), & \rho_{e\infty} &= \rho_e(T_{e\infty}), & \lambda_{e\infty} &= \lambda_e(T_{e\infty}), & \lambda_{i\infty} &= \lambda_i(T_{e\infty}), \\ t_k &= T_k/T_{e\infty}, & k &= e, i, & 0,5 &\leq \alpha, \beta \leq 1, & -1 &\leq \omega \leq 1.\end{aligned}$$

Здесь и далее индекс e указывает на газообразную среду, индекс i – на принадлежность частице, а индекс ∞ означает параметры газообразной среды на бесконечности, т.е. вдали от частицы.

Система уравнений теплопроводности, описывающая распределения температур T_e вне – и T_i внутри частицы, решалась методом сращиваемых асимптотических разложений [6]

$$\rho_e c_{pe} (\mathbf{U}_e \nabla) T_e = \operatorname{div} (\lambda_e \nabla T_e), \quad \operatorname{div} (\lambda_i \nabla T_i) = -q_i \quad (1)$$

с краевыми условиями в сферической системе координат r, θ, φ

$$r = R, \quad T_e = T_i, \quad \lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial r} = \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} + \sigma_0 \sigma_1 (T_i^4 - T_{e\infty}^4), \quad (2)$$

$$r \rightarrow \infty, \quad T_e = T_{e\infty}, \quad (3)$$

$$r \rightarrow 0, \quad T_i \neq \infty, \quad (4)$$

где R – радиус частицы, σ_0 – постоянная Стефана-Больцмана; σ_1 – интегральная степень черноты; ρ_e , \mathbf{U}_e и c_{pe} – плотность, массовая скорость и удельная теплоемкость жидкости; q_i – плотность тепловых источников, неоднородно распределенных в объеме частицы, за счет которых происходит нагрев ее поверхности. В уравнение (1) входит массовая скорость газообразной среды \mathbf{U}_e . Для определения этой величины использовались результаты работы. Исследование обыкновенных дифференциальных уравнений показали, что получить равномерно пригодные разложения в случаях, когда в некоторых областях изменения независимых переменных, где зависимые переменные испытывают резкие изменения обычными методами (например, метод растягивания координат и т.п.) невозможно.

Один из методов, связанных с рассматриваемой проблемой, заключается в построении прямых разложений (называемых внешними разложениями) с использованием исходных переменных и в построении разложений (называемых

внутренними разложениями), описывающих эти резкие изменения и использующих увеличенные масштабы. Внешние разложения становятся непригодными в областях резких изменений, в то время как пригодность внутренних разложений нарушается при выходе из этих областей. Чтобы связать эти разложения используют так называемую процедуру сращивания. Методу сращиваемых асимптотических разложений свойственна потеря граничных условий. Нельзя ожидать, что внешнее разложение будет удовлетворять условиям, которые наложены во внутренней области, и наоборот, внутреннее разложение в общем случае не будет удовлетворять условиям в удаленной области. Таким образом, неудовлетворенные граничные условия вообще присущи как внутреннему, так и внешнему разложениям. Потеря условий восполняется сращиванием двух разложений. Сращивание представляет собой основную черту метода. Возможность сращивания основана на существовании области перекрытия, в которой пригодны как внутреннее, так и внешнее разложения. Используя это перекрытие, можно получить точное соотношение между конечными частными суммами. Реализация этой замечательной возможности осуществима только для возмущения параметра, которое неоднородно в координатах, или для возмущения координаты, которое неоднородно по другим координатам. Нельзя срастить два различных параметрических разложения, таких, как разложение для больших и малых значений числа Рейнольдса, числа Маха и т.д. Такие ряды могут перекрываться в том смысле, что они имеют общую область сходимости, но процесс аналитического продолжения дает только приближенное соотношение для некоторого конечного числа членов.

1. Метод решения. Определяющими параметрами задачи являются коэффициенты $\rho_{e\infty}$, $\mu_{e\infty}$, $\lambda_{e\infty}$ и сохраняющиеся в процессе движения частицы величины – R , U_∞ и $T_{e\infty}$. Из этих параметров можно составить следующие безразмерные комбинации: число Рейнольдса $Re_\infty = (\rho_{e\infty} U_\infty R) / \mu_{e\infty}$, число Пекле $Pe_\infty = Re_\infty \cdot Pr_\infty$, где $Pr_\infty = (c_{pe} \mu_{e\infty}) / \lambda_{e\infty}$ – число Прандтля, U_∞ – величина характерной скорости. Обезразмерим уравнения и граничные условия: $\mathbf{V}_e = \mathbf{U}_e / U_\infty$, y/R , x/R .

При $\varepsilon = Re_\infty \ll 1$ решение уравнений гидродинамики находятся в виде ряда по ε [7]. Перейдем теперь к решению уравнений теплопроводности. Если перейти к безразмерным величинам, то конвективное уравнение теплопроводности принимает вид

$$\varepsilon \frac{Pr_\infty}{t_e} \left(V_r \frac{\partial t_e}{\partial y} + \frac{V_\theta}{y} \frac{\partial t_e}{\partial \theta} \right) = \text{div} \left(t_e^\alpha \nabla t_e \right). \quad (5)$$

Будем решать это уравнение методом сращиваемых асимптотических разложений [6]. Внутренние и внешние асимптотические разложения безразмерной температуры представим как

$$t_e(y, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\varepsilon) t_{en}(y, \theta), \quad f_0(\varepsilon) = 1, \quad (6)$$

$$t_e^*(\xi, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n^*(\varepsilon) t_{en}^*(\xi, \theta),$$

где $\xi = \varepsilon y$ – "сжатая" радиальная координата [6]. При этом требуется, чтобы $f_{n+1}/f_n \rightarrow 0$, $f_{n+1}^*/f_n^* \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Недостающие граничные условия для внутреннего и внешнего разложений вытекают из условия тождественности продолжения асимптотических разложений того и другого в некоторую промежуточную область, т.е.

$$t_e(y \rightarrow \infty, \theta) = t_e^*(\xi \rightarrow 0, \theta). \quad (7)$$

Асимптотическое разложение решения внутри частицы, как показывают граничные условия на поверхности частицы, следует искать в аналогичном виде

$$t_i(y, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\varepsilon) t_{in}(y, \theta). \quad (8)$$

Относительно функций $f_n^*(\varepsilon)$ и $f_n(\varepsilon)$ предполагается, что их порядок малости по ε увеличивается с ростом n .

С учётом сжатой радиальной координаты имеем следующее уравнение для температуры t_e^* ,

$$\frac{\text{Pr}_\infty}{t_e^*} \left(V_r^* \frac{\partial t_e^*}{\partial \xi} + \frac{V_\theta^*}{\xi} \frac{\partial t_e^*}{\partial \theta} \right) = \text{div} \left(t_e^{*\alpha} \nabla t_e^* \right), \quad t_e^* \rightarrow 1 \text{ при } \xi \rightarrow \infty, \quad (9)$$

$$\mathbf{V}_e^*(\xi, \theta) = \mathbf{n}_z + \varepsilon \mathbf{V}_e^{(1)*}(\xi, \theta) + \dots, \quad P_e^*(\xi, \theta) \rightarrow P_\infty \text{ при } \xi \rightarrow \infty \quad (10)$$

Здесь $t_e^* = t_e^*(\xi, \theta)$, \mathbf{n}_z – единичный вектор в направлении оси z .

2. Поля температур в окрестности нагретой аэрозольной частицы. При нахождении распределения температуры в окрестности аэрозольной частицы мы ограничимся поправками першого порядка малости по ε . Они определяются последовательно с учетом условия сращивания. Ввиду

громоздкости полученных формул мы приведем нулевые и первые члены разложения в случае малых относительных перепадов температуры

$$t_e^*(\xi, \theta) = t_{e0}^* + \varepsilon t_{e1}^*, \quad t_e(y, \theta) = t_{e0} + \varepsilon t_{e1}, \quad t_i(y, \theta) = t_{i0} + \varepsilon t_{i1},$$

$$t_{e0}(y) = 1 + \frac{\Gamma_0}{y}, \quad t_{e0}^* = 1,$$

$$t_{i0}(y) = B_0 + [4\pi R^2 T_{e\infty} \lambda_{e\infty} y^2]^{-1} \int_V q_i dV + \int_1^y \frac{\psi_0}{y} dy - \frac{1}{y^2} \int_1^y \psi_0 dy,$$

$$t_{e1}^*(\xi, \theta) = \frac{\Gamma_0}{\xi} \exp\left\{\frac{1}{2} \text{Pr}_\infty \xi (x - 1)\right\},$$

$$t_{e1}(y, \theta) = \frac{\omega}{2y} (1 - y) + \cos \left[\frac{\Gamma_0}{y^2} + \omega \left(\frac{1}{2} - \frac{A_1}{4y^3} + \frac{A_2}{2y} \right) \right],$$

$$t_{i1}(y, \theta) = \cos \left\{ B_1 y + [4\pi R^2 T_{e\infty} \lambda_{e\infty} y^2]^{-1} \int_V q_i z dV + \frac{1}{3} \left[y \int_1^y \frac{\psi_1}{y^2} dy - \frac{1}{y^2} \int_1^y \psi_1 y dy \right] \right\},$$

$$\psi_n(y) = -\frac{(2n+1)R^2 y^2}{2\lambda_{i\infty} T_{e\infty}} \int_{-1}^{+1} q_i P_n(\cos \theta) d(\cos \theta), \quad n \geq 0,$$

$$x = \cos \theta, \quad \omega = \text{Pr}_\infty \Gamma_0.$$

Постоянные интегрирования, входящие в выражения для полей температур определяются из граничных условий на поверхности частицы. Что же касается постоянных A_1, A_2 , они определяются из граничных условий для массовой скорости [7].

Заключение. Получены выражения для распределения температур вне и внутри аэрозольной частицы с учетом влияния движения среды (т.е. учтено влияние конвективного члена в уравнении теплопереноса) при произвольных относительных перепадах температуры в окрестности частицы. Поскольку частица нагрета, то при решении уравнений газовой динамики использовался степенной вид зависимости коэффициентов молекулярного переноса (вязкости и теплопроводности) и плотности газообразной среды от температуры.

При нахождении полей температур вне и внутри аэрозольной частицы в случае значительных перепадов температуры предполагалось, что коэффициент теплопроводности частицы, по величине, много больше коэффициента теплопроводности газа, т.е. $\lambda_i \gg \lambda_e$. При выполнении этого условия в коэффициенте динамической вязкости $\mu_e(r, \theta)$ можно пренебречь зависимостью по углу θ в системе частица-газ и считать, что $\mu_e(t_e) \approx \mu_e(t_{e0})$ (предполагается слабая угловая асимметрия распределения температуры). Это позволяет рассматривать гидродинамическую часть отдельно от тепловой части, а связь между ними осуществляется через граничные условия.

Литература

1. Брюханов О.Н. Тепломассообмен / О.А. Брюханов, С.Н.Шевченко. – М.: Ассоциация строительных вузов, 2005. – 460с.
2. Гупало Ю.П., Рязанов Ю.С., А.Т. Чалюк А.Т. О поле температур, возникающем при движении реагирующей сферы при малых конечных числах пекле и рейнольдса // ПМТФ. – 1972. – 2. – С.59-65.
3. Ландау Л.Д. Механика сплошных сред / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. – М.: ГИТ-ТЛ, 1954. – 795с.
4. Бретшнайдер С. Свойства газов и жидкостей. Инженерные методы расчета / С.Бретшнайдер. – М.: Химия, 1966. – 535с.
5. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей / Н.Б.Варгафтик. – М.: Наука, 1977. – 720с.
6. Ван-Дайк М. Методы возмущений в механике жидкости / М.Ван-Дайк. – М.: Мир, 1967. – 310с.
7. Малай Н.В., Щукин Е.Р., Стукалов А.А., Рязанов К.С. К вопросу о гравитационном движении равномерно нагретой частицы в газообразной среде // ПМТФ. – 2008. – 49;1. – С.74-80.

TEMPARTURE FIELD AT THE MOVING OF HEATED PARTICLE IN THE VISCOUS NONISOTHERMIC GASEOUS MEDIUM

N.V. Malay, A.V. Glushak

Belgorod State University,

Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: malay@mail.ru

At the Stokes approximation, the temperature distribution in the neighbourhood of nonuniform heated large particle of the spherical form is obtained. Using the method of asymptotic expansions, the influence of the gaseous media moving on the temperature field is taken into account. The power dependence of transport coefficients (the viscosity and the thermal conductivity) and the density of gaseous media on the temperature is taken into account when the convective equation is solved.

Key words: temperature field, method of asymptotic сращиваемых expansions.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТРЫВНЫХ ТЕЧЕНИЙ НА ОСНОВЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА

Д.А. Редчиц

Институт транспортных систем и технологий НАНУ,
Днепропетровск, Украина

Для численного моделирования нестационарных турбулентных отрывных несжимаемых течений применяются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса. При моделировании турбулентности используются однопараметрические дифференциальные модели турбулентности. Решение системы исходных уравнений получено с помощью неявного конечно-объемного численного алгоритма, базирующегося на методе искусственной сжимаемости и многоблочных вычислительных технологиях. Тестирование разработанных методик проведено на задачах о циркуляционном течении в квадратной каверне, обтекании неподвижного и вращающегося цилиндров. Проведено сравнение результатов расчетов обтекания неподвижного и колеблющегося профилей. Представлены результаты расчета роторов Дарье и Савониуса с различным количеством и геометрическими характеристиками лопастей. Выполнен анализ поля течения вокруг роторов. Выделены основные стадии формирования вихревой структуры. Установлено влияние числа Рейнольдса, коэффициентов быстроходности и заполнения на энергетические характеристики роторов Дарье и Савониуса.

Ключевые слова: отрывное течение, число Рейнольдса, уравнения Навье-Стокса, несжимаемая жидкость, вихри, турбулентность, роторы Дарье и Савониуса.

Введение

Интенсивное развитие авиации, кораблестроения, транспорта привлекло большое внимание к исследованию отрывных течений при различных значениях режимных параметров и конфигурациях обтекаемых тел. Отрывное течение – часто встречающийся и, вместе с тем, наиболее сложный для исследования вид движения реальной жидкости [7]. Главная особенность отрывных течений заключается в том, что после появления отрыва потока течение становится нестационарным [3,25,26]. Несущие способности крыльев, аэродинамические характеристики летательных аппаратов, кораблей и подводных лодок, эффективность гидромашин и ветроустановок непосредственно зависят от развития отрыва потока. Зарождение и развитие отрыва потока, характеристики отрывных течений определяются большим числом параметров. Изучению этого сложного явления посвящено много экспериментальных [25, 26, 41] и теоретических работ [6, 7, 27].

Первые теоретические результаты были получены с помощью классической теории пограничного слоя, которая, однако, не позволяет учитывать

сильное взаимодействие пограничного слоя с внешним потоком. Наиболее важные теоретические и практические результаты по расчету течений с отрывом потока были получены с помощью асимптотической теории вязкой жидкости и полуэмпирических методов, базирующихся на априорном выборе модели течения на основе численного или физического экспериментов [6]. Среди различных подходов, применяемых к решению этой проблемы, важное место занимает математическое моделирование на основе уравнений Навье-Стокса. В настоящее время его роль возрастает с развитием ЭВМ, совершенствованием используемых моделей и численных методов, а также в связи с возможностью заменить расчетом дорогостоящий, а в ряде случаев практически невозможный физический эксперимент. Дополняя друг друга, расчет и эксперимент предоставляют новые возможности для изучения сложных взаимозависимых процессов.

Основная проблема получения нестационарных решений уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости заключается в трудностях одновременного решения уравнений количества движения и уравнения неразрывности. На первом этапе развития численных алгоритмов решения уравнений Навье-Стокса для несжимаемых течений чаще использовались переменные завихренность-функция тока [22, 9, 27]. На основе данного подхода было решено большое количество прикладных задач, но расчеты пространственных задач с использованием функций тока весьма затруднительны.

Применение физических переменных позволяет решать двумерные и трехмерные задачи по единому алгоритму. Основные математические проблемы при решении уравнения Навье-Стокса связаны с различным типом дифференциальных уравнений для законов сохранения массы и количества движения. Различные способы преодоления указанных трудностей связаны с использованием для определения давления специального уравнения Пуассона [1, 37], уравнений для поправок [1, 14], различных штрафных функций [24], дополнением уравнения неразрывности нестационарным членом [37], регуляризацией матрицы коэффициентов при производных по времени [4, 8, 12, 23, 29, 30].

При решении уравнений несжимаемой жидкости в физических переменных применялся метод маркеров и ячеек (MAC) [10, 34, 35, 37], алгоритм SIMPLE [14, 33, 42], метод искусственной сжимаемости [37], в последнее время значительный прогресс в повышении эффективности численных алгоритмов достигнут при использовании локального предобуславливания [49, 55]. Обзор указанных методов можно найти в работах [15, 16].

В последние годы для моделирования течения несжимаемой жидкости все чаще применяются подходы, использующие эффекты сжимаемости [36, 50]. Практика применения уравнений сжимаемого газа показывает низкую работоспособность данной модели при малых числах Маха. Это связано с жесткостью исходных уравнений для низкоскоростных течений вследствие значительных различий в характерных временах конвективного переноса и распространения акустических возмущений. Данное препятствие может быть преодолено применением преобуславливания (preconditioning) [36, 50].

Метод искусственной сжимаемости представляет собой разумный компромисс между указанными выше подходами. С одной стороны, за счет добавления к уравнению неразрывности производной давления по времени исходная система уравнений приводится к единому типу. Это позволяет напрямую согласовать поля давления и скорости на одном временном слое.

Выбор модели турбулентности для расчета отрывных течений составляет отдельную проблему. Несмотря на существенный прогресс в моделировании турбулентности крупными (LES) и отсоединенными (DES) вихрями, прямым численным моделированием (DNS), при решении практических задач широко используются только модели на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS). При замыкании RANS используются алгебраические, одно- и двухпараметрические модели турбулентной вязкости. Большую популярность получила однопараметрическая модель Спаларта-Аллмараса, демонстрирующая разумный компромисс между вычислительными затратами и точностью получаемых результатов.

В настоящей работе для исследования нестационарных турбулентных несжимаемых отрывных течений применяются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса. Основное внимание в работе уделено исследованию развития отрыва несжимаемого потока при обтекании неподвижных, колеблющихся и вращающихся цилиндра и профиля, роторов Дарье и Савониуса.

1. Постановка задачи

Исходные уравнения. Для описания нестационарных турбулентных отрывных несжимаемых течений воспользуемся осредненными по Рейнольдсу уравнениями Навье-Стокса несжимаемой жидкости

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right], \quad (2)$$

где x_i , $i = 1, 2$ – декартовы координаты; t – время; u_i – декартовы составляющие вектора средней скорости; p – давление; $\nu_{eff} = \nu + \nu_t$ – эффективный коэффициент кинематической вязкости; ν и ν_t – молекулярный и турбулентный коэффициенты кинематической вязкости.

Моделирование турбулентности. Для замыкания осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса используются дифференциальные однопараметрические модели Spalart-Allmaras [53], SARC [52, 54] и SALSA [48], которые разработаны для задач внешней дозвуковой аэродинамики.

Однопараметрическая модель турбулентности Spalart-Allmaras (SA) [53] разработана в 1992 году и предназначена для описания равновесных течений типа пограничного слоя для задач внешнего обтекания при малых углах атаки с небольшими отрывными зонами. Генерация турбулентности определяется ротором поля скорости.

В 1997 году Spalart и Shur предложили модификацию исходной модели SARC [52, 54] введением дополнительных эвристических функций для учета кривизны линий тока и вращения твердой обтекаемой поверхности.

В 2003 году сотрудниками TU Berlin была предложена модификация SALSA [48], в которой генерация турбулентности связывалась не с ротором поля скорости, а с тензором скоростей деформаций. Кроме того, на основе опыта использования первоначальной модели были внесены изменения в константы. Различного рода модификации позволили более точно учитывать нестационарные эффекты в турбулентности.

Стандартная модель турбулентности Спаларта-Аллараса (Spalart-Allmaras – SA) [53] предназначена для определения размерного кинематического коэффициента турбулентной вязкости

$$\nu_t = \tilde{\nu}_t \cdot f_{v1}, \quad (3)$$

где $f_{v1} = \chi^3 / (\chi^3 + c_{v1}^3)$ – демпфирующая функция кинематических вязкостей $\chi = \tilde{\nu}_t / \nu$. Здесь $\tilde{\nu}_t$ – рабочая переменная. Уравнение для определения $\tilde{\nu}_t$ в модели Спаларта-Аллараса имеет вид [53]

$$\frac{D\tilde{\nu}_t}{Dt} = c_{b1} \tilde{S} \tilde{\nu}_t + \frac{1}{\sigma} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[(\nu + \tilde{\nu}_t) \frac{\partial \tilde{\nu}_t}{\partial x_k} \right] + \frac{c_{b2}}{\sigma} \frac{\partial \tilde{\nu}_t}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\nu}_t}{\partial x_k} - f_w \left[\frac{c_{b1}}{k^2} + \frac{1 + c_{b2}}{\sigma} \right] \left[\frac{\tilde{\nu}_t}{d} \right]^2. \quad (4)$$

Первое слагаемое в правой части (4) – источниковый член генерации турбулентности, где

$$\tilde{S} \equiv f_{v3}W + \frac{\tilde{\nu}_t}{k^2 d^2} f_{v2}, \quad W = \sqrt{2W_{ij}W_{ij}}, \quad (5)$$

$W_{ij} = 0.5 (\partial u_i / \partial x_j - \partial u_j / \partial x_i)$ – тензор завихренности. Функция f_{v2} определяется с помощью соотношения

$$f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}}. \quad (6)$$

Второе и третье слагаемые в правой части (4) отвечают за диссипацию турбулентности. Четвертое – за деструкцию турбулентности вблизи твердой стенки и содержит функцию

$$f_w = g \left[\frac{1 + c_{w3}^6}{g^6 + c_{w3}^6} \right]^{1/6}, \quad (7)$$

где $g = r + c_{w2}(r^6 - r)$, $r = \frac{\tilde{\nu}_t}{\tilde{S}k^2 d^2}$. Здесь d – расстояние до ближайшей стенки. Значения констант: $k = 0.41$ – константа Кармана, $\sigma = 2/3$ – турбулентное число Прандтля, $c_{b1} = 0.1355$, $c_{b2} = 0.622$, $c_{v2} = 5.0$, $c_{w2} = 0.3$, $c_{w3} = 2$, $c_{v1} = 7.1$, $f_{v3} = 1$.

Модель турбулентности Спаларта-Алмараса, с учетом вращения и кривизны линий тока (*Spalart-Allmaras for Rotation and Curvature – SARC*) разработана Spalart и Shur [52]. В модели SARC [52], в отличие от стандартной SA [53], слагаемое генерации турбулентности умножается на эвристическую функцию f_{r1} ,

$$f_{r1} = (1 + c_{r1}) \frac{2r^*}{(1 + r^*)} \left[1 - c_{r3} \tan^{-1}(c_{r2} \tilde{r}) \right] - c_{r1}, \quad (8)$$

где $c_{r1} = 1$, $c_{r2} = 12$. Константа c_{r3} определена Spalart и Shur [52] в диапазоне $0.6 \div 1.0$. В настоящей работе $c_{r3} = 0.6$. Функция r^* определяется как $r^* = S/W$. Здесь

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad W = \sqrt{2W_{ij}W_{ij}}, \quad S_{ij} = 0.5 (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$$

– тензор скоростей деформаций. Функция \tilde{r} согласно [52] имеет вид

$$\tilde{r} = 2W_{ik}S_{jk} \left[\frac{DS_{ij}}{Dt} + (\varepsilon_{imn}S_{jn} + \varepsilon_{jmn}S_{in}) \Omega_m \right] / D^4, \quad (9)$$

где Ω_m – значение угловой скорости вращения относительно оси x_m , ε_{imn} – компоненты тензора третьего ранга Леви-Чивита, $D = \sqrt{0.5(S^2 + W^2)}$.

Модель Спаларта-Аллараса, адаптированная к тензору скоростей деформаций (*Strain-Adaptive Linear Spalart-Allmaras Model – SALSA*) [48] является развитием оригинальной модели SA. Она основана на принципе вихревой вязкости для слабосжимаемых течений с пренебрежимо малыми флуктуациями плотности.

Уравнение для определения $\tilde{\nu}_t$ в модели Спаларта-Аллараса, адаптированной к тензору скоростей деформаций, записывается в виде [48]

$$\frac{D\tilde{\nu}_t}{Dt} = \tilde{c}_{b1}\tilde{S}\tilde{\nu}_t + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma} \right) \frac{\partial \tilde{\nu}_t}{\partial x_k} \right] + \frac{c_{b2}}{\sigma} \frac{\partial \tilde{\nu}_t}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\nu}_t}{\partial x_k} - f_w \left[\frac{\tilde{c}_{b1}}{k^2} + \frac{1 + c_{b2}}{\sigma} \right] \left[\frac{\tilde{\nu}_t}{d} \right]^2. \quad (10)$$

От стандартной модели турбулентности Спаларта-Аллараса SALSA отличается модификацией членов генерации, диссипации и деструкции турбулентной вязкости. Стандартный коэффициент c_{b1} модифицируется в слагаемом генерации следующим образом

$$\tilde{c}_{b1} = c_{b1}\sqrt{\Gamma}, \quad \Gamma = \min(1.25, \max(\gamma, 0.75)), \quad \gamma = \max(\alpha_1, \alpha_2), \quad (11)$$

$$\alpha_1 = \left(1.01 \frac{\tilde{\nu}_t}{k^2 d^2 S^*} \right)^{0.65}, \quad \alpha_2 = \max\left(0, 1 - \tanh\left(\frac{\chi}{68}\right)\right)^{0.65}. \quad (12)$$

Основное отличие SALSA от стандартной модели турбулентности SA заключается в использовании тензора скоростей деформаций вместо тензора завихренности, а именно

$$\tilde{S} = S^* \left[\left(\frac{1}{\chi} \right) + f_{v1} \right], \quad S^* = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (13)$$

Функции, которые входят в слагаемое деструкции, имеют следующий вид

$$r = 1.6 \tanh \left[0.7 \left(\frac{\Psi}{\tilde{S}} \right) \right], \quad \Psi = \frac{\tilde{\nu}_t}{k^2 d^2}. \quad (14)$$

Значения всех остальных констант такие же, как и в стандартной модели SA.

Начальные и граничные условия. В качестве начальных условий задавались параметры невозмущенного потока во всей расчетной области. На

внешней границе применялись неотражающие граничные условия. На поверхности твердого тела ставилось условие прилипания. В моделях турбулентности SA, SARC, SALSA значение рабочей переменной на теле задавалось равным нулю $\tilde{\nu}_t = 0$, на входной границе $\tilde{\nu}_t = 0.1$, на выходной – ставилось условие Неймана.

2. Программно-методическое обеспечение для численного моделирования нестационарных течений на основе уравнений Навье-Стокса

Разработка программно-методического обеспечения для численного моделирования нестационарных несжимаемых турбулентных течений на основе уравнений Навье-Стокса включает следующие этапы: запись исходных уравнений в криволинейных неортогональных координатах, получение их дискретного аналога, построение расчетных сеток, решение системы алгебраических уравнений, визуализация результатов расчетов.

Система исходных уравнений (1,2), замкнутая одной из дифференциальных моделей турбулентности, интегрировалась численно с использованием метода контрольного объема. Разработанный численный алгоритм базируется на трехслойной неявной схеме Rogers-Kwak [45, 46], имеющей второй порядок точности интегрирования по времени, третий порядок противопоточной аппроксимации конвективных слагаемых, и второй порядок центрально-разностной аппроксимации диффузионных членов

$$I_m \frac{\partial \hat{D}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{D}}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial \xi} (\hat{E} - \hat{E}_\nu) - \frac{\partial}{\partial \eta} (\hat{F} - \hat{F}_\nu) = -\hat{R}, \quad (15)$$

где \hat{R} – вектор невязок уравнений,

$$\hat{D} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} p \\ u \\ v \end{bmatrix}, \quad \hat{E} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \beta U \\ \xi_x p + uU + \xi_t u \\ \xi_y p + vU + \xi_t v \end{bmatrix}, \quad \hat{F} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \beta V \\ \eta_x p + uV + \eta_t u \\ \eta_y p + vV + \eta_t v \end{bmatrix}, \quad (16)$$

$$I_m = \text{diag} [0, 1, 1].$$

Вязкие члены в криволинейной системе координат имеют вид

$$\hat{E}_\nu = \frac{\nu + \nu_t}{J \text{Re}} \begin{bmatrix} 0 \\ (\xi_x^2 + \xi_y^2) u_\xi + (\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) u_\eta \\ (\xi_x^2 + \xi_y^2) v_\xi + (\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) v_\eta \end{bmatrix},$$

$$\hat{F}_\nu = \frac{\nu + \nu_t}{J \text{Re}} \begin{bmatrix} 0 \\ (\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) u_\xi + (\eta_x^2 + \eta_y^2) u_\eta \\ (\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) v_\xi + (\eta_x^2 + \eta_y^2) v_\eta \end{bmatrix}, \quad (17)$$

где

$$J = \frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(x, y)} = \det \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix}$$

– якобиан преобразования координат; $\xi_t = -x_\tau \xi_x - y_\tau \xi_y$, $\eta_t = -x_\tau \eta_x - y_\tau \eta_y$,

$$\xi_x = J y_\eta, \quad \xi_y = -J x_\eta, \quad \eta_x = -J y_\xi, \quad \eta_y = J x_\xi$$

– метрические коэффициенты;

$$U = \xi_x u + \xi_y v, \quad V = \eta_x u + \eta_y v$$

– контравариантные компоненты вектора скорости; Re – число Рейнольдса.

Для создания дискретного аналога исходных уравнений использовались регулярные сетки. В неодносвязных областях применялись многоблочные вычислительные технологии, в которых размерность отдельных пересекающихся сеток (блоков) не связана между собой. Такой подход позволил выработать единую методологию расчета течений вязкой жидкости при обтекании тел сложной геометрической формы.

В моделях турбулентности для аппроксимации конвективных слагаемых применялась схема TVD с ограничителем потоков ISNAS третьего порядка. Производные в вязких членах аппроксимировались центрально-разностной схемой второго порядка.

Алгоритм решения уравнений базируется на трехслойной неявной схеме с подытерациями по псевдовремени τ второго порядка точности по физическому времени t

$$\begin{aligned} \left[I_{t\tau} + \left(\frac{\partial \hat{R}}{\partial \hat{D}} \right)^{n+1,m} \right] \left(\hat{D}^{n+1,m+1} - \hat{D}^{n+1,m} \right) = \\ = -\hat{R}^{n+1,m} - \frac{I_m}{\Delta t} \left(1.5 \hat{D}^{n+1,m} - 2 \hat{D}^n + 0.5 \hat{D}^{n-1} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

$$I_{t\tau} = \text{diag} \left[\frac{1}{\Delta \tau}, \frac{1}{\Delta \tau} + \frac{1.5}{\Delta t}, \frac{1}{\Delta \tau} + \frac{1.5}{\Delta t} \right], \quad (19)$$

где верхний индекс n обозначает момент времени $t = n\Delta t$. Для решения уравнений (4) и выполнения уравнения неразрывности на слое $n+1$ вводится псевдовременной слой m . Уравнения решаются итеративно, так чтобы $\hat{u}^{n+1,m+1}$ и $\hat{v}^{n+1,m+1}$ приближались к значению скорости \hat{u}^{n+1} , \hat{v}^{n+1} на новом временном слое, а дивергенция скорости стремилась к нулю. Полученная блочно-матричная система алгебраических уравнений решалась методом итераций Гаусса-Зейделя.

Рассмотренная выше постановка задачи и численная методика реализованы в виде универсального комплекса программ, разработанного по модульному принципу, позволяющих включать новые модели турбулентности, численные методики, геометрии обтекаемых поверхностей, визуализировать структуру течений.

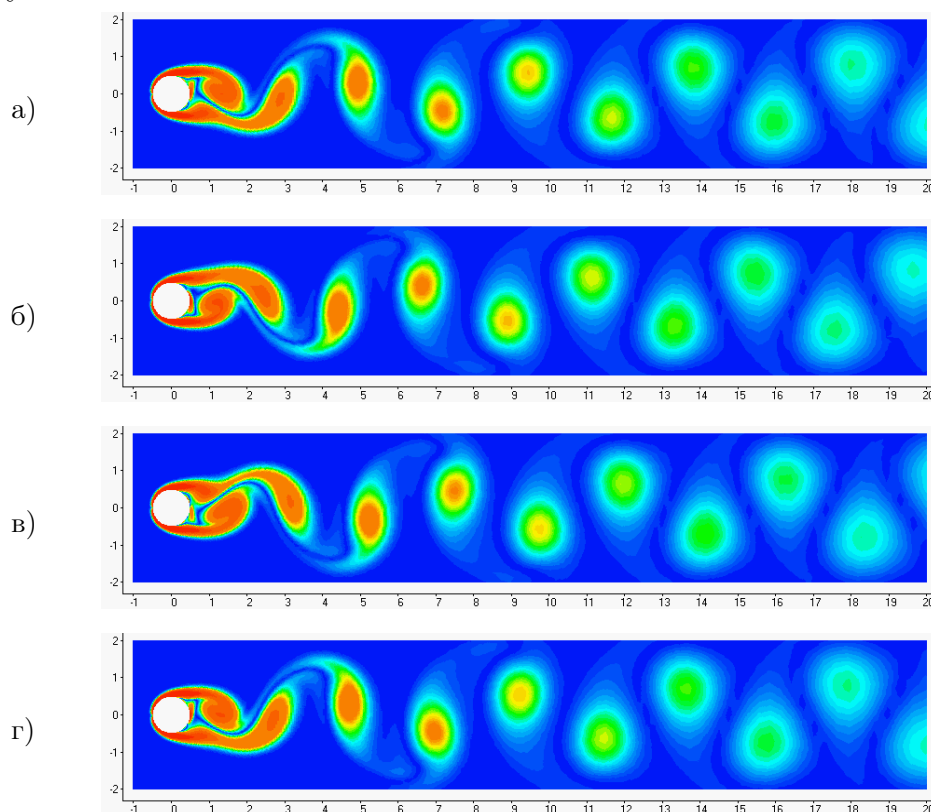


Рис. 1. Контурные завихренности при обтекании цилиндра ($Re=200$)

для моментов времени: а) $t = 0$; б) $t = 2$; в) $t = 4$; г) $t = 6$.

3. Верификация и тестирование программно-методического обеспечения

Современные требования к достоверности получаемых численных результатов и надежности программно-методического обеспечения требуют тщательного тестирования и верификации разработанного комплекса программ.

В разделе представлены результаты тестирования разработанной методики, алгоритмов и комплекса программ на задачах о развитии течения в квадратной каверне и обтекании неподвижного цилиндра несжимаемой жидкостью Kwak [16].

Получены структура стационарного и нестационарного ламинарного течения в следе за цилиндром, коэффициенты лобового сопротивления, подъемной силы и числа Струхалия. Показано, что при числах Рейнольдса $Re \leq 5$ обтекание цилиндра происходит без отрыва потока. Увеличение числа Рейнольдса приводит к возникновению и развитию отрыва потока от поверхности цилиндра. При числах Рейнольдса $Re < 45$ реализуется стационарный режим обтекания, который характеризуется наличием в ближнем следе двух симметричных вихрей. Обтекание цилиндра при $Re > 45$ сопровождается образованием вихревой дорожки Кармана с числом Струхалия, зависящим от числа Рейнольдса (рис. 1). Результаты исследований хорошо согласуются с известными расчетными и экспериментальными данными.

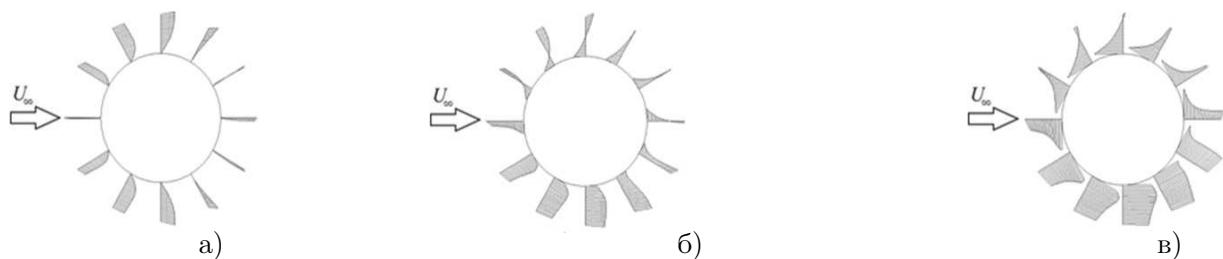


Рис. 2. Профили скорости при обтекании кругового цилиндра ($Re=100$) в зависимости от линейной скорости поверхности: (а) $\alpha = 0$; (б) $\alpha = 1.0$; (в) $\alpha = 2.0$.

4. Обсуждение результатов расчетов

На базе разработанного программно-методического обеспечения выполнено численное моделирование нестационарных турбулентных отрывных несжимаемых течений: обтекание вращающегося цилиндра [18], докритическое и закритическое обтекание неподвижного и колеблющегося профилей [19,20], роторов вертикально-осевых ветроагрегатов Дарье и Савониуса [21,20,43,44].

4.1. Ламинарное обтекание вращающегося цилиндра (эффект Магнуса)

Параметры задачи выбраны такими, при которых течение было ламинарным. Результаты расчетов показали, что вращение приводит к ускорению течения на одной стороне цилиндра и замедлению на другой в зависимости от величины α (отношение линейной скорости вращения поверхности цилиндра к скорости невозмущенного потока). Профили скорости показаны на рис. 3. Цилиндр вращается против хода часовой стрелки.

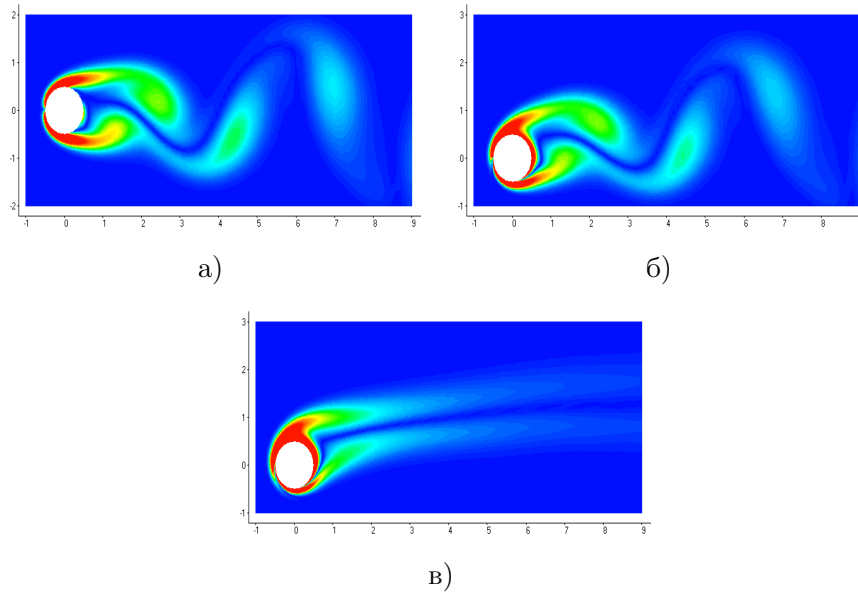


Рис. 3. Контурные завихренности при обтекании кругового цилиндра ($Re=100$) в зависимости от линейной скорости поверхности: (а) $\alpha = 0$; (б) $\alpha = 1.0$; (в) $\alpha = 2.0$.

Контурные завихренности для различных значений α в момент времени, соответствующий минимуму подъемной силы при $Re=100$, показаны на рис. 3. С ростом скорости вращения вихри в следе, сошедшие с верхней стороны цилиндра, становятся более крупными, чем вихри, которые сходят с противоположной стороны (рис. 3б). При $\alpha \geq 2.0$ наблюдается наличие двух стационарных вихрей, присоединенных к цилиндру (рис. 3в). Вращение цилиндра приводит к возникновению поперечной силы, величина и знак которой зависят от значений α (рис. 4).

С увеличением величины α давление на верхней части цилиндра становится большим, чем на нижней, и появляется ненулевая, осредненная по времени, поперечная сила (сила Магнуса). Фазовые диаграммы (зависимость C_L от C_D) для $Re=100$ приведены на рис. 6. Замкнутость фазовых диаграмм

свидетельствует о периодической структуре течения. При значении $\alpha=1.9$ фазовая диаграмма переходит в точку.

Таким образом, при постоянной скорости обтекания на цилиндр действуют аэродинамические силы, переменные по величине, направлению и частоте, зависящие от значений текущей угловой скорости.

4.2. Докритическое и закритическое обтекание профиля NASA 4412 турбулентным потоком

Было выполнено сравнение результатов расчетов обтекания профиля NASA 4412 при числе $Re=1.64 \times 10^6$ с использованием моделей турбулентности SA, SARC и SALSA.

Установлено, что для докритического режима обтекания профиля (слабый отрыв – 12°) выбор модели турбулентности не оказывает существенного влияния на результаты расчетов.

На закритическом режиме обтекания профиля (массивный отрыв – 18°) наибольшие размеры отрывной зоны наблюдаются при использовании модели турбулентности SALSA (рис.7). Модель турбулентности SA генерирует более наполненный профиль турбулентной вязкости в пограничном слое по сравнению с моделями SARC и SALSA (рис. 8). Использование модели SARC приводит к незначительному улучшению получаемых результатов по сравнению с SA. Модель турбулентности SALSA лучше, чем SA и SARC передает нестационарную двумерную структуру течения с развитым отрывом потока.

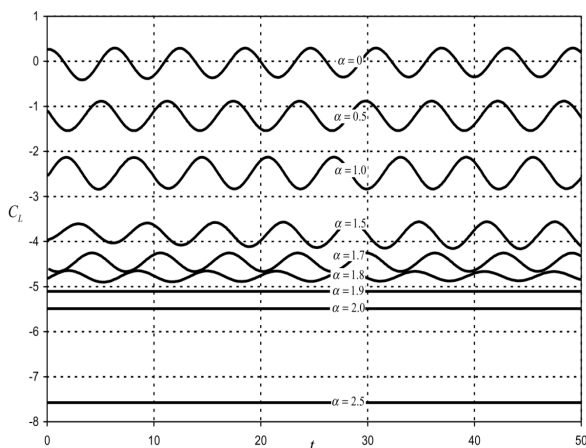


Рис. 4. Изменение коэффициента подъемной силы C_L от времени t ($Re=100$).

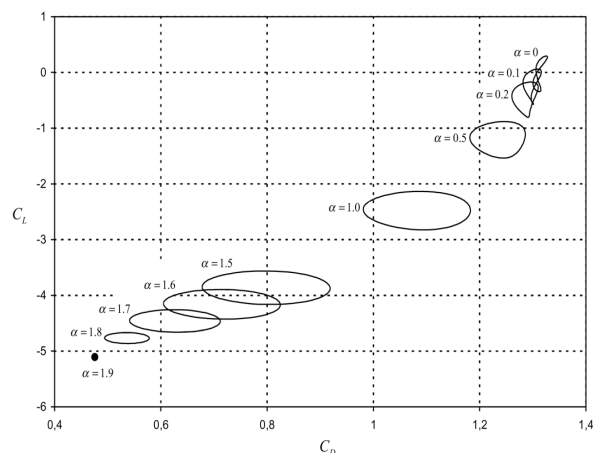
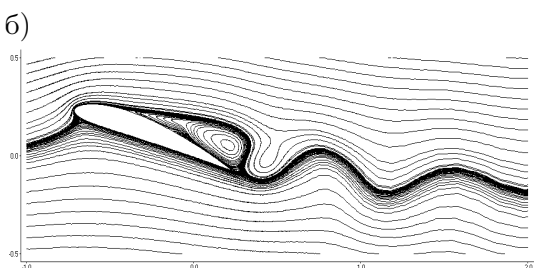
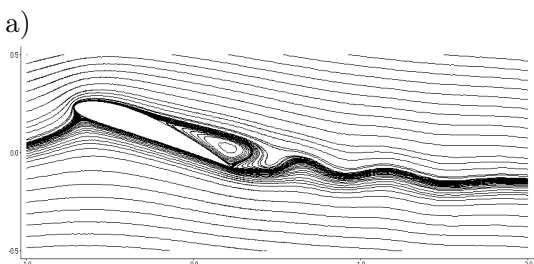
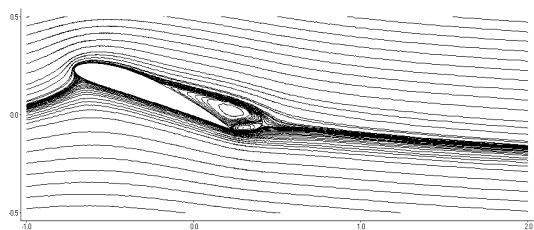
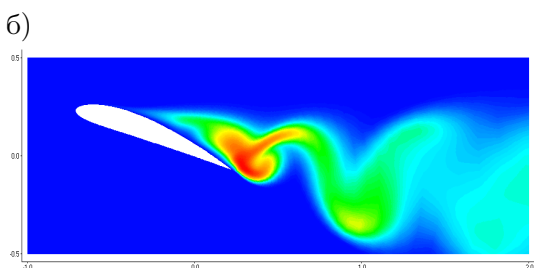
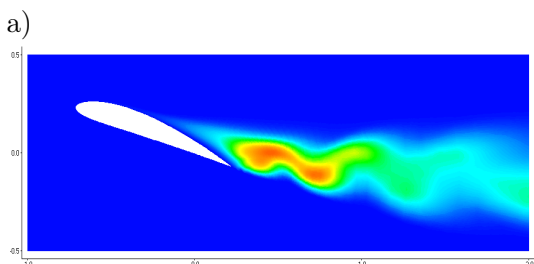
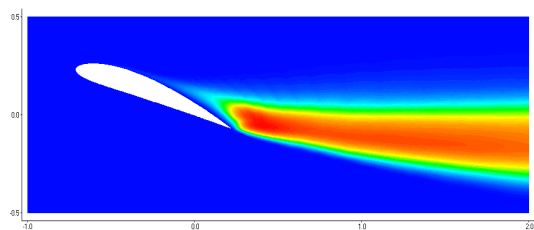


Рис. 5. Фазовая диаграмма зависимости подъемной силы от лобового сопротивления для различных значений α ($Re=100$).



в)
Рис. 6. Линии тока, построенные по мгновенному полю скоростей при угле атаки 18° :
а) SA; б) SARC; в) SALSA.



в)
Рис. 7. Изополосы турбулентной вязкости при угле атаки 18° : а) SA; б) SARC; в) SALSA.

Распределение коэффициента давления по поверхности профиля для углов атаки 12° и 18° приведены на рис. 9. До угла атаки 12° наблюдается хорошее совпадение результатов по всем исследуемым моделям турбулентности с экспериментальными данными. При углах атаки, больших 12° , применение модели SALSA приводит к заметному улучшению получаемых результатов.

До угла атаки 12° результаты, полученные с использованием моделей турбулентности SA, SARC и SALSA, для коэффициентов подъемной силы и лобового сопротивления близки между собой и хорошо совпадают с экспериментальными данными (рис.10). Использование модели турбулентности SALSA приводит к существенному улучшению получаемых результатов в сравнении с моделями SA и SARC при закритическом режиме обтекания.

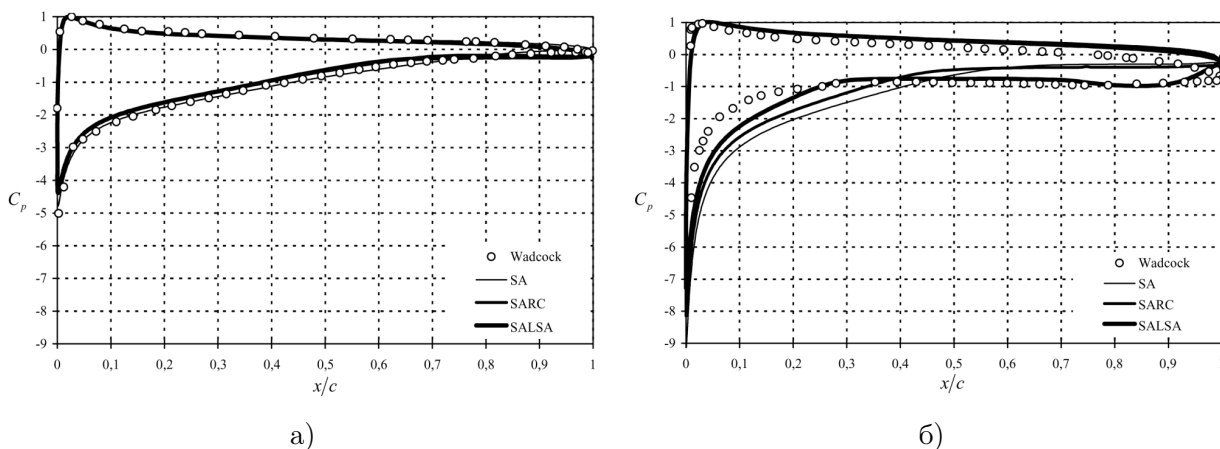


Рис. 8. Распределение коэффициента давления по поверхности профиля NASA 4412 для различных углов атаки: (а) 12° ; (б) 18° .

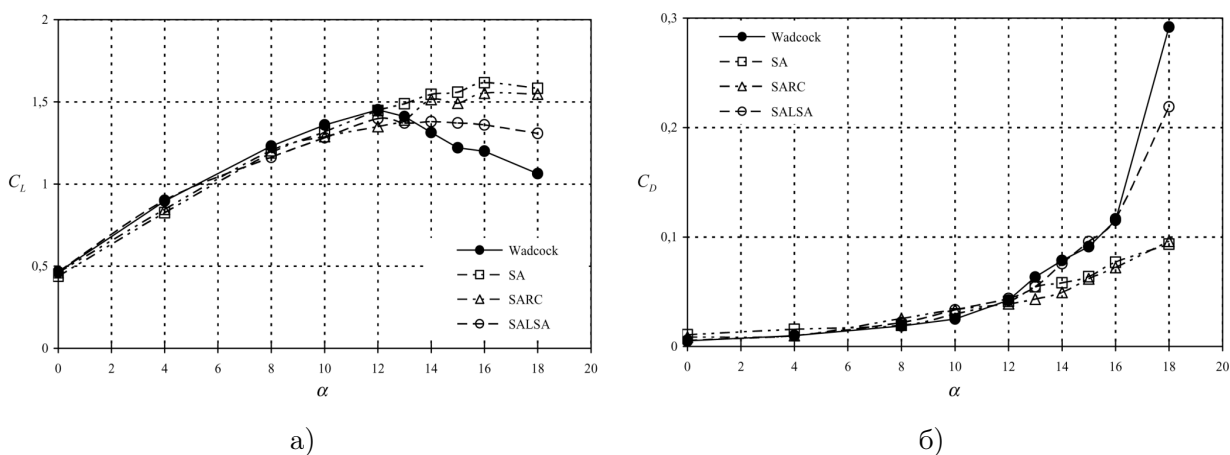


Рис. 9. Зависимость коэффициентов подъемной силы (а) и лобового сопротивления (б) от угла атаки для профиля NASA 4412.

4.3. Обтекание осциллирующего профиля NASA 0015

Расчеты обтекания осциллирующего профиля NASA 0015 проведены при числе Рейнольдса $Re = 1.95 \times 10^6$ для трех режимов обтекания: а) слабый отрыв потока, соответствующий среднему углу атаки $\alpha_0 = 4^\circ$; б) докритическое обтекание профиля (развитый отрыв), соответствующее $\alpha_0 = 11^\circ$; в) закритическое обтекание профиля (массивный отрыв), соответствующее $\alpha_0 = 15^\circ$. Мгновенный угол атаки крыла определялся по закону $\alpha(t) = \alpha_0 + \alpha_1 \sin(\omega t)$. Амплитуда колебаний составляла $\alpha_1 = 4.2^\circ$, а безразмерная частота $k = \omega c / 2V_\infty = 0.1$. Основное течение в случае докритического обтекания профиля крыла при наличии развитого отрыва потока ($\alpha_0 = 11^\circ$) – стационарное, отрывная зона не превышает половины длины профиля, наблюдаются отдельные колебания в следе и в части отрывной зоны. Зависимости коэффициентов подъемной силы и лобового сопротивления профиля от угла атаки

при гармонических колебаниях представлены на рис. 10. Движение по кривым направлено по часовой стрелке (рис. 10). Результаты, полученные с использованием модели турбулентности SALSA, удовлетворительно совпадают с экспериментальными данными.

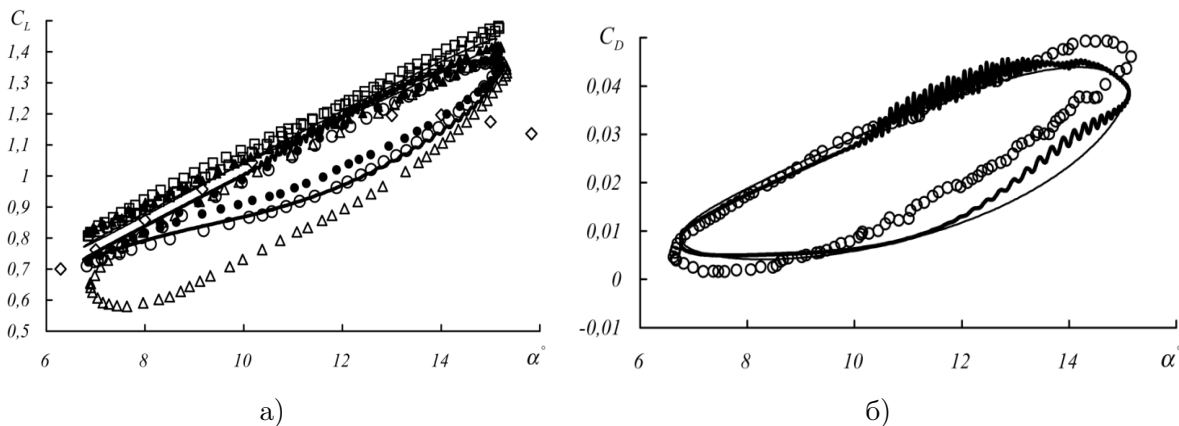


Рис. 10. Зависимости коэффициентов подъемной силы (а) и лобового сопротивления (б) от углового положения профиля крыла ($\alpha_0 = 11^\circ$).

На этих рисунках нанесены в соответствии со следующими обозначениями:

- | | |
|--|---|
| — — модель SA
(настоящая работа); | — — модель SALSA
(настоящая работа); |
| ◇ — эксперимент
(статический профиль) [51]; | ○ — эксперимент
(колеблющийся профиль) [40]; |
| △ — модель Baldwin-Barth
(расчет [32]); | ▲ — модель Wilcox |
| □ — модель SA (расчет [32]); | ● — модель SALSA (расчет [32]). |

Структура течения при закритическом обтекании профиля и наличии массивного отрыва потока ($\alpha_0 = 15^\circ$) характеризуется ярко выраженными нестационарными явлениями (рис. 12). Отрыв потока зарождается на подветренной стороне вблизи носика профиля, распадаясь затем на систему вихрей с различными скоростями движения.

Разработанная методика воспроизводит структуру нестационарного отрывного обтекания осциллирующего профиля NACA 0015. Показано преимущество модели турбулентности SALSA по сравнению с моделями SA, SARC при расчете течений с развитым двумерным нестационарным отрывом потока.

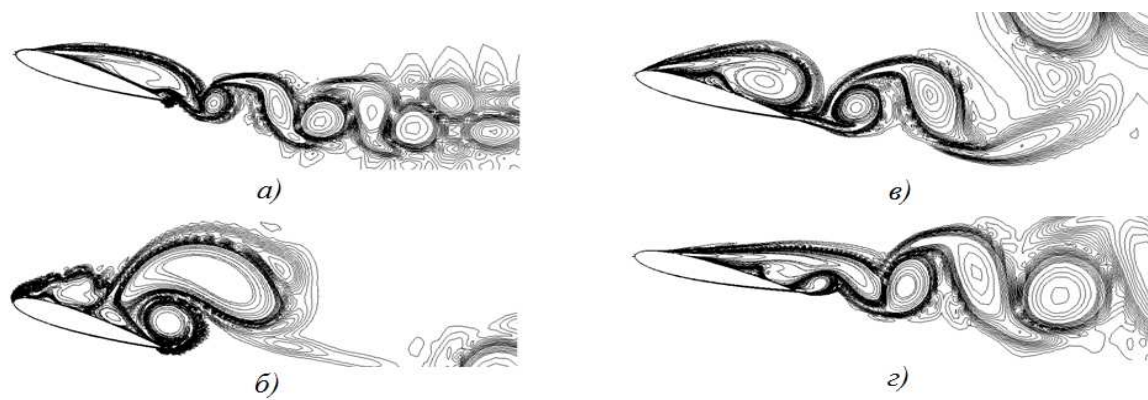


Рис. 11. Контуры завихренности, полученные по модели турбулентности SALSA: а) $19^\circ \uparrow$; б) $19^\circ \downarrow$; в) $17^\circ \downarrow$; г) $14^\circ \downarrow$ (\uparrow - профиль движется вверх, \downarrow - профиль движется вниз).

4.4. Роторы вертикально-осевых ветроустановок

Разработка и усовершенствование альтернативных источников энергии является актуальной проблемой энергетики. К одному из перспективных направлений решения данной проблемы относится ветроэнергетика. Большое распространение в мире получили двух- и трехлопастные горизонтально-осевые (ГО) ветроэнергетические установки (ВЭУ) пропеллерного типа. Это связано с высоким коэффициентом использования энергии ветра. Близкими значениями коэффициента мощности из вертикально-осевых (ВО) ВЭУ обладают только роторы Дарье.

Повышение мощности ВЭУ и увеличение коэффициента использования энергии ветра делает задачу выбора рациональной аэродинамической формы ротора весьма актуальной. Ведущую роль в работе ВЭУ играют нестационарные аэродинамические процессы, поэтому основным направлением исследований должна быть разработка новых универсальных методов расчета нестационарных процессов при обтекании потоком роторов ветроагрегатов.

Известные методики определения аэродинамических и энергетических характеристик роторов ВЭУ основаны на экспериментальных данных, импульсной и вихревой теориях, численном решении уравнения потенциала [5, 11, 41]. Они используют определенные допущения при постановке задачи (квазистационарность потока, отсутствие учета вязко-невязкого взаимодействия и т.д.). Главными трудностями в расчете нестационарных процессов при обтекании роторов ВО ВЭУ являются эффекты динамического срыва потока. До настоящего времени ни одна из известных упрощенных моделей не давала возможности адекватно рассчитать аэродинамические характеристики роторов в случае динамического срыва потока.

Уравнения Навье-Стокса являются одной из наиболее полных математических моделей механики жидкости и газа. Применение их совместно с дифференциальной моделью турбулентности, уравнением динамики ротора позволяет исследовать особенности нестационарного обтекания, структуру поля скоростей, динамический срыв потока, процессы формирования и распада вихрей вокруг самого ротора, а также в следе за ветроагрегатом. Одним из наиболее перспективных направлений расчета аэродинамических и энергетических характеристик ротора ВЭУ является совместное численное решение уравнений динамики вязкой несжимаемой жидкости и твердого тела.

Рассмотрим ортогональные роторы Дарье и Савониуса, лопасти которых имеют длину, многократно превышающую хорду (рис. 12). В таком случае можно пренебречь концевыми эффектами на лопастях и воспользоваться гипотезой о плоскопараллельной структуре течений. Таким образом, задача обтекания ВО ВЭУ допускает двумерную постановку в плоскости, перпендикулярной оси вращения ротора. Роторы Дарье и Савониуса полагаем абсолютно твердыми. Поскольку для максимальных скоростей ветра и значений коэффициента быстроходности локальные числа Маха низкие ($M < 0.3$), поле течения принято несжимаемым.

Уравнение вращения ротора вертикально-осевой установки относительно неподвижной оси имеет следующий вид

$$I_z \frac{d\omega}{dt} = Q - Q_{ld} - Q_{fr}, \quad (9)$$

где I_z – момент инерции ротора; ω – угловая скорость вращения; Q – крутящий момент, обусловленный действием потока на лопасти ВЭУ; Q_{ld} – момент полезной нагрузки, приложенный к валу электрогенератора; Q_{fr} – результирующий момент трения в электромеханической системе ветроагрегата.

Ротор Дарье. Ниже представлены результаты численного моделирования обтекания вращающейся одиночной лопасти, а также ротора Дарье с двумя и тремя лопастями.

Численное моделирование обтекания вращающейся лопасти проведено при различных коэффициентах быстроходности λ . По коэффициенту тангенциальной силы при $\lambda_1 = 2.5$ наблюдается широкий разброс экспериментальных и расчетных данных (рис. 13). Результаты работы лучше согласуются с известными экспериментальными данными, чем расчеты других авторов, особенно в наветренной части траектории лопасти.

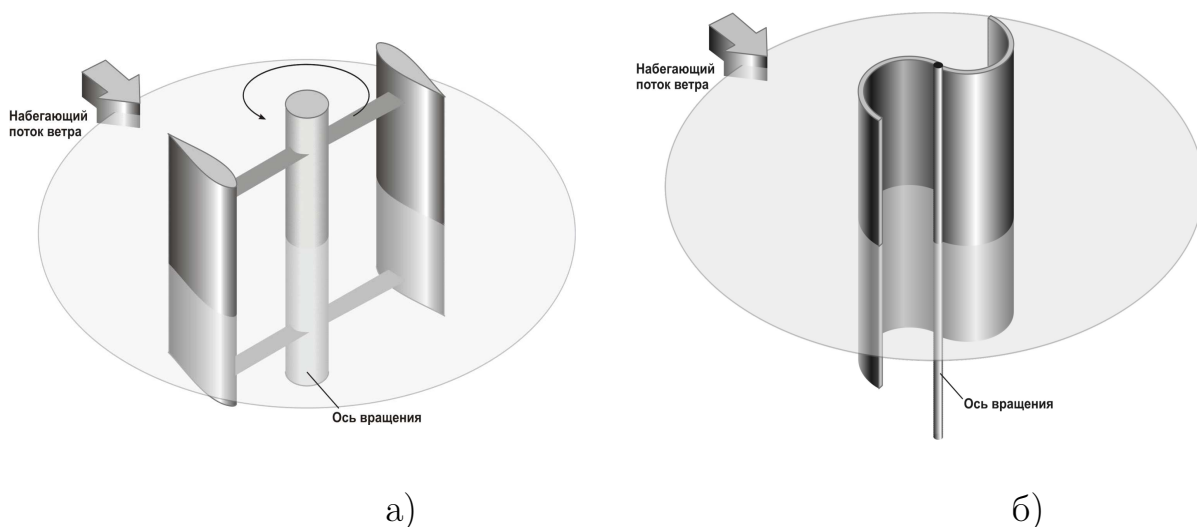


Рис. 12. Расчетные схемы для роторов Дарье (а) и Савониуса (б).

Основной крутящий момент создается на наветренном участке траектории лопасти (рис. 14). Анализ результатов расчетов показал, что поток, проходя через наветренный участок траектории лопасти, теряет часть своей кинетической энергии. Именно поэтому коэффициент крутящего момента лопасти больше на этом участке, чем на подветренном. На подветренном участке траектории он минимальный ($\lambda_1 = 2.5$, $\lambda_2 = 5.0$) или, вообще, отрицательный ($\lambda_3 = 7.5$).

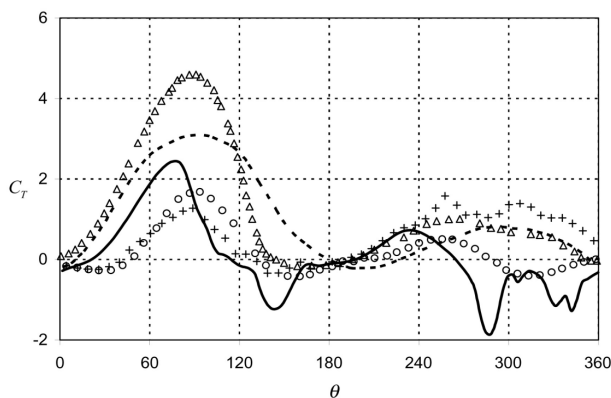


Рис. 13. Изменение коэффициента тангенциальной силы лопасти C_T от углового положения ротора θ

— — расчет [39]; \circ , $+$ — эксперимент [39];
 Δ — расчет [41]; — — настоящая работа.

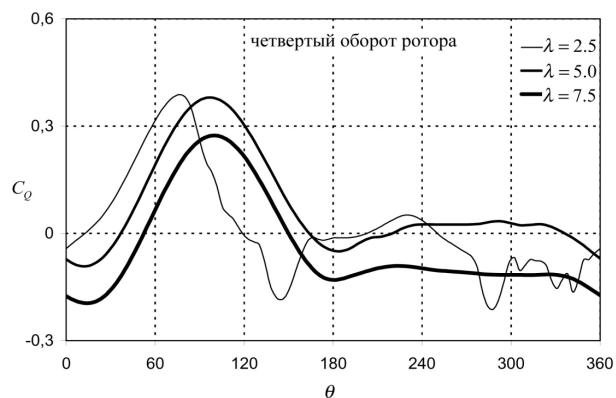


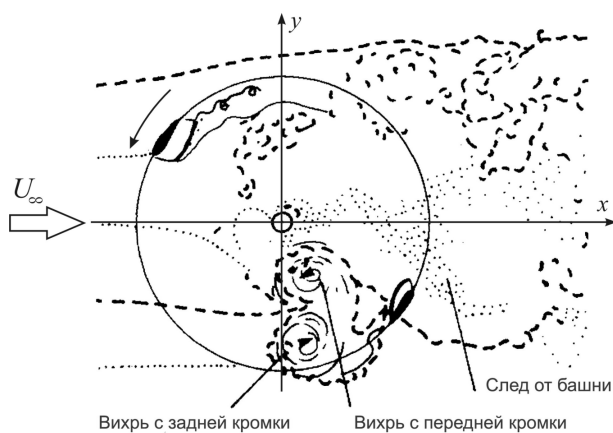
Рис. 14: Изменение неосредненных коэффициентов крутящего момента C_Q от углового положения ротора θ для различных коэффициентов быстроходности λ .

Для иллюстрации особенностей обтекания ротора Дарье были выбраны геометрические параметры и коэффициент быстроходности, соответствующие экспериментальной работе G. Brochier [31] (рис. 15). На рис. 15б кроме стандартной визуализации вихрей добавлены сплошные и прерывистые линии, а также отдельные точки для того, чтобы стиль интерпретации расчетных данных соответствовал стилю визуализации экспериментальных данных работы G. Brochier [31]. Приведена реконструкция структуры течения при работе двух- и трехлопастного роторов Дарье для коэффициента быстроходности $\lambda = 2.14$ на основе натурального (а) и вычислительного (б) экспериментов (рис. 16). Для наглядности оставлены вихри максимальной интенсивности. Выделены стадии зарождения, развития и срыва вихрей при различных положениях лопасти на траектории.

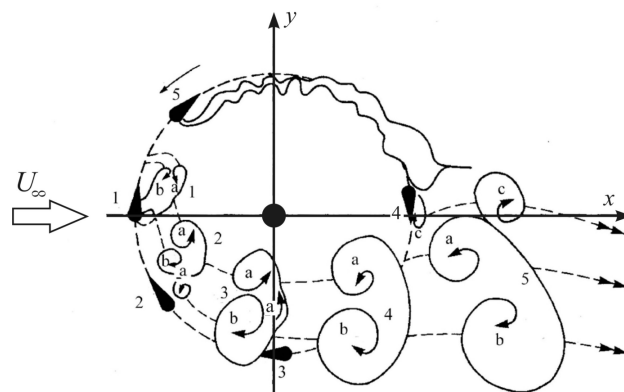
В целом картина течения вблизи ротора Дарье характеризуется существенными нестационарными явлениями. К ним относятся: динамический срыв потока, образование сложной системы вихрей, повышение уровня турбулентности в затененной области, взаимодействие вихрей различных размеров, скоростей движения и интенсивности с подвижными поверхностями роторов. Полученная картина течения хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными [31].

Установлено влияние чисел Рейнольдса, коэффициентов быстроходности и заполнения на энергетические характеристики ротора Дарье (рис. 17, 18). Показано, что рост числа Рейнольдса приводит к увеличению значений коэффициента мощности (рис. 17, 18). При уменьшении коэффициента заполнения ротора Дарье коэффициент мощности становится менее чувствительным к изменению коэффициента быстроходности.

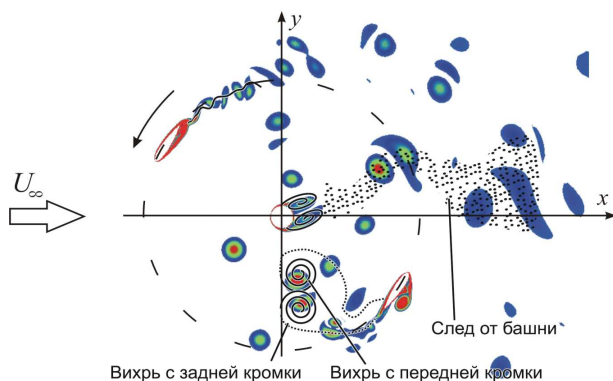
Ротор Савониуса. При численном моделировании обтекания двух- и трехлопастных роторов Савониуса выполнены три типа вычислительных экспериментов. Первый тип – вычислительные эксперименты для неподвижного ротора Савониуса, который фиксировался при различных углах относительно набегающего потока с шагом $\Delta\theta = 10^\circ$. Для большинства угловых положений ротора Савониуса осредненный по времени коэффициент крутящего момента положительный.



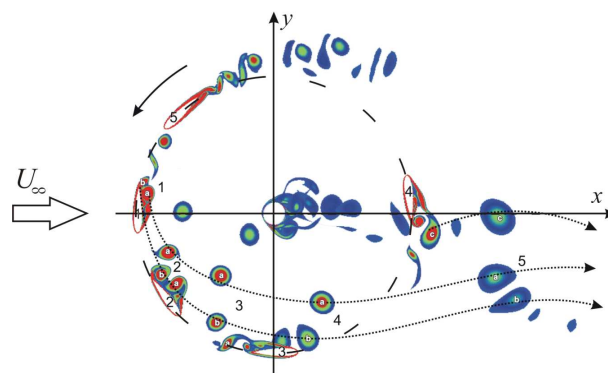
а)



а)



б)



б)

Рис. 15. Визуализация течения при работе двухлопастного ротора Дарье для коэффициента быстроходности $\lambda = 2.14$ на основе натурального (а) и вычислительного (б) экспериментов.

Рис. 16. Реконструкция структуры течения при работе двухлопастного ротора Дарье для коэффициента быстроходности $\lambda = 2.14$ на основе натурального (а) и вычислительного (б) экспериментов.

Второй тип – вычислительные эксперименты при фиксированном коэффициенте быстроходности ротора. Коэффициенты крутящего момента и мощности двух- и трехлопастного ротора Савониуса определялись осреднением за один полный оборот. Вращение ротора при $\lambda = 1.4$ характеризуется квазистационарным режимом обтекания. Выделены основные стадии формирования вихревой структуры при вращении ротора (рис. 19, 20). Периодичность в структуре течения вокруг ротора наблюдается через 180° и 120° для двухлопастного и трехлопастного соответственно. Визуализация обтекания выполнена с помощью контуров завихренности. Определены зависимости коэффициентов крутящего момента и мощности от коэффициента быстроходности.

У двухлопастного ротора значения энергетических характеристик выше, чем у трехлопастного (рис. 21). Полученные результаты удовлетворительно согласуются с известными экспериментальными данными [28].

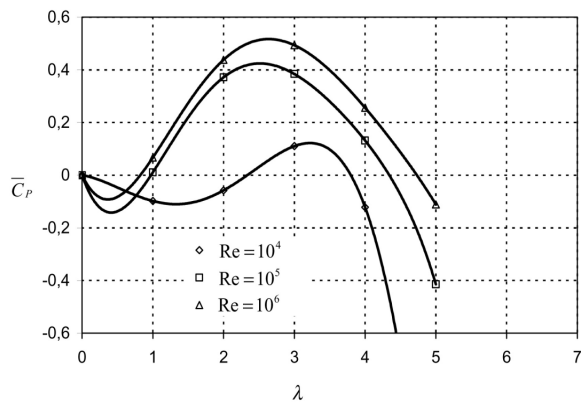


Рис.17. Зависимость осредненного коэффициента мощности ротора Дарье от коэффициента быстроходности для различных чисел Рейнольдса ($\sigma = 0.67$).

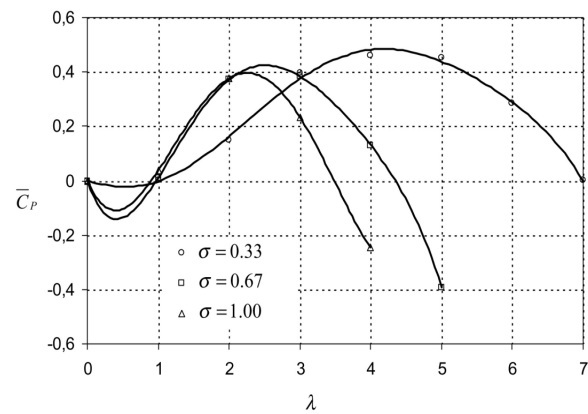


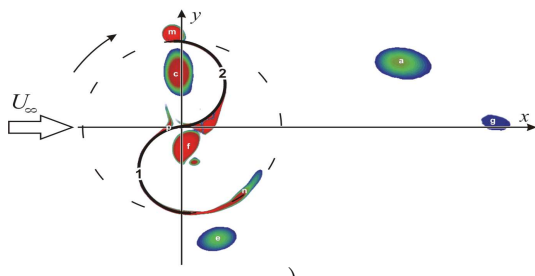
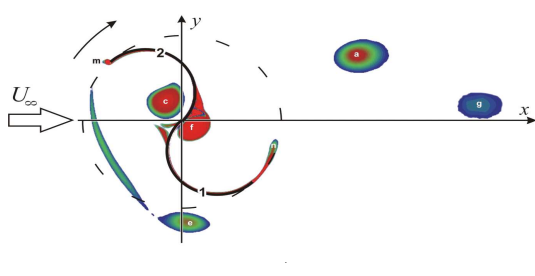
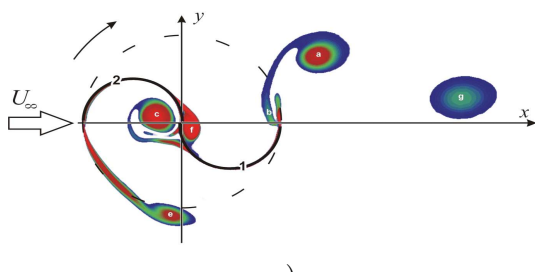
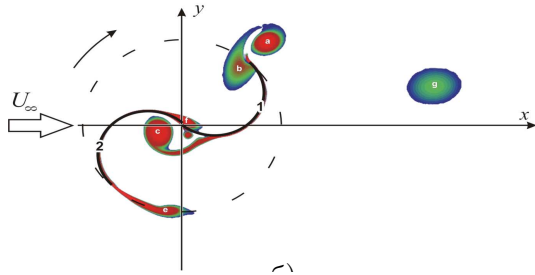
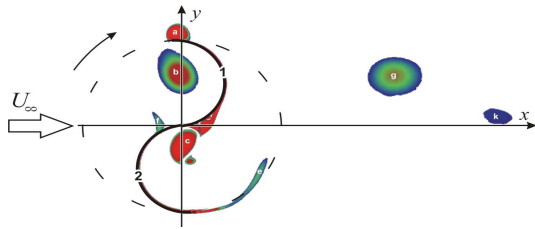
Рис. 18. Зависимость осредненного коэффициента мощности ротора Дарье от коэффициента быстроходности для различных коэффициентов заполнения ($Re = 10^5$).

Третий тип вычислительных экспериментов – решение связанной задачи динамики и аэродинамики трехлопастного ротора Савониуса. Проанализирована картина течения вокруг ротора, приведены зависимости коэффициентов лобового сопротивления, подъемной силы и крутящего момента, а также угловой скорости вращения от времени (рис. 22).

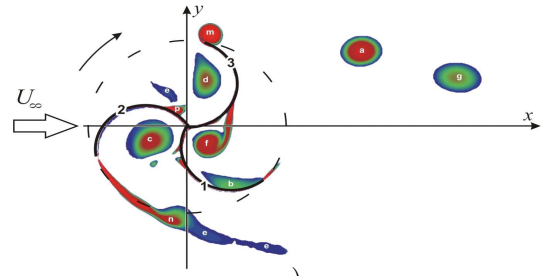
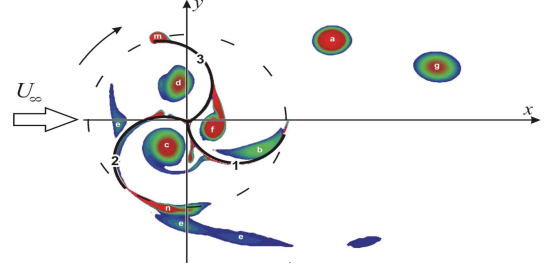
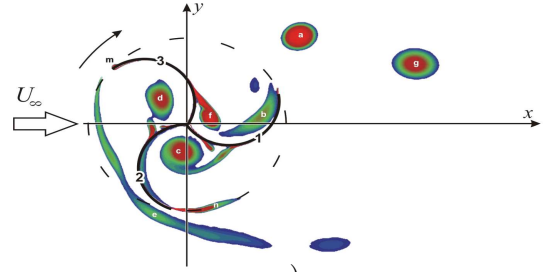
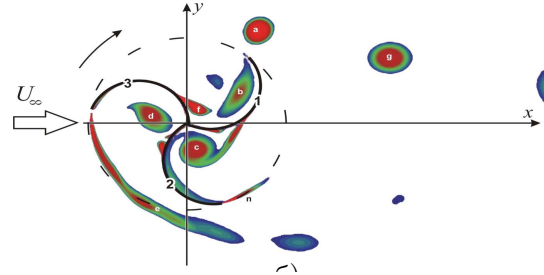
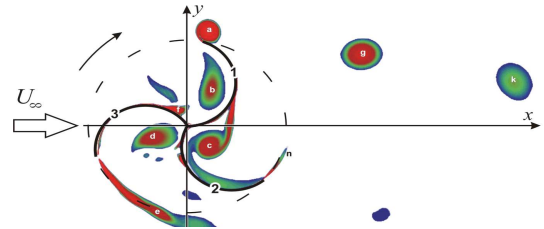
Расчет проводился в три этапа. Целью первого этапа ($t = 0 \div 7$) было получение периодического течения, по структуре похожего на дорожку Кармана. На втором ($t = 7 \div 13$) и третьем ($t = 13 \div 23$) этапах совместно с аэродинамической задачей решалось уравнение вращения ротора Савониуса. С момента времени $t = 7$ ротор освобождается и вращается под действием набегающего потока ветра.

Вращение ротора приводит к увеличению интенсивности вихрей. Частота схода вихрей определяется скоростью набегающего потока, характерными размерами и частотой вращения самого ротора.

На третьем этапе, в момент времени $t = 13$, к ротору Савониуса прикладывается момент нагрузки. Происходит стабилизация угловой скорости вращения ротора (относительно среднего значения $\bar{\omega} = 2.8$), а также возникают близкие к периодическим, колебания коэффициентов лобового сопротивления, подъемной силы и крутящего момента (рис. 22).



д)



д)

Рис. 19: Контуры завихренности возле подвижного ($\lambda = 1.4$) двухлопастного ротора Савониуса: а) $\theta = 0^\circ$; б) $\theta = 45^\circ$; в) $\theta = 90^\circ$; г) $\theta = 135^\circ$; д) $\theta = 180^\circ$.

Рис. 20. Контуры завихренности возле подвижного ($\lambda = 1.4$) трехлопастного ротора Савониуса: а) $\theta = 0^\circ$; б) $\theta = 30^\circ$; в) $\theta = 60^\circ$; г) $\theta = 90^\circ$; д) $\theta = 120^\circ$.

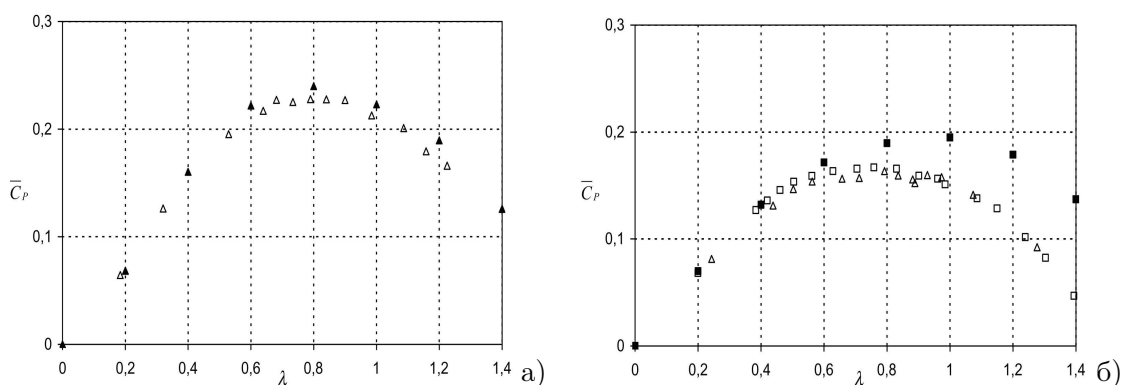


Рис. 21. Зависимость осредненного за один оборот коэффициента мощности \bar{C}_P от коэффициента быстроходности λ двух-(а) и трехлопастного (б) ротора Савониуса Δ , \square - эксперимент В. Blackwell ($Re= 4.32 \times 10^5$, $Re= 8.64 \times 10^5$); \blacktriangle , \blacksquare - настоящая работа ($Re= 4.32 \times 10^5$, $Re= 8.64 \times 10^5$).

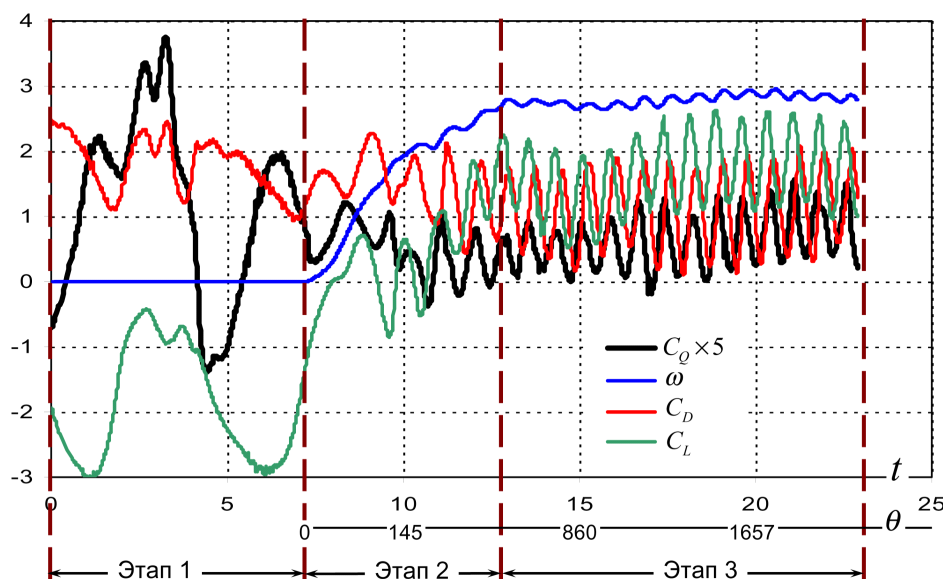


Рис.22: Изменение неосредненных коэффициентов лобового сопротивления C_D , подъемной силы C_L , крутящего момента C_Q и угловой скорости вращения ω трехлопастного ротора Савониуса от времени t и углового положения ротора θ .

5. Выводы

Для численного моделирования нестационарных турбулентных отрывных несжимаемых течений применяются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса. Замыкание системы уравнений осуществлено с помощью модели турбулентности Спаларта-Аллмараса и её модификаций. Реализация используемого подхода выполнена с помощью разработанного программно-методического обеспечения численного решения уравнений Навье-Стокса несжимаемой жидкости в произвольных неортогональных координатах на по-

движных сетках. Выполнено тестирование программно-методического обеспечения на задачах о циркуляционном течении в квадратной каверне, обтекании неподвижного и вращающегося цилиндров. Проведено сравнение результатов расчетов обтекания неподвижного и колеблющегося профилей. Представлены результаты расчета роторов Дарье и Савониуса с различным количеством и геометрическими характеристиками лопастей. Выполнен анализ поля течения вокруг роторов. Выделены основные стадии формирования вихревой структуры. Вязкие и динамические эффекты играют основную роль в работе ротора Дарье, максимальный крутящий момент создается на наветренном участке траектории лопасти. Установлено влияние числа Рейнольдса, коэффициентов быстроходности и заполнения на энергетические характеристики ротора Дарье.

Литература

1. Белов И.А. Задачи и методы расчета отрывных течений несжимаемой жидкости / И.А.Белов, С.А.Исаев, В.А.Коробков. – Л.: Судостроение, 1989. – 256с.
2. Белов И.А. Теплоотдача и сопротивление пакетов труб / И.А.Белов, Н.А.Кудрявцев. – Л.: Энергоатомиздат, 1987. – 223с.
3. Белоцерковский С.М. Математическое моделирование плоскопараллельного обтекания тел /С.М.Белоцерковский, В.Н.Котовский, М.И.Ништ. – М.: Наука, 1988. – 232с.
4. Блинова Л.А., Шур М.Л. Метод "масштабирования сжимаемости" для расчета нестационарных течений вязкого газа в широком диапазоне изменения характерных чисел Маха / Конструирование алгоритмов и решение задач математической физики / Л.А.Блинова. – М.: ИПМ, 1991. – С.34-39.
5. Волков Н.И. Аэродинамика ортогональных ветродвигателей (некоторые математические модели и численная реализация). Учебное пособие / Н.И.Волков. – Сумы: ВВП "Мрия-1" ЛТД, 1996. – 198с.
6. Гогиш А.В., Нейланд В.Я., Степанов Г.Ю. Теория двумерных отрывных течений // Итоги науки и техники. Гидромеханика. – М.: Наука, 1975. – 8. – С.5-73.

7. Гогиш Л.В. Турбулентные отрывные течения / Л.В.Гогиш, Г.Ю.Степанов. – М.: Наука, 1979. – 368с.
8. Гончаров В.А., Кривцов В.М., Чарахчян А.А. Численная схема моделирования дозвуковых течений вязкого сжимаемого // ЖВМ и МФ. – 1988. – 28;12. – С.1858–1866.
9. Госмен А.М. Численные методы исследования течений вязкой жидкости / А.М.Госмен, Пан В.М., Ранчел А.К. и др. – М.: Мир, 1972. – 323с.
10. Госмен А.М. Дальнейшее развитие метода маркеров и ячеек для течений несжимаемой жидкости / Численные методы в механике жидкостей. – М.: Мир, 1973. – С.165–173.
11. Кривцов В.С. Неисчерпаемая энергия / В.С.Кривцов, А.М.Олейников, А.И.Яковлев. – Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т "ХАИ", 2003. – 919с.
12. Лапин Ю.В. Внутренние течения газовых смесей / Ю.В. Лапин, М.Х.Стрелец. – М.: Наука, 1989. – 368с.
13. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа /Л.Г.Лойцянский. – М.: Наука. 1987.– 840с.
14. Патанкар С.В. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / С.В.Патанкар. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 152с.
15. Приходько А.А. Компьютерные технологии в аэрогидродинамике и тепломассообмене / А.А.Приходько. – Киев: Наукова думка, 2003. – 380с.
16. Приходько А.А., Редчиц Д.А. Численное моделирование нестационарного течения в следе за цилиндром на основе уравнений Навье-Стокса // Прикладная гидромеханика. – 2005. – 7;1. – С.56–71.
17. Приходько А.А., Редчиц Д.А. Математическое моделирование динамики и аэродинамики вертикально-осевых ветроагрегатов // Вестник Харьковского национального университета. – 2005. – 703;5. – С.178–197.
18. Приходько А.А., Редчиц Д.А. Численное моделирование эффекта Магнуса на основе уравнений Навье-Стокса // Вісник Дніпропетровського університету. Механіка.– 2005. –1;7. – С.40–60.

19. Приходько А.А., Редчиц Д.А. Численное моделирование дозвукового обтекания осциллирующего профиля на основе уравнений Навье-Стокса // Техническая механика. – 2006. – 1. – С.104–114.
20. Приходько А.А., Редчиц Д.А. Компьютерное моделирование аэродинамики подвижных роторов ветроагрегатов Дарье и Савониуса // Аэрогидродинамика: проблемы и перспективы. – 2006. – 2. – С.120–142.
21. Редчиц Д.А., Приходько А.А. Численное решение связанной задачи динамики и аэродинамики ротора ветроагрегатов // Космическая наука и технология. – 2005. – 11;1. – С.27–35.
22. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / П.Роуч. – М.: Мир, 1980. – 616с.
23. Стрелец М.Х., Шур М.Л. Метод масштабирования сжимаемости для расчета стационарных течений вязкого газа при произвольных числах Маха // ЖВМ и МФ. – 1988. – 28; 2. – С.254–266.
24. Темам Р. Уравнения Навье-Стокса. Теория и численный анализ / Р.Темам. – М.: Мир, 1981. – 408с.
25. Чжен П. Управление отрывом потока. Экономичность, эффективность, безопасность / П.Чжен. – М.: Мир, 1979. – 552 с.
26. Чжен П. Отрывные течения / Чжен П. – М.: Мир, Т.1, 1972 – 300с.; Т.2, 1973. – 280 с.; Т.3,1973. – 334с.
27. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г.Шлихтинг. – М.: Наука, 1974. – 711с.
28. Blackwell B.F., Sheldahl R.E., Feltz L.V. Wind tunnel performance data for two- and three-bucket Savonius Rotors // Sandia National Laboratories Albuquerque. SAND76-0131. – 1976. – P.105.
29. Briley W.R., McDonald H. Solution of the multidimensional Navier-Stokes equations by a generalized implicit method // Journal of Computation Physics. – 1977. – 24;4. – P.372-397.
30. Briley W.R., McDonald H., Shamreth S.J. A low Mach number Euler formulation and application to time-iterative LBI schemes // AIAA Journal. – 1983. – 21;10. – P.1464–1469.

31. Brochier G., Fraunie P., Beguier C., Paraschivoiu I. Water channel experiments of dynamic stall on Darrieus wind turbine blades // *Journal Propulsion*. – 1986. – 2;5. – P.445-449.
32. Bunge U., Martin A., Schmidt S., Schatz M., Thiele F. DES and its Applications at Technical University of Berlin // *Proc. International Conference on DES. – Workshorp. – St. Petersburg, 2003.*
33. Caretto L.S., Gosman A.D., Patankar S.V. and Spalding D.B. Two calculation procedures for steady three-dimensional flows with recirculation // *Proceedings of the 3rd Int. Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Paris, France, 1972. – P. 60.*
34. Chan R.K.-C., Street R. Lt., Strelkoff T. Computer studies of finite-amplitude water waves // *Tech. Rep, 104, Dep. of Civil Eng., Stanford Univ., Stanford, California.–1969.– P.126.*
35. Chan R.K.-C., Street R.L. A computer study of finite-amplitude water waves // *Journal of Computation Physics. – 1970. – 6. – P.68-94.*
36. Choi Y.-H., Merkle, C.L. The Application of Preconditioning to Viscous Flows // *Journal of Computational Physics. – 1993. – 105. – P.207-223.*
37. Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // *Journal of Computation Physics. – 1967. – 2. – P.12-26.*
38. Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous incopressible flow with free surface // *Physics of Fluids. – 1965. – 8;12. – P.2182–2189.*
39. Oler J.W., Strickland J.H., Im B.J., Graham G.H. Dynamic stall regulation of the Darrieus turbine // *SAND83-7029. Texas technical university. – 1983. – P.154.*
40. Piziali R.A. An experimental investigation of 2D and 3D oscillating wing aerodynamics for a range of angle of attack including stall // *NASA TM 4632. –1993.*
41. Paraschivoiu I. Wind turbine design with emphasis on Darrieus concept / I.Paraschivoiu. – Canada: Polytechnic international press, 2002. – 438p.

42. Patankar S.V., Spalding D.B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows // *Journal Heat and Mass Transfer*. – 1972. – 15. – P.1787–1806.
43. Prykhodko O., Redchyts D. Mathematical modelling of vertically-axis wind turbine work on the basis of Navier-Stokes equations // *Proc. Flow and Transport Processes in Complex Obstructed Geometries: From Cities and Vegetative Canopies to Industrial Problems*. – Institute of Hydromechanics of NASU Kyiv (Ukraine). – 2004. – P.161.
44. Prykhodko O., Redchyts D. Numerical modelling of dynamics and aerodynamics processes of Darrieus and Savonius rotors // *Proc. 77th Annual Meeting of the Gesellschaft fur Angewandte Mathematik und Mechanic*. – Technische Universitat Berlin. – 2006. – P.346.
45. Rogers S.E., Kwak D. An upwind differencing scheme for the incompressible Navier-Stokes equations // *Journal Numerical Mathematics*. – 1991.– 8. – P.43-64.
46. Rogers S.E., Kwak D. An upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible Navier-Stokes equations // *AIAA Journal*. – 1990. – 28;2. – P.253-262.
47. Roshko A. On the development of turbulent wakes from vortex streets // *NACA Report*. – 1954. – 1191. – P.32–65.
48. Rung T., Bunge U., Schatz M., Thiele F. Restatement of the Spalart-Allmaras eddy-viscosity model in strain-adaptive formulation // *AIAA Journal*. – 2003. – 4;7. – P.1396-1399.
49. Turkel E. Review of preconditioning methods for fluid dynamics // *Applied Numerical Mathematics*. – 1993. – 24. – P.257-284.
50. Turkel E., Vatsa V. N., Radespiel R. Preconditioning Methods for Low-Speed Flows // *ICASE*. – 1996. – 57. – 19pp.
51. Sheldahl R.E., Klimas P.C. Aerodynamic characteristics of seven symmetrical airfoil sections through 180-degree angle of attack for use in aerodynamic analysis of vertical axes wind turbines // *Sandia National Laboratories Albuquerque. SAND80-2114*. –1995. – P.118.

52. Shur M.L, Strelets M. K., Travin A.K., Spalart P.R. Turbulence modeling in rotating and curved channels: Assessing the Spalart-Shur correction // AIAA Journal. – 2000. – 38;5. – P.784–792.
53. Spalart P.R., Allmaras S.R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flow // AIAA Paper. – 1992.– 12;1. – P.439–478.
54. Spalart P.R., Shur M. On the sensitization of turbulence models to rotation and curvature // Aerospace science and technology Journal. – 1997. – 1;5. – P.297–366.
55. Van Leer B., Lee W.-T., Roe P. Characteristic timestepping or local preconditioning of the Euler equations // AIAA Paper. – 1991. – 19;6. – P.1552-1587.

MATHEMATICAL MODELLING OF SEPARATED FLOWS ON THE BASIS OF UNSTEADY NAVIER-STOKES EQUATIONS

D.A. Redchits

Institute of Transport Systems and Technologies NANU,
Dnepropetrovsk, Ukraine

The Reynolds averaged Navier-Stokes equation is applied to the numerical simulation of unsteady turbulent separated incompressible flows. The one-parameter differential models of turbulence models are used. The solution of the initial equation system is obtained using the implicit finite-volume numerical algorithm which is based on the artificial compressibility method. Besides, overlapped structured grids are applied in multidomain areas. Verification of developed CFD code is fulfilled on problems concerning the circulating flow in the square cavity, the flow near fixed and rotated cylinders. Comparison of calculations concerning the flow near fixed and oscillating airfoil is carried out. The results of calculations of Darrieus and Savonius rotors with different number of blades and blades with different geometrical characteristics are proposed. The analysis of flow near rotors is done. Main stages of vortex development are allocated. The Reynolds number influence on power characteristics of Darrieus and Savonius rotors is found as well as tip-speed-ratio and solidity.

Key words: separated flow, Reynolds number, Navier-Stokes equations, incompressible liquid, vortex, turbulence, Darrieus and Savonius rotors.

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

В соответствии с государственным контрактом № 02.741.11.2134 с 16 по 20 ноября 2009 г. на базе Белгородского государственного университета состоялась всероссийская конференция с элементами научной школы для молодежи «Проведение научных исследований в области индустрии наносистем и материалов» при поддержке Федерального агентства по науке и инновациям в рамках реализации федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

В работе конференции с элементами научной школы приняли участие 109 человек – студенты, магистранты, аспиранты, молодые ученые и преподаватели в возрасте до 35 лет из 22 городов России.

Молодые ученые и корифеи отечественной науки обсудили результаты проектов, реализованных в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» в области индустрии наносистем и материалов.

На пленарной сессии выступила с докладом заместитель руководителя Федерального агентства по науке и инновациям Инна Биленкина (в докладе речь шла о специфике реализации федеральных целевых программ). Директор научно-образовательного и инновационного центра БелГУ «Наноструктурные материалы и нанотехнологии» Юрий Колобов рассказал о естественнонаучных разработках и применении наноструктурных композитов. А директор ООО «Системы для микроскопии и анализа» Владимир Шкловер сделал сообщение на тему «Динамические методы электронной микроскопии для обеспечения образовательного процесса и научных исследований в сфере наноиндустрии». О размерных эффектах физической наномеханики рассказал директор НОЦ «Нанотехнологии и наноматериалы» Тамбовского государственного университета Юрий Головин.

Заседания и занятия в рамках конференции с элементами научной школы были проведены в аудиториях и лабораториях научно-исследовательского и инновационного Центра наноструктурных материалов и нанотехнологий БелГУ, Центра коллективного пользования научным оборудованием «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» БелГУ.

В рамках конференции с элементами научной школы для молодежи прошли секционные заседания по следующим направлениям: «Методы получения и обработки наноматериалов»; «Методы диагностики и исследования свойств наноматериалов»; «Свойства и применение наноматериалов», на которых молодые исследователи представили результаты своего научного поиска.

Публикацией нескольких сообщений открываем рубрику в нашем журнале «Краткие сообщения».

ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СЛОЕВ TiO₂ НА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНА МЕТОДОМ ИОННО-ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ ИМПЛАНТОЛОГИИ

Е.А. Богданов¹, А.Ю. Гойхман²

¹студент физико-технического факультета Российского государственного университета им. И. Канта

²зав. лаб. ионно-плазменных технологий инновационного парка РГУ им. И. Канта

Имплантация в ткани организма человека искусственных материалов – имплантатов – одна из актуальнейших проблем современной медицины и техники. В частности, важнейшей проблемой является обеспечение высокоразвитой биоинертной поверхности и надёжного сцепления с костной тканью [1]. В этой связи является предпочтительным наличие оксидного слоя (диоксида титана), который превышает по биоинертности основной материал в несколько раз, что наиболее актуально для изготовления дентальных имплантатов и эндопротезов, имеющих контакт с костной тканью.

Исследователями установлено, что материал имплантата, с одной стороны, не должен воздействовать на геном клеток организма, ингибировать белки – остеоиндукторы, угнетать митоз остеогенных клеток, а в дальнейшем деятельность остеобластов и остеоцитов. С другой стороны, поверхность материала должна обеспечивать адсорбцию белков и адгезию клеток, органического и минерального компонентов костного матрикса, а также его физико-химическую связь с поверхностью имплантата [2].

С точки зрения активности по отношению к остеоиндукции и взаимодействию с костным матриксом биосовместимые материалы можно разделить на биоактивные, биоинертные и биотолерантные [3], среди которых особое место занимают биоинертные. К таким материалам относится титан, благодаря своим свойствам низкой токсичности и высокой биосовместимости. Большой успех применения эндостальных титановых имплантатов связан с эффектом формирования прямого интерфейса кость-имплантат без вовлечения мягких тканей. Такое поведение связано с наличием на поверхности титана естественного оксида, на котором, как показали многочисленные исследования, происходит адгезия и связывание белков, а также ионов кальция и фосфора. Однако, толщина оксидной плёнки, образующейся в естественных условиях, не превышает 5-6 нм, что не обеспечивает, во-первых, большой площади остеоинтегрированного контакта; во-вторых, высоких значений силы интеграции, прочности и плотности соединения имплантатов с костью; в-третьих, высокого уровня клинической эффективности имплантатов; и, наконец, высокой коррозионной стойкости.

Конечной целью работы является разработка тонкопленочного наноструктурированного материала на основе оксида титана с наперёд заданными свойствами по толщине, который, при формировании на поверхности костного имплантата, способствует значительному ускорению остеоинтеграции, и улучшению устойчивости имплантированной кости в целом.

В данной работе методами сканирующей электронной микроскопии и спектроскопии в сочетании с ионным профилированием, а также методом резерфор-

довского обратного рассеяния исследованы структурные, химические и морфологические свойства поверхностей и структур исходной подложки титана и тонкопленочного слоя TiO_2 , синтезированного методом ионно-плазменного напыления. Синтез тонкопленочного слоя TiO_2 проводился путем распыления мишени Ti потоком высокоэнергетических ионов Ar^+ (1500 эВ) в атмосфере кислорода низкого давления ($P_{\text{O}_2} \sim 10^{-3}$ Па), при этом исходная поверхность титановой подложки подвергалась последовательно механической полировке, химической очистке (смесью спирта и ацетона 1:1 в ультразвуковой ванне), и ионной очистке в условиях сверхвысокого вакуума ($P \sim 10^{-5}$ Па) плотным потоком ионов энергии ~ 500 эВ в течение 5 минут.

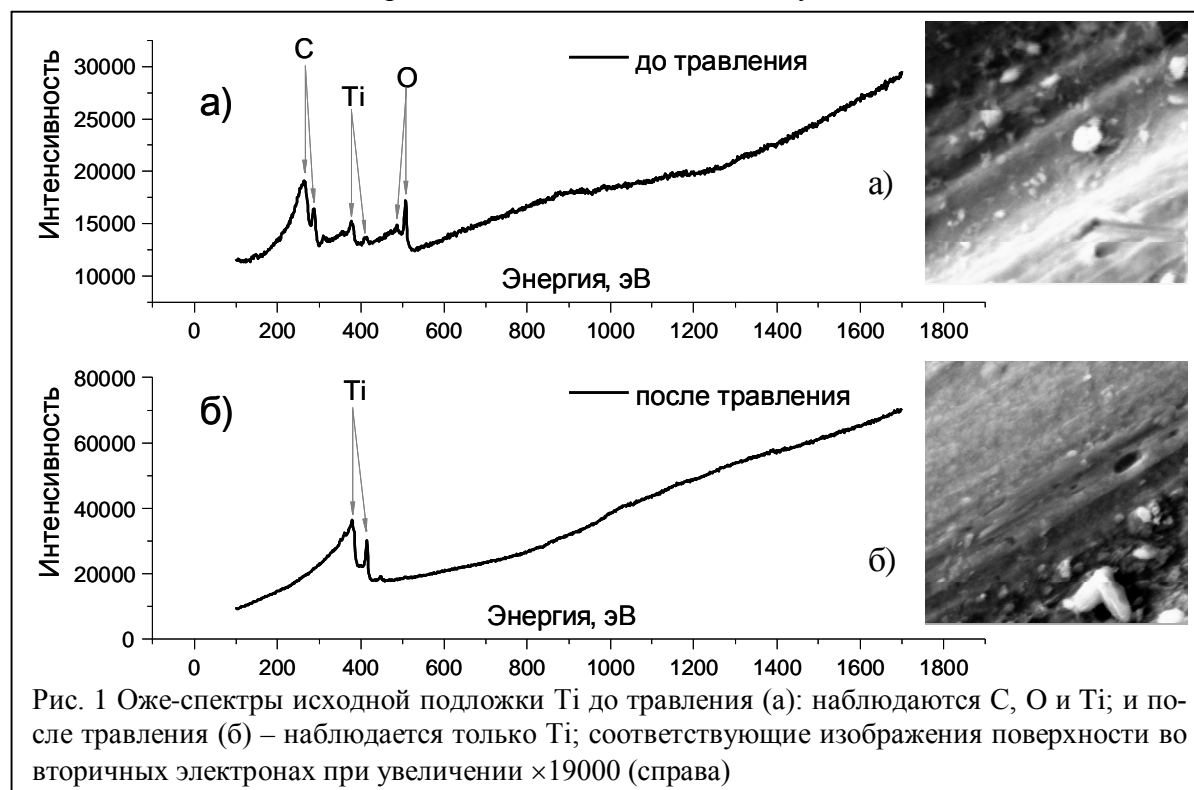
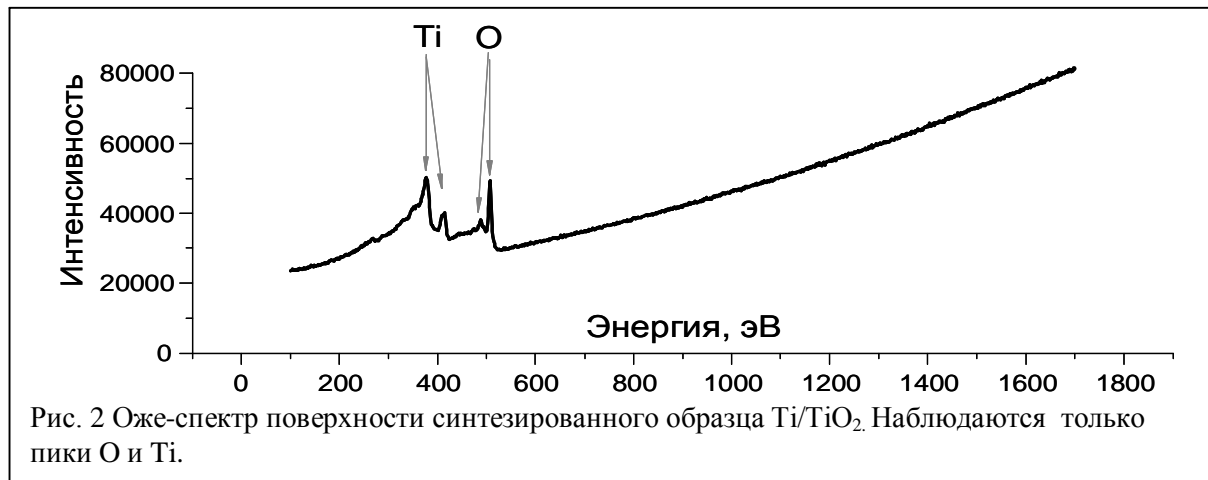


Рис. 1 Оже-спектры исходной подложки Ti до травления (а): наблюдаются C , O и Ti ; и после травления (б) – наблюдается только Ti ; соответствующие изображения поверхности во вторичных электронах при увеличении $\times 19000$ (справа)

На рис. 1 (а) приведены Оже-спектры, характеризующие химическое состояние поверхности исходной подложки Ti после механической полировки. На спектрах регистрируются пики, характерные для атомов углерода кислорода и титана. При этом наличие C и O объясняется присутствием обычного атмосферного загрязнения на поверхности. После проведения химической очистки и ионного травления потоком ионов ~ 500 эВ в течение 5 минут поверхность исходного Ti очистилась от атмосферных загрязнений, что отражено на спектре (б) присутствием вклада от единственного элемента – Ti . Так же, на рис. 1 приведены изображения во вторичных электронах поверхности титана до и после травления, полученные при увеличении $\times 19000$.

В результате проведенного после ионной очистки подложки процесса синтеза тонкопленочного покрытия TiO_2 путём распыления мишени Ti в атмосфере кислорода низкого давления в течении 80 минут была получена структура Ti/TiO_2 с заданной толщиной плёнки, соответствующим стехиометрическим составом, и химическими свойствами. Так на Рис. 2 приведен Оже-спектр поверхности полученного образца, на котором наблюдаются только пики Ti и кислорода. Причем, детальный анализ данных показывает, это позволяет сделать вывод, что стехиометрия состава плёнки близка к стехиометрии TiO_2 .



Кроме того, в работе представлены результаты исследования структурных и морфологических свойств синтезированных образцов, демонстрирующие высокое качество формируемых методом ионно-плазменного напыления тонкоплёночных покрытий TiO₂ на поверхности Ti.

Литература

1. Робустова Т.Г. Имплантация зубов (хирургические аспекты). М.: Медицина. 2003. – 560 с.
2. А.Н.Митрошин, И.А. Казанцев, А.О. Кривенков, П.В. Иванов, С.Н. Чугунов, В.В. Розен, М.А.Розен Ползуновский Альманах №1-2. 2007.
3. V. Strunz, J.Osborn A clinical evaluation of fixed bridge restoration supported by me combination of tees and osseointegrated titanium implants // J. Clin. Periodont. – 1986. – Vol. 13. – P. 307 – 312.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРНЫЕ, ФАЗОВЫЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТОНКИХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

Г.Г. Булавина

Воронежский государственный университет,
магистрант

В настоящее время все более активным становится использование тонких сегнетоэлектрических пленок в энергонезависимых устройствах памяти, микроэлектромеханических системах, оптических высокочастотных модуляторах

[1]. В связи с этим большое внимание уделяется получению и изучению свойств сегнетоэлектрических пленок. В данной работе были синтезированы пленки титаната свинца и цирконата - титаната свинца и изучены их свойства.

Для получения исследуемых пленок брались растворы с соотношением компонентов Pb:Ti:Zr = 1.25:0.5:0.5. При подготовке исходных реагентов свинец вводили в виде ацетата Pb(CH₃COO)₂·3H₂O, титан – в виде n-бутоксиды Ti(OC₄H₉)₄, цирконий – в виде нитрата Zr(NO₃)₄·5H₂O(для ЦТС). Добавлялся в качестве растворителя 2-метаксетанол HOCH₂CH₂OCH₃ и в качестве химического модификатора ацетилацетон CH₃COCH₂COCH₃.

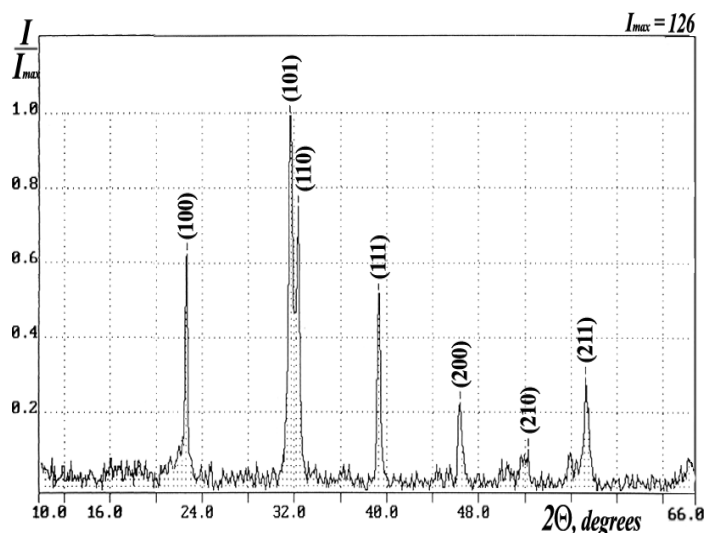


Рис. 1. Дифрактограмма пленок титаната свинца с соотношением свинца и титана в исходных компонентах $Pb/Ti=1,25$

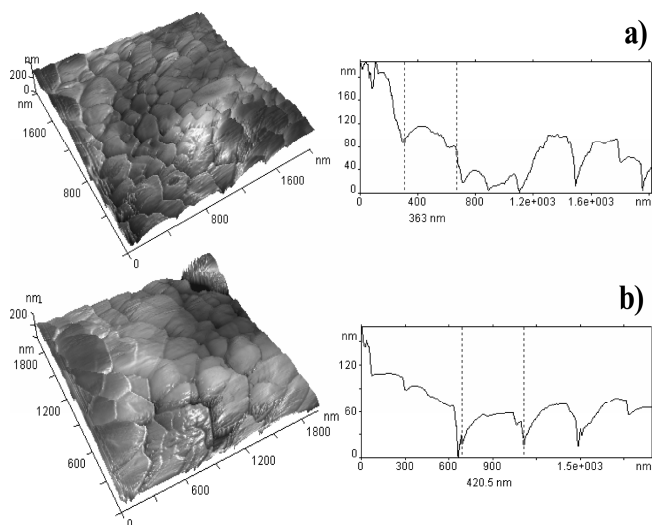


Рис. 2. АСМ изображение участка поверхности пленки титаната свинца на кремневой подложке с соотношением: а) $Pb/Ti=1,05$; б) $Pb/Ti=1,25$.

нетоэлектрические свойства среди пленок титаната свинца проявляют пленки с соотношением свинца и титана в исходных компонентах: $Pb/Ti=1,25$ (рис. 1). Для указанных пленок наблюдаются только рефлексы, соответствующие перовскитовой фазе $PbTiO_3$: по мере убывания интенсивности (101), (110), (100), (111), (211), (200), (210).

Морфология поверхности пленок титаната свинца исследовалась методом атомной силовой микроскопии. Как видно из рис.2, указанные пленки является поликристаллическими с достаточно крупными размерами зерен (кристаллитов), и довольно плотной поверхностью (без ярко выраженных трещин и кратеров). Более однородная структура и большие размеры кристаллов наблюдается у пленок, синтезированных с избытком свинца. Для пленок $PbTiO_3$ с соотношением $Pb/Ti=1,05$ средний размер зерна составляет около 250-300 нм, а для пленок с $Pb/Ti=1,25$ – 400 нм. В итоге исследование проводились на пленках титаната свинца с соотношением $Pb/Ti=1,25$.

В дальнейшем пленки подвергались многократному циклическому переключению для изучения явления усталости [6]. В ходе исследований пленок цирконата-

Далее отдельные слои наносились на вращающиеся с частотой 4000-5000 об/мин поликоробые или кремневые подложки и высушивались при температуре $180^\circ C$ в течении 5 минут. Толщина одного слоя определялась при помощи электронного микроскопа и составляла 80-100 нм. Меняя количество слоев можно было получать пленки различной толщины.

В процессе окончательного высокотемпературного отжига на подложке происходила химическая реакция получения перовскитовой фазы. Были приготовлены образцы, которые отжигались в температурном интервале от $450^\circ C$ до $750^\circ C$, с увеличением температуры отжига увеличивается размер зерен [2-4,5].

Микроструктуру поверхности полученных пленок наблюдали при помощи атомно-силового микроскопа *Femtoscan-001-Online* или электронного микроскопа *Scanning Electron Microscope JEOL JSM-6380LV*. Полученные пленки являлись поликристаллическими с однородной поверхностью. Размеры кристаллитов составляли 100-200 нм.

Экспериментально установлено, что наиболее близкий к стехиометричному состав и яркие сег-

титаната свинца и титаната свинца было установлено, что на процесс усталости кроме величины напряженности внешнего переключающего электрического поля, материала и характеристик подложки, существенное влияние оказывает толщина образца [7].

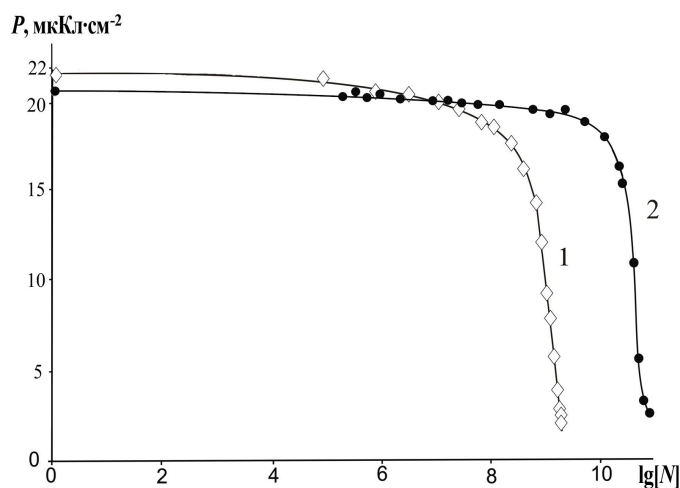


Рис. 3. Зависимости переключаемой поляризации от числа циклов переключения для пленок PbTiO_3 на кремневой подложке при $T = 20^\circ\text{C}$, $E = 160 \text{ кВ}\cdot\text{см}^{-1}$: 1 – для $d = 0,2 \text{ мкм}$; 2 – для $d = 0,5 \text{ мкм}$.

На рис.3. представлена зависимость поляризации для пленок титаната свинца различной толщины на кремневой подложке, исследованных при одинаковых внешних условиях ($f = 2 \cdot 10^6 \text{ Гц}$, $T = 20^\circ\text{C}$, $E = 160 \text{ кВ}\cdot\text{см}^{-1}$). Для пленок $d=0,2 \text{ мкм}$ поляризация достигает минимального значения при $\sim 10^9$ циклов переключения, а для пленок $d = 0,5 \text{ мкм}$ – при 10^{11} циклов переключения. Это подтверждает, что более толстые пленки меньше подвержены процессу усталости, по сравнению с тонкими пленками [8].

Литература

1. Мухортов В.М. Особенности динамики переключения поляризации в тонких пленках цирконата - титаната свинца //Журнал технической физики. – 2005. – №75. – С.126–131.
2. Damjanovic D. Ferroelectric, dielectric and piezoelectric properties of ferroelectric thin films and ceramics // Reports on Progress in Physics. – 1998. – №. 61. – С. 1267–1324.
3. Turik A. V. Features of domain and cluster structures in connection with physical properties and phase transitions in ferroelectrics // Ferroelectrics N 1-4 – 1999. – №.222. – С.33–40.
4. Kundu T. K. Thickness-dependent electrical properties of $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ thin film capacitors for memory device applications // J. Electrochem. Soc. 1 – 2000. – №.147. – С. 326–329.
5. Yang Jun-Kyu. Effect of grain size of $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6})\text{O}_3$ sol-gel derived thin films on the ferroelectric properties //Appl. Surface Sci. – 2001. – №.169-170. – С. 544–548.
6. Tagantsev A.K. Mechanisms of polarization switching in ferroelectric thin films// Ferroelectrics. – 1996. – № 184. – С. 399/79– 407/77.
7. Tagantsev A. K. Injection-controlled size effect on switching of ferroelectric thin films// Appl. Phys. – 1999. – Т.74, №.9. – С. 1326–1328.
8. Lian L. Effects of thickness on the piezoelectric and dielectric properties of lead zirconate titanate thin films// J. Appl. Phys. N 8. – 2000. – №.87.–С. 3941–3939.

ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СЕТЧАТЫХ СТРУКТУР SnO_2 - SiO_2 ПРИ ДЕТЕКТИРОВАНИИ ГАЗА

А.А. Пономарева, аспирант,
А.И. Максимов, канд. физ.-мат. наук, доцент
В.А. Мошников, д-р физ.-мат. наук, профессор
Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ»

В последние годы из-за ухудшения экологии возросла потребность в системах контроля газовой среды на основе сенсорных устройств. Для развития газочувствительных датчиков нового поколения особенно перспективно использование тонких металлоксидных сетчатых структур. Одним из основных материалов, применяемых для изготовления сенсоров указанного типа, в силу ряда достоинств, является диоксид олова. С точки зрения улучшения адгезионных и перколяционных параметров структур наиболее эффективны наноконпозиты системы SnO_2 - SiO_2 .

С экономической точки зрения датчики должны быть получены с помощью достаточно дешевой технологии, чтобы обеспечить возможность их массового производства и доступность большинству потребителей. Этим привлекательно использование химического процесса, получившего название золь-гель метод [1]. Сетчатые структуры в золь-гель технологиях возникают в процессе роста и эволюции фрактальных агрегатов [2], сопровождающихся образованием сложной иерархии пор. Это должно приводить к усложнению температурно-временных зависимостей аналитического отклика при взаимодействии с детектируемым газом. Изменение энергетических характеристик процессов «адсорбции-десорбции» на сетчатых пористых структурах с распределенными фрактально-перколяционными параметрами к настоящему времени не изучены.

Целью работы являлось получение сетчатых структур на основе системы SnO_2 - SiO_2 по золь-гель технологии (при некоторых фиксированных условиях) и исследование изменения их электрофизических свойств при детектировании газов.

Для измерения временных зависимостей резистивного отклика наноконпозитных сеток в условиях изменения газовой среды и температуры была собрана специальная лабораторная установка [3].

На рисунке представлены типичные зависимости изменения сопротивления образцов при напуске паров этанола с концентрацией 1000 ppm в диапазоне температур 300-715 К.

Особый интерес представляет изучение возникновения аномалий в начальные моменты времени. Общий ход зависимости может быть интерпретирован как противоборство двух процессов – быстротекущего процесса акцепторного типа, приводящего к увеличению и достижению насыщения значения сопротивления, и более медленно развивающегося в таких структурах процесса донорного типа, сопровождающегося уменьшением значения сопротивления. Со временем вклад второго процесса становится преобладающим. В традиционной энергетической интерпретации это означает, что в таких структурах энергетические параметры адсорбционно-десорбционных процессов не описываются в рамках моноэнергетической модели. Иными словами энергетические уровни поверхностных центров находятся выше и ниже равновесного положения уровня Ферми.

Данная особенность поведения сетчатых структур с иерархией пор открывает потенциальные возможности создания адсорбционных датчиков нового поколения на принципе анализа первоначального пика. Технически это привлекательно для улучшения быстродействия и повышения селективности. (Повышение селективности обусловлено различием значения сродства к электрону у разных газов). Препятствием в настоящее время является сильная зависимость от предыстории развития и гибели фрактальных агрегатов с образованием иерархии пор.

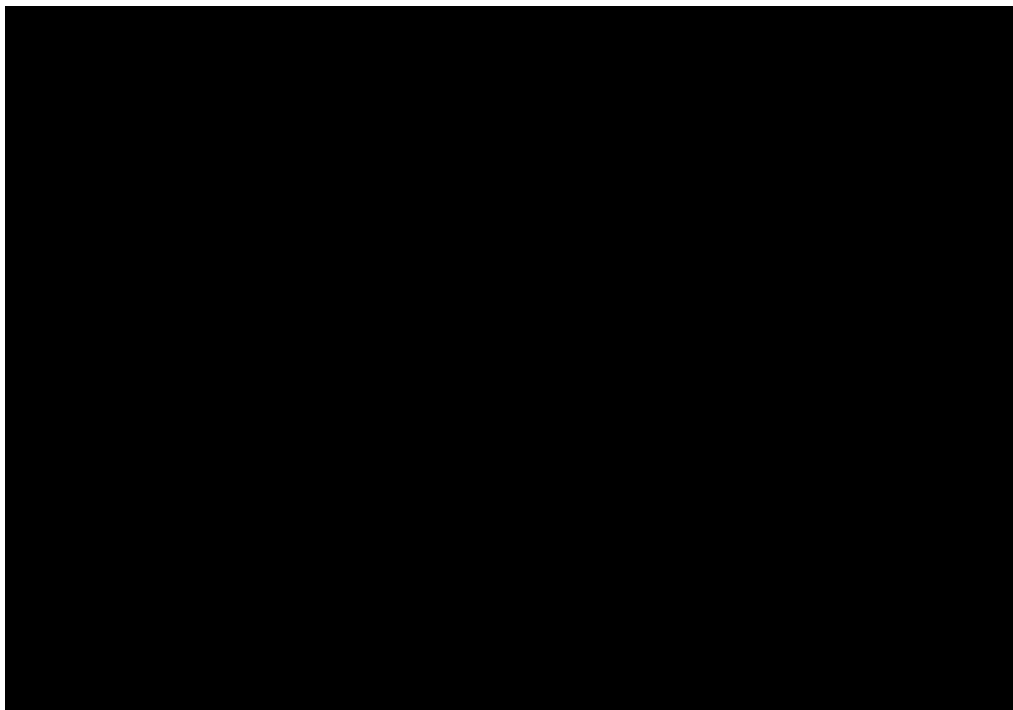


Рис. Сравнительная характеристика процесса детектирования этанола образцом (состав 10%SiO₂-90%SnO₂, получен при температуре отжига 600°C за время 5 минут), происходящем при различных температурах

Отметим, что этот недостаток превращается в неоспоримое достоинство – уникальную возможность энергетического контроля за эволюцией фрактально-перколяционных систем.

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства по образованию, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы по направлению «Создание и обработка композиционных керамических материалов», государственный контракт №П399 от 30.07.2009 г., а также «Проведение научных исследований коллективами под руководством приглашенных исследователей в области химии и новых материалов», государственный контракт №02.740.11.5077, и «Развитие внутрироссийской мобильности научных и научно-педагогических кадров путем выполнения научных исследований молодыми учеными и преподавателями в научно-образовательных центрах», государственный контракт №П1605.

Литература

1. Максимов А. И., Мошников В. А., Таиров Ю. М., Шилова О. А. Основы золь-гель технологии нанокompозитов. 2-е издание. – СПб.: ООО «Техномедиа» / Изд-во «Элмор», 2008. – 225 с.

2. Мошников В. А., Шилова О. А. Золь-гель-технология наноструктурированных материалов. / В кн.: Нанотехнология: Физика, процессы, диагностика, приборы.- М. Физматлит, 2006.- С. 205–249.
3. Грачева И.Е., Максимов А.И., Мошников В.А, Плех М.Е. Автоматизированная установка для измерения газочувствительности сенсоров на основе полупроводниковых наноконструкций // Приборы и техника эксперимента. – 2008. – № 3. – С. 143-146.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК-СПЕКТРОВ ФУЛЛЕРЕНА ВО ВНЕШНЕМ ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

А.В. Тучин, студент
ГОУ ВПО «Воронежский
государственный университет»

Экспериментальное открытие и синтез в макроскопических количествах фуллеренов вызвали широкие и многосторонние исследования этих молекул. Фуллерен и его многочисленные производные, благодаря своим уникальным свойствам, представляют собой перспективные объекты для использования в химии, биологии и медицине, физике и электронике [1]. Большое количество экспериментальных методов было использовано для получения информации об их электрических и оптических свойствах. Экспериментальные результаты по поглощению в УФ, ИК и видимом диапазоне, ЯМР, потенциал ионизации, сродство к электрону хорошо согласуются с теоретическими предсказаниями и численными расчетами. Исследование фуллеренов экспериментально предполагает наличие сложного, дорогостоящего оборудования. Поэтому широко применяется компьютерное моделирование в специальных программных комплексах, одним из которых является программный комплекс для расчета квантово - механических задач Gaussian03.

Gaussian03 позволяет рассчитывать различные свойства молекулярных систем и конденсированных сред, находящихся не только в основном, но и в возбужденных состояниях. Активно ведутся эксперименты над фуллеренами и фуллеритами, как материалами электроники и фотоники, поэтому необходимо глубже изучать процессы, происходящие в молекуле фуллерена во внешнем поле. Однако не все результаты моделирования могут оказаться адекватными, поэтому необходима экспериментальная проверка полученных данных. Связующим звеном является ИК-спектр, который может быть рассчитан на компьютере и экспериментально проверен.

Целью данной работы является исследования влияния электрического поля на вибрационный спектр фуллерена.

Оптимизация геометрии и расчет вибрационных спектров проводились методом DFT, используя приближение локальной спиновой плотности LSDA в базисе 3-21G. ИК-спектр основного состояния фуллерена, рассчитанный данным методом хорошо согласуется с экспериментальным [2]. В присутствии электрического поля атомы смещаются, а величина смещения зависит от начального квантового состояния частицы и величины поля, при этом, в адиабатическом приближении, частицы остаются на одном и том же квантовом подуровне, энергия которого зависит от напряженности поля. Критерием выбора величины поля послужила работа [3], оценка дает для фуллеритов значение напряженности электрического поля $\sim 10^7$ В/см. При моделировании молекула C₆₀ была помещена во внешнее постоянное электрическое поле, величиной $E=5,14 \cdot 10^7$ В/см, которое вызвало перераспределение заряда в системе и появление дипольного момента, относительное удли-

нение фуллерена составляет 0,15%. Поле также привело к химическому сдвигу, что отразилось на снятии вырождения ЯМР спектра фуллерена и значительному его усложнению. Расчет ЯМР и ИК- спектров проводился после оптимизации геометрии. Положение основных пиков (496, 576, 1153 и 1475 cm^{-1}) для свободного фуллерена изменилось на 491, 588, 1192 и 1490 cm^{-1} соответственно, также отмечена активация еще шести колебательных мод 265, 788, 1117, 1252, 1536 и 1604 cm^{-1} , (см. рис.).

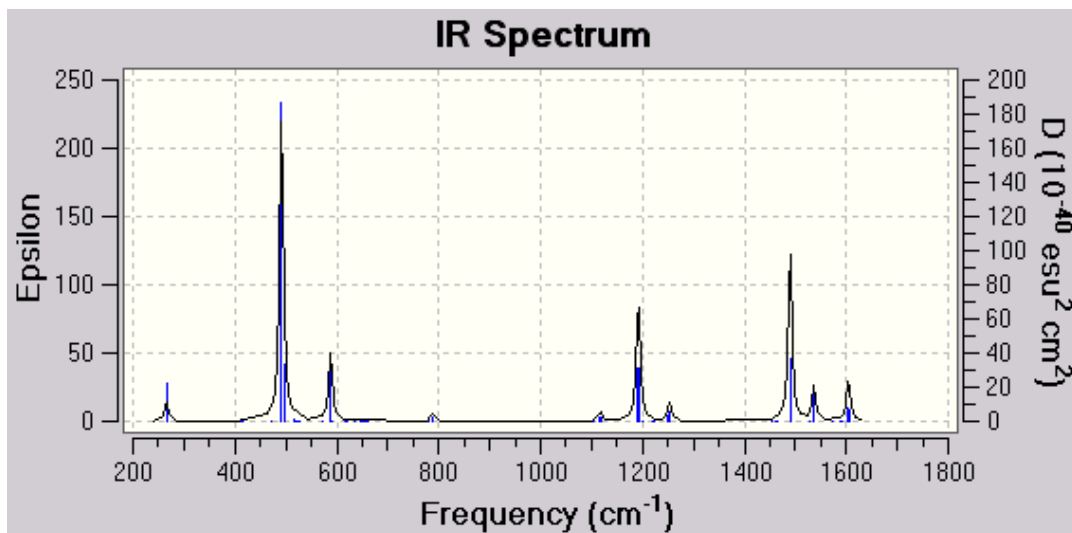


Рис. ИК-спектр фуллерена во внешнем электрическом поле

Усложнение ИК-спектра молекулы произошло из-за понижения симметрии фуллерена и возбуждения π -электронной системы. На фуллерен C₆₀ распространяется напряжённая π -электронная модель. При этом каждый атом углерода имеет три гибридные орбитали и три электрона на образование трёх двухэлектронных σ -связей с соседними атомами. Четвёртый электрон расположен на гибридной p -орбитали ортогональной к трём σ -орбиталям, ориентированной вдоль связей с соседними атомами. Электронная структура фуллеренов, как и всех углеродных соединений, определяется π -электронной системой [3]. Внешнее электрическое поле изменяет состояния молекулярных орбиталей (МО). Методом МО показано, что воздействие электрического поля изменяет, в основном, π -электронную систему, что согласуется с работой [4]. Таким образом, внешним электрическим полем можно направленно менять реакционные свойства фуллерена, влиять на реакции полимеризации.

Литература

1. Han Young Yu Electrical evidence for the encapsulation of C₆₀ inside a carbon nanotube: Random telegraph signal and hysteric current–voltage characteristics // *Phys. Rev. B.* – 2008. – № 78. – 155415.
2. Елецкий А.В. Фуллерены // *УФН.* – 1993. – Т.163, №2. – С.33-60.
3. Макарова Т.Л. Электрические и оптические свойства мономерных и полимеризованных фуллеренов // *ФТП.* – 2001. – Т 35, №3. – С. 257- 293.
4. Shen H. Geometrical deformation and failure behavior of C₆₀ fullerene dimer under applied external electric field // *Molecular Simulation.* – 2006. – V. 32, № 1. – P. 59 – 64.
- 5.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Е.С. Антонова** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Г.С. Абрамов** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Херсонского национального технического университета (г. Херсон)
- М.Г. Абрамов** – аспирант кафедры прикладной математики Херсонского национального технического университета (г. Херсон)
- Д.А. Бакланов** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Е.А. Богданов** – студент физико-технического факультета Российского государственного университета им. И. Канта (г. Калининград)
- Г.Г. Булавина** – магистрант Воронежского государственного университета (г. Воронеж)
- Ю.П. Вирченко** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- И.Е. Внуков** – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.Ю. Гойхман** – заведующий лабораторией ионно-плазменных технологий инновационного парка Российского государственного университета им. И. Канта (г. Калининград)
- А.В. Глушак** – доктор физико-математических наук, декан математического факультета, профессор кафедры математического анализа Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Ю.В. Жандармов** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Зыонг Тхи Жанг** – магистрант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- З.А. Кабилов** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.В. Ковалёв** – аспирант кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)

- И.С. Кучеев** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- С.А. Лактионова** – магистрант физического факультета Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.В. Лиманская** – магистрант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- А.С. Мазманишвили** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной математики Сумского государственного университета (г. Сумы)
- А.И. Максимов** – кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» (г. Санкт-Петербург)
- Н.В. Малай** – доктор физико-математических наук, декан физического факультета, профессор кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- В.А. Мошников** – доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» (г. Санкт-Петербург)
- А.А. Пономарева** – аспирант Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ» (г. Санкт-Петербург)
- Д.А. Редчиц** – кандидат физико-математических наук Института транспортных систем и технологий НАНУ (г. Днепрпетровск)
- А.В. Тучин** – студент Воронежского государственного университета (г. Воронеж)
- Ю.С. Тучина** – аспирант кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Р.А. Шатохин** – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры общей физики Белгородского государственного университета (г. Белгород)
- Е.Р. Щукин** – доктор физико-математических наук, профессор, старший научный сотрудник Института высоких температур РАН (г. Москва)

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ

Принимаются рукописи статей, написанные на русском (или на английском) языке по различным разделам математики и физики. Содержание статей может содержать как результаты оригинальных исследований автора (ов), так и представлять собой обзор по выбранной автором (ами) теме.

Статья должна быть написана с достаточной степенью подробности с таким расчётом, чтобы быть понятной не только узким специалистам по выбранному автором (ами) направлению исследований, но более широкому кругу, соответственно, математиков и физиков. Ни в коем случае рукопись не должна представлять собой краткий отчёт о проведенных исследованиях, написанный в виде краткого сообщения, не содержащий описания постановки задачи (соответственно, условий проведения эксперимента). В связи с этим, рукопись должна быть структурирована – разделена на разделы, представляющие отдельные смысловые единицы текста. В любом случае рукопись должна содержать введение и заключение.

Во введении должна быть кратко описана проблема, которой посвящена рукопись, определено место этой проблемы в общем объёме физико-математического знания, должна быть дана краткая история вопроса и описан полученный автором (ами) результат. В заключении должна быть дана краткая характеристика полученного результата и указано его значение в дальнейшем развитии темы работы.

Те же самые требования к введению и заключению предъявляются для обзорной статьи, с той лишь разницей, что её содержание должно быть посвящено описанию всей совокупности результатов, отражающих состояние выбранной автором области исследований, и сам текст должен быть написан с большей степенью подробности.

Принимаются также для публикации статьи, носящие методический характер. Но в этом случае решение о возможности публикации такой рукописи принимается отдельным решением редколлегии журнала.

Рукопись должна быть оформлена в соответствии с традициями написания, соответственно, математических и физических текстов. В частности, в математических текстах должны быть чётко выделены такие структурные единицы, как формулировки определений, теорем и лемм, следствий и замечаний, отмечены начала и окончания доказательств.

Полный объём рукописи, которая представляет собой оригинальное исследование, не должен превышать 20 страниц формата А4 и должен быть написан шрифтом 14pt через два интервала. Объём обзорной статьи необходимо заранее оговорить с редколлегией журнала.

Рукопись должна состоять из следующих частей:

1) основной содержательной части, представленной на русском или английском языках. Она должна начинаться указанием номера УДК того научного направления, которому посвящена статья. Затем следует название статьи. Оно должно состоять не более, чем из 20 слов. Далее приводится список авторов статьи, затем следует полностью основная часть рукописи;

2) аннотации на русском языке. Её объём не должен превышать 10-12 строк, написанных шрифтом 12pt;

- 3) списка ключевых слов (не более 10-12).
- 4) перевода заглавия, аннотации и ключевых слов на английском языке;

5) списка литературных источников, на которые имеются ссылки в тексте рукописи;

6) данных об авторах статьи с указанием места работы точного почтового адреса и занимаемой должности. Должны быть указаны адреса электронной почты. Эти данные необходимо представить и на английском языке. Кроме того, должна быть дана латинская транскрипция фамилий авторов. Соответственно, для статей на английском языке должна быть дана транскрипция фамилий авторов кириллицей;

- 7) списка подписей к рисункам, если они имеются в рукописи;

8) укороченного заголовка статьи, состоящего не более, чем из трех слов, который печатается в колонтитулах журнала.

В редакцию присылается электронный вариант рукописи. Он должен быть подготовлен в редакторе LaTeX (LaTeX2 ϵ , AMSLaTeX). При этом нужно также прислать файл с pdf-копией рукописи для того, чтобы редакция имела возможность сравнения с авторским оригиналом при редактировании.

Если в рукописи имеются рисунки, то они должны быть подготовлены в формате "eps" и соответствующие им файлы необходимо пронумеровать в соответствии со списком подписей к рисункам (п. 7).

Особые требования к электронному набору в редакторе LaTeX следующие:

- 1) нельзя использовать вводимые авторами новые нестандартные команды;

2) выключные формулы должны быть пронумерованы в порядке их появления в рукописи в том случае, если на них есть ссылки в тексте. При использовании режима equation для набора выключных формул обязательно употребление для их нумерации цифровых меток, соответствующих номеру формулы. Допускается применение для нумерации формул цифр, снабжённых штрихами. Однако, этим нужно пользоваться только в случае крайней необходимости с целью более точной передачи смысла текста. В случае, если в статье имеются части в виде приложений, нумерация содержащихся в них выключных формул может быть не зависимой от нумерации основного текста. При этом в приложениях рекомендуется употребление двойной нумерации, в которой первый символ может быть прописной буквой или номером приложения;

3) то же самое касается литературных источников, на которые имеются ссылки в тексте рукописи. Их нужно отмечать цифрами в порядке появления в тексте, и ни в коем случае не использовать метки другого типа.