

СОДЕРЖАНИЕ

Том 59, номер 6, 2021

Выпуск, посвященный памяти академика В.Е. Фортова 803

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЫ

- Процессы термической и “холодной” ионизации паров металлов в окрестности критической точки перехода пар—жидкость
А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин 805
- Асимптотика нулевых колебаний и спектральной плотности энергии равновесного излучения в неидеальной плазме
С. А. Маслов, С. А. Тригер 812
- О сдвиге границ термодинамической неустойчивости асимметричной комплексной плазмы с учетом эффекта нелинейного экранирования
И. А. Мартынова, И. Л. Иосилевский 817
- Обменно-корреляционные экситоны в плазменных средах. Метод Монте-Карло и “проблема знаков”
В. С. Филинов, П. Р. Левашов, А. С. Ларкин 826
- Аномалии профиля пространственного заряда и фазовые переходы в модифицированных моделях однокомпонентной плазмы
И. Л. Иосилевский, А. Ю. Чигвинцев, Л. Ю. Ногонова, И. Г. Зорина 836
- Электрооптический эффект в кремнии, наведенный импульсом терагерцевого излучения
О. В. Чефонов, А. В. Овчинников, М. Б. Агранат 844

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

- Универсальное уравнение состояния для критической и сверхкритических областей
Е. М. Апфельбаум, В. С. Воробьев 852
- Ударная сжимаемость монокристаллического кремния в диапазоне давлений 280–510 ГПа
Д. Н. Николаев, М. И. Кулиш, С. В. Дудин, В. Б. Минцев, И. В. Ломоносов, В. Е. Фортов 860
- Излучение кремния при давлении ударного сжатия 68 ГПа и в процессе разгрузки в вакуум
М. И. Кулиш, В. Б. Минцев, С. В. Дудин, Д. Н. Николаев, И. В. Ломоносов, В. Е. Фортов 865

ТЕПЛОМАССОБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ ГАЗОДИНАМИКА

- Кинетика двухфазных газожидкостных сред в процессах электролиза
Р. Н. Кашапов, Л. Н. Кашапов, Н. Ф. Кашапов, В. Ю. Чебакова 869
- Излучательно-измерительный комплекс для исследования прохождения сверхширокополосных сигналов в атмосфере и ионосфере Земли
М. В. Ефанов, Е. Ф. Лебедев, А. В. Ульянов, В. М. Федоров, М. А. Шурупов 877

ОБЗОРЫ

- Динамические методы в физике неидеальной плазмы. Начало
В. Б. Минцев 885

Различные механизмы инициирования детонации – “вечнозеленая тема” академика Фортова <i>А. В. Еремин</i>	903
Влияние магнитного поля на газодинамические разрывы и устойчивость фронта ударной волны <i>О. А. Синкевич</i>	925

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Распространение сверхкороткого терагерцевого импульса с высокой амплитудой электрического поля в образце кремния <i>А. А. Юркевич, А. В. Овчинников, М. Б. Агранат</i>	948
Аналитическая аппроксимация для уравнения состояния вырожденного электронного газа <i>В. П. Коновалов, Э. Е. Сон</i>	952
Измерения коэффициента пропускания кремния под воздействием излучения интенсивных ударных волн в ксеноне <i>М. И. Кулиш, В. Б. Минцев, С. В. Дудин, Д. Н. Николаев, И. В. Ломоносов, В. Е. Форттов</i>	956
Влияние запаздывания на эволюцию эпидемий <i>А. М. Игнатов, С. А. Тригер, Е. Б. Чернявский</i>	960

В МИРЕ ТЕПЛОФИЗИКИ

Научные аспекты техногенной аварии и восстановления Саяно-Шушенской ГЭС <i>М. П. Федоров, Ю. К. Петреня</i>	964
XXXVI Международная конференция “Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом”	969

ВЫПУСК, ПОСВЯЩЕННЫЙ ПАМЯТИ АКАДЕМИКА В.Е. ФОРТОВА

DOI: 10.31857/S0040364421060181

Уважаемый читатель! Перед Вами специальный выпуск журнала “Теплофизика высоких температур”, посвященный памяти выдающегося российского физика – академика Владимира Евгеньевича Фортова (23.01.1946–29.11.2020), трагически ушедшего от нас год назад. Он был всемирно известным ученым, лауреатом большого количества почетных званий и престижных премий. Фортов В.Е. внес огромный вклад в развитие научных знаний по физике экстремальных состояний вещества и физике высоких плотностей энергии, теплофизике и энергетике, физике ударных и детонационных волн и в ряде других областей физики и техники.

Среди этих поразительных по широте спектра научных интересов В.Е. Фортова особое место занимают исследования теплофизических свойств вещества при высоких давлениях и температурах и физика неидеальной плазмы. Именно с этой тематики началась научная деятельность В.Е. Фортова, и именно она оставалась в центре его внимания всю жизнь. Физикой неидеальной плазмы и динамических воздействий на вещество В.Е. Фортов увлекся, будучи еще студентом и аспирантом МФТИ, в Центре им. Келдыша под руководством члена-корреспондента РАН В.М. Иевлева. С участием В.Е. Фортова был проведен важный цикл работ по исследованию свойств плотной неидеальной плазмы цезия на подогреваемой ударной трубе. Эти и другие исследования были обобщены в известной книге “Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора”, вышедшей под редакцией В.М. Иевлева в 1980 году.

В 1971 г. Владимир Фортов начинает свою активную научную деятельность в Институте химической физики АН в Черноголовке, где он возглавил быстро растущее научное направление – исследования свойств веществ в экстремальных состояниях. С 1986 г. он продолжил и развил работы по этой тематике в Институте высоких температур Академии наук в Москве. Проводимые по его инициативе и поддержке энергичные экспериментальные и теоретические исследования сжимаемости, электропроводности, других транспортных и оптических свойств неидеальной плазмы, генерируемой динамическими методами, опубликованы во внушительном количестве научных журналов и книгах по физике неидеальной плазмы. Также при его поддержке развива-

ются методы сильноточной электроники для генерации и исследования экстремальных состояний вещества и многие другие направления. В последние годы В.Е. Фортов много занимался физикой астрофизических объектов и кварк-глюонной плазмой, где особенно ярко проявляются эффекты сильного межчастичного взаимодействия.

В рамках одного журнального выпуска невозможно охватить все разнообразие тематики научных исследований, которой В.Е. Фортов посвятил свою жизнь. Тем не менее хотя бы часть посвященных этой тематике работ нашла свое отражение на страницах настоящего сборника. Прежде всего, это тема высокоэнергетического динамического воздействия на вещество, которую В.Е. Фортов активно поддерживал и развивал. Так, эксперименты по исследованию электрофизических свойств ударно-сжатой плазмы, проведенные в конце 1990-х гг., показали появление высокой электропроводности плазмы водорода и благородных газов в области мегабарных давлений. Эксперименты по квазиизэнтропическому сжатию дейтерия позволили обнаружить в дейтерии при давлении около 150 ГПа аномалию – диссоциативно-плазменный фазовый переход. Дальнейшее развитие этого направления, в котором В.Е. Фортов принимал самое активное участие, позволило достичь в экспериментах ВНИИЭФ рекордных давлений около 20 ТПа в плазме дейтерия и гелия и создать адекватные уравнения состояния в таком экстремальном диапазоне параметров. В данном выпуске журнала эта сторона деятельности В.Е. Фортова нашла достаточно подробное отражение. Различные механизмы инициирования детонации рассмотрены в обзоре А.В. Еремина. Влиянию магнитного поля на газодинамические разрывы и устойчивость фронта ударной волны посвящен обзор О.А. Синкевича. История развития динамических методов освещается в обзоре В.Б. Минцева. Новые экспериментальные данные по ударной сжимаемости и излучательной способности кремния при давлениях до 500 ГПа представлены в коллективных работах Д.Н. Николаева и М.И. Кулиша.

Часть работ настоящего сборника посвящена традиционной тематике свойств сильно неидеальной плазмы, которой В.Е. Фортов уделял внимание постоянно с самых первых своих шагов в научных исследованиях. Прежде всего, это

проблемы, так или иначе связанные с термодинамикой фазовых переходов и околокритических свойств вещества, отраженные в работах А.Л. Хомкина и др., Е.М. Апфельбаума и др. и И.Л. Иосилевского и др. Это также проблемы аналитической теории неидеальных кулоновских систем, представленные в работах В.С. Филинова и др. и С.А. Маслова и др.

Еще одно важное направление исследований В.Е. Фортова – сильнонеидеальная пылевая плазма. Под его руководством выполнен цикл пионерских теоретических и экспериментальных исследований структурных и динамических свойств плазменно-пылевых кристаллов в рамках эксперимента “Плазменный кристалл” на космических станциях “Мир” и МКС. Данная тематика отражена в работе И.А. Мартыновой и др.

Следует отметить, что круг интересов и заинтересованного участия В.Е. Фортова был чрезвычайно широк. Это нашло свое отражение в представлении в настоящем выпуске работ М.В. Ефанова и др., М.П. Федорова и др., Р.Н. Кашапова и др., и даже такой, казалось бы, далекой от плазмы, но актуальной для науки в целом тематики, как работа А.М. Игнатова и др.

Мы надеемся, что предлагаемые статьи заинтересуют читателей журнала “Теплофизика высоких температур” и послужат продолжением развития научных идей замечательного ученого и человека – академика Владимира Евгеньевича Фортова.

О.Ф. Петров

И.Л. Иосилевский

В.Б. Минцев

УДК 533.93

Посвящается академику Фортнову В.Е.

ПРОЦЕССЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ И “ХОЛОДНОЙ” ИОНИЗАЦИИ ПАРОВ МЕТАЛЛОВ В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ПЕРЕХОДА ПАР–ЖИДКОСТЬ

© 2021 г. А. Л. Хомкин¹, *, А. С. Шумихин¹¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: alhomkin@mail.ru

Поступила в редакцию 09.03.2021 г.

После доработки 30.08.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

Выполнен совместный учет эффектов термической и “холодной” ионизации в околокритической области паров металлов. Проведенное сравнение с результатами эксперимента и численного моделирования может служить подтверждением выдвинутой гипотезы о существовании электронного желе в газоплазменной области и его сосуществовании с термически ионизованными электронами. Сделан вывод о том, что насыщенные пары металлов, вероятнее всего, являются газообразным металлом с достаточно высокой проводимостью.

DOI: 10.31857/S0040364421060090

ВВЕДЕНИЕ

Исследования перехода пар–жидкость и процессов металлизации паров металлов начались еще в середине прошлого века. Особенно исследователей интересовала околокритическая область, где одновременно происходят два перехода: пар–жидкость и диэлектрик–металл. Хенселем с сотрудниками [1–3] были измерены плотность и проводимость на бинадали фазового перехода пар–жидкость для Cs и Rb, имевшими сравнительно низкие (~2000 К) критические температуры. Наиболее полная информация о термодинамических и переносных свойствах цезия и рубидия в твердом, жидком и газообразном состоянии представлена в фундаментальном коллективном труде [4].

Зная плотность и температуру на жидкой ветви бинадали, можно рассчитать проводимость и сравнить ее с экспериментальными данными. Используя современные варианты теории Займана [5] для металлов, удается достаточно успешно описать проводимость на жидкой ветви бинадали (см., например, [6, 7]) вплоть до критической точки. Однако в самой критической точке расчеты дают существенно более высокие значения проводимости по сравнению с экспериментом.

Данные о проводимости паров щелочных металлов на газовой ветви бинадали и в околокритической области сразу привлекли внимание теоретиков, поскольку демонстрировали необычный и достаточно яркий эффект – экспоненциальный рост

проводимости на несколько порядков на околокритических изотермах при сжатии паров. В большинстве работ (например, [8–14]) этот рост связывался с хорошо известным в физике плазмы эффектом – снижением потенциала ионизации атома, что действительно вело к экспоненциальному росту концентрации термически ионизованных электронов, а следовательно, и к росту проводимости. Среди рассмотренных эффектов упомянем вклад в снижение потенциала ионизации от взаимодействий электрон–атом и ион–атом [8–10]. Критические точки и бинадаль эта модель не давала, да и проводимость была невелика. Отметим серию работ по кластерно-капельным моделям [11–14]. Предполагалось, что конверсия ионов в кластерные [11, 13] или капельные [14] ионы приведет к более существенному росту концентрации свободных электронов. Кластерно-капельная модель также не позволяла рассчитать ни критические точки, ни бинадаль, ни проводимость. Последующие расчеты [15] показали, что конверсия ионов действительно происходит, причем одновременно и положительных и отрицательных ионов. Нейтральная компонента плазмы паров щелочных металлов вблизи бинадали оказалась преимущественно атомарной с малой примесью молекул (димеров), что подтверждалось и другими независимыми расчетами [16]. Концентрация заряженной компоненты была невелика, она оказалась ионной по составу [15], что вело к весьма низким значениям проводимости в кластерной модели.

Экспериментальное исследование процессов металлизации в парах практически всех других металлов осложнялось высокими значениями ожидаемых критических температур (см., например, [17, 18]). По этой причине широкое распространение получили импульсные методы исследования. Для ряда металлов выполнены эксперименты по электровзрыву проволочек и фольг (Al, Cu, Ni, Fe, W) [19–23]. В [19, 20] измерены проводимость и плотность, а в [21, 22] – давление, внутренняя энергия и удельное сопротивление. На околокритических изотермах был обнаружен экспоненциальный рост электропроводности с ростом плотности [19, 20]. Этот рост был объяснен в рамках химических моделей [23–25] влиянием сильной кулоновской неидеальности, ведущей к большому (даже аномальному) снижению потенциала ионизации. Параметр неидеальности достигал нескольких десятков, что приводило к потере термодинамической (но не ионизационной) устойчивости при приближении к критической области.

Уравнение состояния, проводимость и теплопроводность металлов преимущественно в твердом, но и в жидком состоянии исследуются в настоящее время численными методами, например, с помощью квантового метода молекулярной динамики (QMD) [26–30] и метода среднего атома (ААМ) (см., например, [31, 32]). В работах [26, 28–30] с некоторыми модификациями метод QMD был использован для расчета как проводимости, так и уравнения состояния плотной плазмы паров металлов.

Существенный прогресс в понимании процессов металлизации в парах щелочных и других металлов произошел после появления серии работ Ликальтера А.А. (см. обзоры [33, 34]). Он первый предположил, что в околокритической области решающий вклад в проводимость будут давать не термически ионизованные свободные электроны, даже с учетом эффекта снижения потенциала ионизации, а часть связанных электронов, у которых классические траектории движения начинают перекрываться. Было предложено уравнение состояния для “квазиатомов” – атомов с перекрывающимися классическими орбитами [34, 35]. Фактически в его работах речь шла о появлении зачатка зоны проводимости в газовой фазе. Было введено [33] представление о газообразном металле – газе “квазиатомов” с перколяционной проводимостью.

В серии работ [36–38] предложена несколько иная, но близкая по духу модель паров металлов, в которой вводится представление об электронном желе в газовой фазе. Электронное желе с концентрацией n_j в газе атомов с концентрацией n_a образуется за счет перекрытия хвостов волновых функций связанных электронов от всех атомов,

лежащих вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца (ВЗ) с радиусом

$$R_a = \left(\frac{3}{4\pi n_a} \right)^{1/3}.$$

В [36–38] предложено соотношение для расчета степени “холодной” ионизации $\alpha_j = n_j/n_a$ через волновые функции i -го электрона $\Psi^i(r)$ в приближении “изолированного” атома, данные для которых можно найти в [39]:

$$\alpha_j = \sum_i \left[\int_{y_a}^{\infty} \Psi^i(r)^2 r^2 dr + \frac{y_a^3}{3} \Psi^i(y_a)^2 \right], \quad (1)$$

где $y_a = R_a/a_0$ – радиус атомарной ячейки ВЗ в атомных единицах. Суммарная электронная плотность сохраняется, и атомарная ячейка ВЗ остается электронейтральной. Суммирование в (1) распространяется на валентные электроны атома. В [37, 38] можно найти расчеты зависимостей $\alpha_j(y_a)$ для паров различных металлов.

В настоящей работе рассмотрены состав и проводимость паров металлов, в том числе насыщенных паров цезия, с учетом процессов термической и “холодной” ионизации. Сначала излагаются расчетные модели, использованные для расчета состава паров. Далее приводятся и анализируются результаты расчетов для степеней ионизации и проводимости насыщенных паров цезия и ряда металлов в зависимости от температуры и плотности, проводится сопоставление процессов термической и “холодной” ионизации. В заключении формулируются выводы по работе.

СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА В “3+” МОДЕЛИ

Рассмотрим систему, состоящую из N_a атомов, N_e электронов и N_i ионов, находящихся в объеме V при температуре T . Введем важные для дальнейшего радиусы ячейки ВЗ для атомарной $R_a = (3V/4\pi N_a)^{1/3}$ и заряженной $R_i = (3V/4\pi N_i)^{1/3}$ компонент. Для нормальной плотности металла $n_0 = N_0/V$ радиус ячейки ВЗ обозначим через R_0 . Плюс в названии модели “3+” означает возможность учета наличия электронного желе.

Свободная энергия неидеальной смеси атомов, электронов и ионов была предложена в [36] и в аддитивном приближении записывается в виде суммы свободных энергий атомарной и заряженной компонент:

$$F = F_a + F_{ch}, \quad (2)$$

где

$$F_a = -N_a k T \ln \left(\frac{e V g_a \exp(\beta I)}{N_a \lambda_a^3} \right) + N_a k T \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1-\eta)^2} + \frac{1}{2} N_a E_{\text{coh}}(y_a), \quad (3)$$

$$F_{\text{ch}} = -N_e k T \ln \left(\frac{e V g_e}{N_e \lambda_e^3} \right) - N_i k T \ln \left(\frac{e V g_i}{N_i \lambda_i^3} \right) - (N_e + N_i) \Delta f_{ei}. \quad (4)$$

Перекрестные слагаемые, связанные с взаимодействием атом–заряд, в первом приближении не учитываются, поскольку область, где одновременно высока концентрация атомов и зарядов, в рассматриваемых условиях невелика. Тем не менее такая химическая модель существует и будет использована при необходимости.

Первое слагаемое (3) в свободной энергии (2) точно такое же, как и для атомарной модели “1+” [40]; $n_{a,e,i} = N_{a,e,i}/V$ – плотности соответствующих компонент; η – параметр упаковки; $E_{\text{coh}}(y)$ – когезионная энергия сцепления (когезия).

Зная плотность атомов, можно определить плотность электронного желе $n_j = N_j/V$ через степень “холодной” ионизации α_j (1):

$$n_j = \alpha_j n_a. \quad (5)$$

Второе слагаемое свободной энергии (2) описывает ионизованную компоненту газоплазменной смеси. В (4) λ_e, λ_i – тепловая длина волны электрона и иона, соответственно; g_e, g_i – статистические веса электрона и иона. Не вдаваясь в дискуссию о поправке на кулоновское взаимодействие между электроном и ионом, используем для Δf_{ei} приближение ближайшего соседа [41, 42]: $\Delta f_{ei} = c e^2 / (R_i k T)$. Константу ($c = 3/4$) выберем аналогично [36].

УРАВНЕНИЕ ИОНИЗАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ

Равновесный состав газоплазменной смеси определяется из решения уравнений баланса, главным из которых является связь химических потенциалов атомов μ_a , электронов μ_e и ионов μ_i в реакции ионизации:

$$\mu_a = \mu_e + \mu_i. \quad (6)$$

Безразмерные ($\beta = 1/kT$) химические потенциалы определяются из свободной энергии как $\beta \mu_{a,e,i} = \partial \beta F / \partial N_{a,e,i}$ и имеют вид

$$\beta \mu_a = -\ln \frac{V g_a}{N_a \lambda_a^3} + HS(\eta_a) - \frac{\beta E_{\text{coh}}}{2} \left(1 - \frac{y_a}{3 E_{\text{coh}}} \frac{\partial E_{\text{coh}}}{\partial y_a} \right),$$

$$\beta \mu_{e,i} = -\ln \frac{V g_{e,i}}{N_{e,i} \lambda_{e,i}^3} - \frac{2 R y_i}{y_i},$$

$$HS(\eta) = \frac{8\eta - 9\eta^2 + 3\eta^3}{(1-\eta)^3}.$$

Вводя степень термической ионизации $\alpha = n_{e,i}/n$, из (6) получим уравнение ионизационного равновесия – формулу Саха:

$$\frac{1-\alpha}{\alpha^2} = n \lambda_e^3 \frac{g_a}{2 g_i} \exp \left(\beta I - \frac{2 \beta R y_i}{y_i} - \frac{\beta E_{\text{coh}}}{2} \times \left(1 - \frac{y_a}{3 E_{\text{coh}}} \frac{\partial E_{\text{coh}}}{\partial y_a} \right) - HS(\eta_a) \right), \quad (7)$$

которую необходимо дополнить уравнениями электронейтральности и баланса:

$$n_e = n_i, \quad (8)$$

$$n = n_i + n_a. \quad (9)$$

Уравнения (7)–(9) полностью определяют состав газоплазменной смеси, а уравнение (5) позволяет найти плотность новой компоненты – электронного желе. Решением этих уравнений будут зависимости $n_{a,e,i}(n)$, а с использованием (5) и $n_j(n)$.

ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

В основе нашей концепции процессов металлизации паров металлов при сжатии лежит представление о существовании электронного желе в газовой фазе [37, 38]. Электронное желе образуется в результате наложения хвостов электронной плотности связанных состояний, лежащих вне атомарной ячейки Вигнера–Зейтца, от всех атомов. Формально эти “хвосты” присутствуют во всех химических моделях, использующих приближение “изолированного” атома для расчета спектра связанных состояний, и, следовательно, можно рассчитать степень “холодной” ионизации в дополнение к имеющимся расчетам термической степени ионизации практически для большинства химических моделей.

Для насыщенных паров щелочных металлов вдали от критической точки результаты расчетов по различным химическим моделям близки (см., например, [15, 16]). Анализируя полученный состав, можно утверждать, что плазма насыщенных паров – это преимущественно атомарный газ с незначительной примесью молекул и молекулярных ионов [15, 16]. Для анализа влияния номенклатуры частиц и эффектов неидеальности вдали от критической точ-

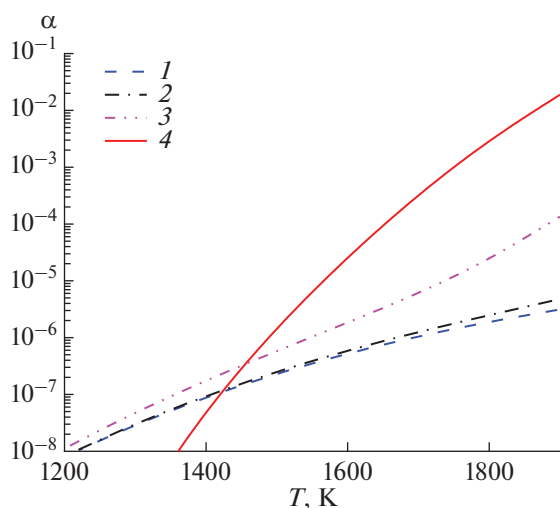


Рис. 1. Ионизационный состав насыщенных паров цезия в зависимости от температуры; степень термической ионизации: 1 – идеальный газ, 2 – вклад термических электронов по модели “3+”, 3 – вириальная химическая модель [15], 4 – степень “холодной” ионизации (1).

ки использовались модель идеальной смеси, а также предложенная в [15] девятикомпонентная модель с вириальными поправками на межчастичные взаимодействия и модель “3+”, предложенная в [36] и изложенная выше. Главный вопрос: что определяет высокую проводимость насыщенных паров? Итак, имеем:

1) модель идеальной смеси электронов, ионов и атомов;

2) вириальную химическую модель, учитывающую молекулы, молекулярные ионы и их взаимодействия в вириальном приближении [15];

3) модель “3+” с использованием приближения ближайшего соседа для учета межзарядового взаимодействия, когезионной, коллективной энергии связи атомов и эффекта исключенного объема.

Модель под номером 3 выбрана основной для около- и сверхкритических состояний паров всех металлов, что можно считать гипотезой. Детали расчетов и используемых формул можно найти, например, в [36]. Степень “холодной” ионизации рассчитывается по соотношению (1) для всех моделей одинаково, как и в других работах авторов [36–38]. Добавим, если не рассматривать процессы термической ионизации, а они невелики в околокритической области, то можно ограничиться и моделью “1+” плотного атомарного газа [40], которая достаточно успешно использована для расчета критических параметров паров металлов [40, 43].

Расчетный алгоритм в данной работе единый и строится следующим образом: по известной плотности паров металлов рассчитывается состав и проводимость. Для насыщенных паров цезия используется интерполяционная формула для плотности

насыщенных паров вдоль бинодали $\rho_g(T)$, приведенная в [4], а для других металлов – рассчитанная в [40].

СТЕПЕНИ ТЕРМИЧЕСКОЙ И “ХОЛОДНОЙ” ИОНИЗАЦИИ НАСЫЩЕННЫХ ПАРОВ

Для расчета ионизационного состава насыщенных паров цезия применяются модели 1, 2, 3. Полная электропроводность рассчитывается как сумма вкладов термических электронов и электронов желе. Для учета проводимости термических электронов используется формула Фроста, проводимость электронов желе определяется по формуле Регеля–Иоффе.

На рис. 1 представлены результаты расчетов степеней ионизации $\alpha = n_e/n$ насыщенных паров цезия, выполненных по различным химическим моделям. Вклады процессов термической и холодной ионизации хорошо видны. При низких температурах $T < 1400$ К хотя формально и преобладает термический механизм ионизации, скорее можно говорить о его отсутствии. При приближении к критической точке в рамках модели “3+” вклад термической ионизации становится несущественным, и она превращается в модель “1+”, которая позволяет рассчитать критические параметры паров щелочных металлов [40] и “холодную” проводимость [38] в критической точке. Преобладание процессов “холодной” ионизации на линии насыщения дает возможность сделать весьма важный вывод: насыщенные пары цезия вблизи критической точки, по-видимому, являются газообразным металлом [37].

На рис. 2 представлены аналогичные расчеты, но в зависимости от плотности паров на бинодали.

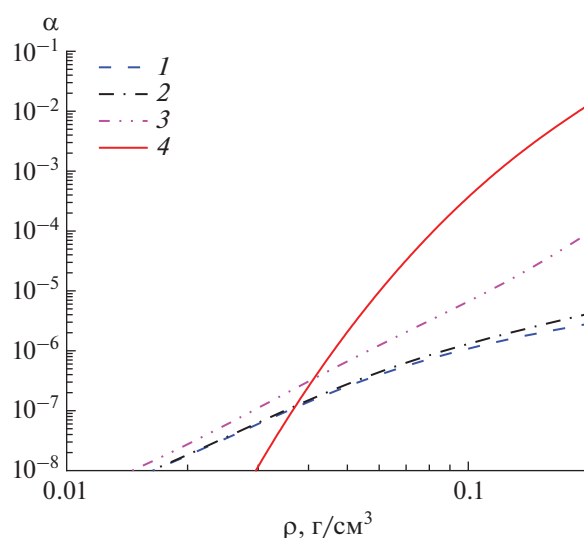


Рис. 2. Ионизационный состав насыщенных паров цезия в зависимости от плотности: обозначения те же, что на рис. 1.

При $\rho < 0.04 \text{ г/см}^3$ преобладает термическая ионизация, а при приближении к критической плотности ($\rho \approx 0.38 \text{ г/см}^3$) определяющей становится ионизация “холодная”.

На рис. 3 приведены расчеты степени “холодной” и термической ионизации для насыщенных паров алюминия. Фактическая картина аналогична парам щелочных металлов. Несмотря на высокую критическую температуру $T \sim 7500 \text{ К}$, процессы “холодной” ионизации превалируют при приближении к критической точке.

ПРОВОДИМОСТЬ НАСЫЩЕННЫХ ПАРОВ ЦЕЗИЯ И АЛЮМИНИЯ

Расчеты проводимости насыщенных паров цезия представлены на рис. 4. Низкотемпературные экспериментальные точки Боржиевского [45] неплохо согласуются с проводимостью термически ионизованных электронов. С ростом плотности роль электронов желе становится преобладающей. Сравнение с экспериментом достаточно убедительно демонстрирует важную роль процессов холодной ионизации в насыщенных парах. Сплошной линией нанесена полная проводимость паров с учетом термической и “холодной” ионизации. Парциальный вклад в проводимость термически ионизованных электронов демонстрируется кривыми 1–3. Сопоставление кривых 1, 2 и 3 показывает влияние эффекта снижения потенциала ионизации на проводимость за счет взаимодействия свободных частиц.

Расчеты проводимости насыщенных паров алюминия представлены на рис. 5. Сплошной ли-

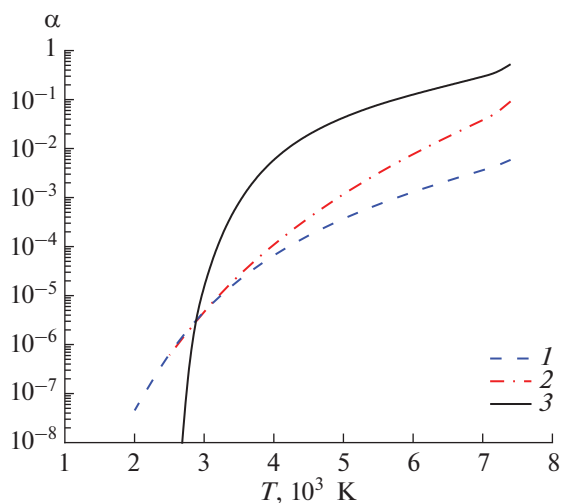


Рис. 3. Ионизационный состав насыщенных паров алюминия в зависимости от температуры; степень термической ионизации: 1 – вклад термических электронов по модели “3+”, 2 – вириальная химическая модель [44], 3 – степень “холодной” ионизации (1).

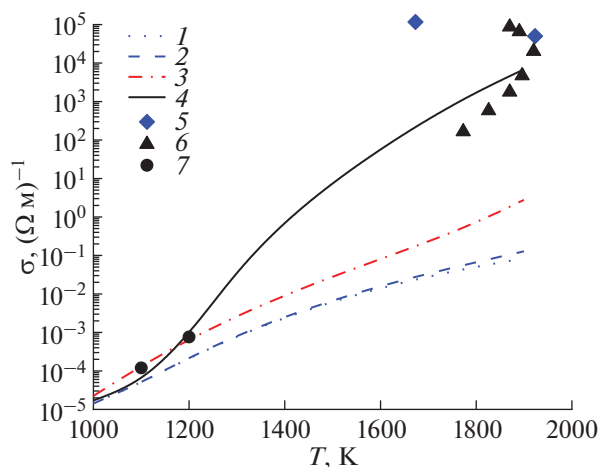


Рис. 4. Проводимость паров цезия вдоль кривой насыщения; теория: 1 – расчет в идеально-газовом приближении, 2 – вклад термических электронов по модели “3+”, 3 – вириальная химическая модель [15], 4 – полный расчет проводимости с учетом термических электронов и электронов желе; эксперимент: 5 – [1], 6 – [2], 7 – [45].

нией нанесена полная проводимость паров с учетом термической и “холодной” ионизации. Парциальный вклад в проводимость термически ионизованных электронов демонстрируется кривыми 1, 2. Их сопоставление показывает влияние эффекта снижения потенциала ионизации на проводимость за счет взаимодействия свободных частиц. Важно подчеркнуть, что формально расчет состава и проводимости возможен по всем моделям, но расчет по вириальной модели иногда приводит к поте-

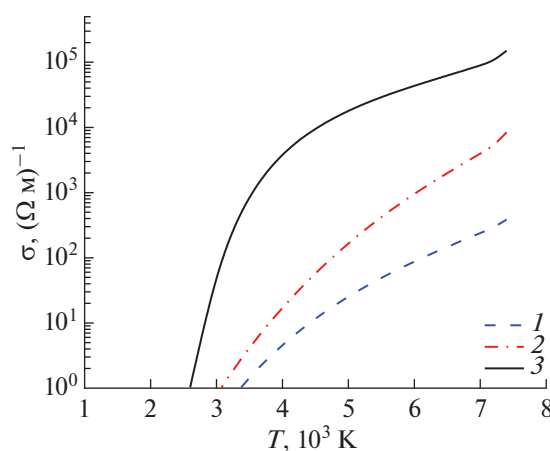


Рис. 5. Проводимость паров алюминия вдоль кривой насыщения; теория: 1 – вклад термических электронов по модели “3+”, 2 – вириальная химическая модель [44], 3 – полный расчет проводимости по модели “3+” с учетом термических электронов и электронов желе.

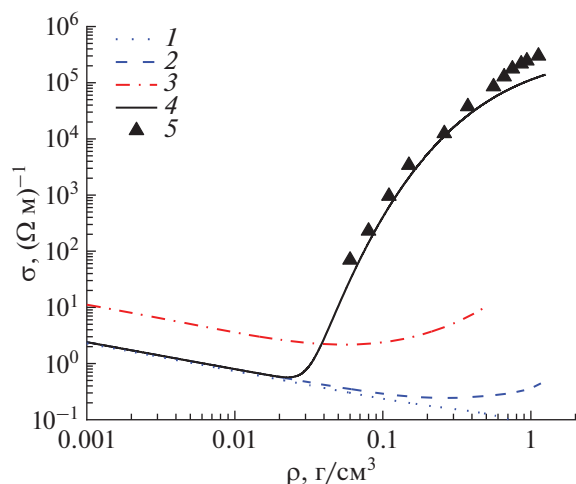


Рис. 6. Проводимость паров цезия на изотерме $T = 2000$ К; теория: 1 – расчет в идеально-газовом приближении, 2 – вклад термических электронов по модели “3+”, 3 – вириальная химическая модель [15], 4 – полная проводимость по модели “3+”; эксперимент: 5 – [3].

ре термодинамической устойчивости в уравнении состояния при приближении к критической точке.

ПРОВОДИМОСТЬ ПАРОВ МЕТАЛЛОВ НА ОКОЛОКРИТИЧЕСКИХ ИЗОТЕРМАХ

На рис. 6 представлен расчет проводимости на окологривитической изотерме цезия $T = 2000$ К. Неплохое согласие с экспериментальными данными

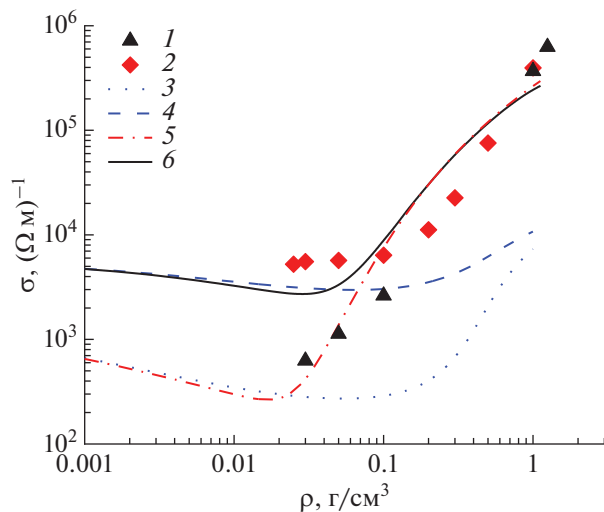


Рис. 7. Зависимость проводимости паров алюминия от плотности на различных изотермах: 1, 2 – результаты численных расчетов [26] для $T = 6000$ и 10000 К соответственно; 3, 4 – вириальная химическая модель [44] для изотерм $T = 6000$ и 10000 К; 5, 6 – расчет по модели “3+” для изотерм $T = 6000$ и 10000 К.

[3] расчета по модели “3+” с учетом электронов желе (сплошная кривая) позволяет утверждать о решающей роли процессов “холодной ионизации” при сжатии паров.

На рис. 7 представлены расчеты проводимости на различных изотермах для алюминия в сравнении с данными численных *ab initio* расчетов [26]. Предлагаемая модель неплохо согласуется с результатами численного моделирования.

Все расчеты (рис. 6 и 7) демонстрируют интересный физический эффект смены типа носителей заряда при сжатии паров металлов. При малых плотностях перенос осуществляется термическими электронами, как в обычной частично ионизованной плазме. С ростом плотности начинают проявляться твердотельные эффекты – появляется заметное количество электронов желе. Зависимость проводимости от температуры практически исчезает, а зависимость от плотности становится на определенном интервале экспоненциальной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Удовлетворительное согласие полученных расчетов с результатами физических и численных экспериментов является подтверждением гипотезы авторов о существовании электронного желе в газоплазменной области и его сосуществовании с электронами, термически ионизованными. Насыщенные пары металлов скорее являются газом, чем металлом с достаточной высокой проводимостью, чем атомарным газом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Winter R., Hensel F., Bodensteiner T., Glaser W. The Static Structure Factor of Cesium over the Whole Liquid Range up to the Critical Point // *Ber. Bunsenges, Phys. Chem.* 1987. V. 91. P. 1327.
2. Hensel F., Pilgrim W.C. Fluid Alkali Metals in the Liquid-vapour Critical Region // *Int. J. Mod. Phys. B.* 1992. V. 6. P. 3709.
3. Franz G., Freyland W., Hensel F. Thermodynamic and Electric Transport Properties of Fluid Cesium and Rubidium in the M-NM Transition Region // *J. de Phys. Coll.* 1980. V. 41 (C8). P. 70.
4. Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals / Ed. Roland W. Ohse: IUPAC, 1985. 987 p.
5. Ziman J.M. Principles of the Theory of Solids. London: Cambridge University Press, 1972.
6. Redmer R., Reinholz H., Roepke G., Winter R., Noll F., Hensel F. The Electrical Conductivity of Expanded Liquid Caesium // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1992. V. 4. P. 1659.

7. *Apfelbaum E.M.* The Calculation of Cs and Rb Conductivities in the Region of Liquid–Plasma Transition // *Phys. Chem. Liquids*. 2010. V. 48. № 4. P. 534.
8. *Алексеев В.А., Веденов А.А.* Об электропроводности плотных паров цезия // *УФН*. 1970. Т. 102. С. 665.
9. *Popielawski J., Gryko J.* The Semiconductor Model of Electric Conductivity Applied to the Supercritical Mercury Vapor // *J. Chem. Phys.* 1977. V. 66. P. 2257.
10. *Starzynski J., Redmer R., Schlages M.* Electrical Conductivity for Nonideal Partially Ionized Alkali Plasmas // *Phys. Plasmas*. 1996. V. 3. P. 1591.
11. *Ликальтер А.А.* Об электропроводности плотных паров щелочных металлов // *ТВТ*. 1978. Т. 16. № 6. С. 1219.
12. *Якубов И.Т.* К теории повышенной электропроводности плотных паров металлов вблизи насыщения // *Докл. АН СССР*. 1979. Т. 247. № 4. С. 841.
13. *Храпак А.Г.* Проводимость слабонеидеальной многокомпонентной плазмы паров щелочных металлов // *ТВТ*. 1979. Т. 17. № 6. С. 1147.
14. *Жуховицкий Д.И.* Электропроводность плотных паров цезия // *ТВТ*. 1993. Т. 31. № 1. С. 40.
15. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Термодинамические и переносные свойства паров цезия на бинадали и в ее окрестности // *ТВТ*. 2013. Т. 51. № 5. С. 663.
16. *Семёнов А.М., Петкогло Н.П., Захарова О.Д.* Мало-константное полуэмпирическое уравнение состояния пара цезия // *ТВТ*. 2008. Т. 46. № 3. С. 374.
17. *Фортон В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А.* Оценка параметров критической точки // *ТВТ*. 1975. Т. 13. № 3. С. 1072.
18. *Young D.A., Alder B.J.* Critical Point of Metals from the van der Waals Model // *Phys. Rev. A*. 1971. V. 3. P. 364.
19. *DeSilva A.W., Katsouras J.D.* Electrical Conductivity of Dense Copper and Aluminum Plasmas // *Phys. Rev. E*. 1998. V. 57. P. 5945.
20. *DeSilva A.W., Rakhel A.D.* Progress in Measurements of the Electrical Conductivity of Metal Plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* 2005. V. 45. P. 236.
21. *Clerouin J., Noiret P., Korobenko V.N., Rakhel A.D.* Direct Measurements and ab initio Simulations for Expanded Fluid Aluminum in the Metal-Nonmetal Transition Range // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 78. P. 224203.
22. *Коробенко В.Н., Рахель А.Д.* Переход расширенного железа в неметаллическое состояние при сверхкритических давлениях // *ЖЭТФ*. 2011. Т. 139. С. 746.
23. *Redmer R.* Electrical Conductivity of Dense Metal Plasmas // *Phys. Rev. E*. 1999. V. 59. P. 1073.
24. *Kuhlbrodt S., Holst B., Redmer R.* COMPTRA04 – A Program Package to Calculate Composition and Transport Coefficients in Dense Plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* 2005. V. 45. P. 73.
25. *Apfelbaum E.M.* The Calculation of Electronic Transport Coefficients of Metals in the Process of Transition from Liquid to Plasma // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2006. V. 39. P. 4407.
26. *Mazevet S., Desjarlais M.P., Collins L.A., Kress J.D., Magee N.H.* Simulations of the Optical Properties of Warm Dense Aluminum // *Phys. Rev. E*. 2005. V. 71. P. 016409.
27. *Minakov D.V., Levashov P.R., Khishchenko K.V., Fortov V.E.* Quantum Molecular Dynamics Simulation of Shock-wave Experiments in Aluminum // *J. Appl. Phys.* 2014. V. 115. P. 223512.
28. *French M., Mattsson T.R.* Thermoelectric Transport Properties of Molybdenum from *ab initio* Simulations // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 90. P. 165113.
29. *Li D., Liu H., Zeng S., Wang C., Wu Z., Zhang P., Yan J.* Quantum Molecular Dynamics Study of Expanded Beryllium: Evolution from Warm Dense Matter to Atomic Fluid // *Sci. Rep.* 2015. V. 4. P. 5898.
30. *Minakov D.V., Paramonov M.A., Levashov P.R.* Consistent Interpretation of Experimental Data for Expanded Liquid Tungsten near the Liquid-gas Coexistence Curve // *Phys. Rev. B*. 2018. V. 97. P. 024205.
31. *Ovechkin A.A., Loboda P.A., Falkov A.L.* Transport and Dielectric Properties of Dense Ionized Matter from the Average-Atom RESEOS Model // *High Energy Density Phys.* 2016. V. 20. P. 38.
32. *Hou Y., Fu Y., Bredow R., Kang D., Redmer R., Yuan J.* Average-atom Model for Two-temperature States and Ionic Transport Properties of Aluminum in the Warm Dense Matter Regime // *High Energy Density Phys.* 2017. V. 22. P. 21.
33. *Ликальтер А.А.* Газообразные металлы // *УФН*. 1992. Т. 162. № 7. С. 119.
34. *Ликальтер А.А.* Критические точки конденсации в кулоновских системах // *УФН*. 2000. Т. 170. С. 831.
35. *Likalter A.A.* Electric Conductivity of Expanded Transition Metals // *Phys. Scr.* 1997. V. 55. P. 114.
36. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Переход от газокинетической к минимальной металлической проводимости в сверхкритическом флюиде паров металлов // *ЖЭТФ*. 2017. Т. 151. С. 1169.
37. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Газообразный металл и проблема перехода пар–жидкость (диэлектрик–металл) в парах металлов // *ЖЭТФ*. 2020. Т. 157. С. 717.
38. *Khomkin A.L., Shumikhin A.S.* Is the Atomic Metal Vapor a Dielectric State? // *Phys. Scr.* 2021. V. 96. № 3. P. 035806.
39. *Clementi E., Roetti C.* Roothaan–Hartree–Fock Atomic Wavefunctions: Basis Functions and their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and Ionized Atoms, $Z < 54$ // *At. Data Nucl. Data Tables*. 1974. V. 14. P. 177.
40. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Критические точки паров металлов // *ЖЭТФ*. 2015. Т. 148. С. 597.
41. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Распределение электронов по энергиям в неидеальных кулоновских системах: теория и результаты численного эксперимента // *ТВТ*. 2016. Т. 54. № 6. С. 851.
42. *Муленко И.А., Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // *ТВТ*. 2004. Т. 42. № 6. С. 835.
43. *Khomkin A.L., Shumikhin A.S.* Features of the Vapor–Liquid (Dielectric–Metal) Phase Transition in Metal Vapors, Semiconductors and Rare Gases // *Contrib. Plasma Phys.* 2016. V. 56. P. 228.
44. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Ионно-молекулярная химическая модель плазмы плотных паров алюминия // *ТВТ*. 2012. Т. 50. № 3. С. 329.
45. *Боржиевский А.А., Сеченов В.А., Хорунженко В.И.* Электропроводность паров цезия // *ТВТ*. 1988. Т. 26. № 4. С. 722.

АСИМПТОТИКА НУЛЕВЫХ КОЛЕБАНИЙ И СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ РАВНОВЕСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

© 2021 г. С. А. Маслов¹, С. А. Тригер¹, *

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: satron@mail.ru

Поступила в редакцию 09.04.2021 г.

После доработки 12.10.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

Рассмотрена высокочастотная асимптотика спектральной плотности распределения равновесного излучения в невырожденном электронном газе. Показано, что при высоких частотах в выражении для равновесного излучения в бесстолкновительном электронном газе происходит перенормировка нулевых колебаний.

DOI: 10.31857/S0040364421060144

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, спектральное распределение энергии равновесного излучения, установленное М. Планком [1], привело к становлению квантовой теории. Распределение Планка соответствует идеализированной модели абсолютно черного тела, представляющей собой полость, заполненную излучением и ограниченную абсолютно поглощающим веществом. При этом предполагается, что излучение находится в термодинамическом равновесии с веществом, хотя эффекты взаимодействия фотонов с ограничивающим веществом не рассматриваются [2–5]. Однако этот подход является заведомо ограниченным [6], так как для установления термодинамического равновесия излучения в веществе необходимо учитывать эффекты поглощения излучения. Следует отметить, что, несмотря на бурное развитие в последние десятилетия физики экстремальных состояний, в частности неидеальной плазмы (см. [7–9] и цитируемую в них литературу), влиянию неидеальности плазмы на излучение, в том числе равновесное, уделялось мало внимания.

Последовательному рассмотрению вопроса о влиянии поглощающей плазменной среды на спектральное распределение энергии равновесного излучения в веществе посвящены недавние статьи [10–17]. В этих работах рассмотрено проводилось для полностью равновесной системы нерелятивистских заряженных частиц и фотонов. В [16] исследовалось низкочастотное поведение спектральной плотности излучения в плазме и было показано, что при низких частотах ($\omega \rightarrow 0$) в приближенном рассмотрении имеется интегрируемая логарифмическая особенность, а при учете

взаимодействия собственного тока с полем она сменяется на интегрируемую особенность $1/\omega^{2/3}$ [18].

В настоящей работе исследована высокочастотная асимптотика (при $\omega \rightarrow \infty$) спектральной плотности излучения при наличии электронного газа. Показано, что из-за особенностей поведения поперечной диэлектрической проницаемости при высоких частотах в плазменной среде возникает перенормировка нулевых колебаний, которые начинают зависеть от плазменных параметров.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ ЭНЕРГИИ ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ЧАСТОТАХ

Полная спектральная плотность распределения энергии равновесного излучения при наличии электронного газа в предположении $\alpha \ll 1$, $\Gamma \ll 1$, $\eta \ll 1$ записывается как [17]

$$e(W) = e_1(W) + e_2(W), \quad (1)$$

где слагаемые $e_1(W)$ и $e_2(W)$ определяются формулами

$$e_1(W) = \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \coth\left(\frac{W}{2}\right) \int_0^{+\infty} Y^4 f(Y, W) dY,$$

$$e_2(W) = \frac{4\Gamma\eta^{2/3}\sqrt{2\alpha}}{\pi} \coth\left(\frac{W}{2}\right) \int_0^{+\infty} Y^2 f(Y, W) dY, \quad (2)$$

$$f(Y, W) = \frac{\Psi(Y, W)}{(\alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2)^2 + (\alpha\Psi(Y, W))^2}.$$

Здесь введены безразмерные переменные $Y = k\Lambda/\sqrt{4\pi}$, $W = \hbar\omega/T$ (k , ω – соответственно волновое число и частота); $\Gamma = e^2 n^{1/3}/T$ – параметр кулоновского взаимодействия электронов; e , n ,

T – заряд, концентрация и температура электронов; $\eta = n\Lambda^3$, где $\Lambda = \hbar\sqrt{2\pi/mT}$ – длина волны де Бройля. Параметр α определяется выражением $\alpha = (Ry \eta^{2/3}) / (\pi mc^2 \Gamma^2)$, где m – масса электрона, c – скорость света, Ry – постоянная Ридберга. В отсутствие плазменной среды член $e_1(W)$ в (1) отвечает спектральной плотности планковского излучения и описывает нулевые вакуумные флуктуации, а $e_2(W)$ обращается в нуль. Интегральные члены, содержащие поперечную диэлектрическую проницаемость $\epsilon^{tr}(Y, W)$, описывают влияние заряженных частиц на спектральную плотность излучения при наличии плазмы произвольной степени неидеальности и произвольного вырождения.

В случае слабонеидеального невырожденного электронного газа функции $\Phi(Y, W) = W^2 \operatorname{Re} \epsilon^{tr}(Y, W)$ и $\Psi(Y, W) = W^2 \operatorname{Im} \epsilon^{tr}(Y, W)$ в безразмерных переменных Y, W (при $W \rightarrow \infty$) определяются формулами

$$\begin{aligned} \Phi(Y, W) &= W^2 - 2\Gamma\eta^{2/3} - \frac{2\Gamma\eta^{2/3}}{Y} \left(1 + \frac{Y^2}{2}\right) \times \\ &\times \left\{ \left(\frac{W}{2Y} - \frac{Y}{2}\right) {}_1G_1\left[1, \frac{3}{2}, -\left(\frac{W}{2Y} - \frac{Y}{2}\right)^2\right] - \left(\frac{W}{2Y} + \frac{Y}{2}\right) \times \right. \\ &\quad \left. \times {}_1G_1\left[1, \frac{3}{2}, -\left(\frac{W}{2Y} + \frac{Y}{2}\right)^2\right] \right\}, \\ \Psi(Y, W) &= \sqrt{\pi}\Gamma\eta^{2/3} \left(\frac{1}{Y} + \frac{Y}{2\pi}\right) \exp\left(-\frac{W^2}{4Y^2} - \frac{Y^2}{4}\right) \times \\ &\times \left[\exp\left(\frac{W}{2}\right) - \exp\left(-\frac{W}{2}\right) \right] \cong \sqrt{\pi}\Gamma\eta^{2/3} \left(\frac{1}{Y} + \frac{Y}{2\pi}\right) \times \\ &\quad \times \exp\left[-\left(\frac{W}{2Y} - \frac{Y}{2}\right)^2\right], \end{aligned} \quad (3)$$

где ${}_1G_1(1, 3/2, -x^2)$ – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера [19]. Для исследования спектральной функции распределения энергии при высоких частотах ($W \rightarrow \infty$) в предположении $\alpha\Gamma\eta^{2/3} \ll 1$ запишем функции $e_1(W)$ и $e_2(W)$ в виде следующих сумм:

$$\begin{aligned} e_1(W) &\cong \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \left(\int_0^{W^{1/4}} Y^4 f(Y, W) dY + \right. \\ &\quad \left. + \int_{W^{3/4}}^{W^{3/2}} Y^4 f(Y, W) dY + \right. \\ &\quad \left. + \int_{W^{3/4}}^{W^{3/2}} Y^4 f(Y, W) dY + \int_{W^{3/2}}^{+\infty} Y^4 f(Y, W) dY \right), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} e_2(W) &\cong \frac{4\Gamma\eta^{2/3}\sqrt{2\alpha}}{\pi} \left(\int_0^{W^{1/4}} Y^2 f(Y, W) dY + \right. \\ &\quad \left. + \int_{W^{3/4}}^{W^{3/2}} Y^2 f(Y, W) dY + \int_{W^{3/4}}^{W^{3/2}} Y^2 f(Y, W) dY + \right. \\ &\quad \left. + \int_{W^{3/2}}^{+\infty} Y^2 f(Y, W) dY \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Необходимость разбиения интегралов на отдельные области связана с тем, что для любого сколь угодно большого W имеются такие большие значения переменной интегрирования Y , которые не позволяют рассмотреть асимптотику по W универсальным образом. Рассмотрим асимптотическое поведение подынтегральных выражений в формулах (5), (6) и, соответственно, функций $\Phi(Y, W)$ и $\Psi(Y, W)$ при различных Y .

1. Области $0 \leq Y \leq W^{1/4}$ и $Y \geq W^{3/2}$. В этих случаях $W/2Y \pm Y/2 \rightarrow \infty$ и асимптотика вырожденной гипергеометрической функции Куммера [19] удовлетворяет выражению ${}_1G_1(1, 3/2, -(W/2Y \pm Y/2)^2) \cong 1/2(W/2Y \pm Y/2)^{-2}$, откуда следует асимптотическое равенство $\alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2 \cong \alpha W^2$. Подставляя это приближенное равенство и формулу (4) для функции $\Psi(Y, W)$ в первый и четвертый интегралы в (5), получаем верхнюю оценку

$$\begin{aligned} \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \left(\int_0^{W^{1/4}} Y^4 f(Y, W) dY + \int_{W^{3/2}}^{+\infty} Y^4 f(Y, W) dY \right) &\ll \\ &\ll \exp\left(-\frac{W^2}{4}\right), \quad W \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (7)$$

2. Область $W^{1/4} \leq Y \leq W^{3/4}$. Поскольку гипергеометрическая функция Куммера всегда принимает значения от 0 до 1, последнее слагаемое в правой части (3) можно оценить как

$$\begin{aligned} &\left| \frac{2\Gamma\eta^{2/3}}{Y} \left(1 + \frac{Y^2}{2}\right) \left(\frac{W}{2Y} - \frac{Y}{2}\right) {}_1F_1\left[1, 3/2, -\left(\frac{W}{2Y} - \frac{Y}{2}\right)^2\right] - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{W}{2Y} + \frac{Y}{2}\right) {}_1F_1\left[1, 3/2, -\left(\frac{W}{2Y} + \frac{Y}{2}\right)^2\right] \right| \leq \\ &\leq \frac{2\Gamma\eta^{2/3}}{Y} \left(1 + \frac{Y^2}{2}\right) \left\{ \left|\frac{W}{2Y} - \frac{Y}{2}\right| + \left|\frac{W}{2Y} + \frac{Y}{2}\right| \right\} \ll \\ &\ll 2\Gamma\eta^{2/3} Y W \ll W^2, \end{aligned}$$

откуда $\alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2 \cong \alpha W^2 \gg \Psi(Y, W)$. В свою очередь, асимптотика функции $\Psi(Y, W)$ при $W^{1/4} \leq Y \leq W^{3/4}$ имеет вид

$$\Psi(Y, W) \cong \sqrt{\pi}\Gamma\eta^{2/3} \frac{Y}{2\pi} \exp\left(-\frac{W^2}{4Y^2} - \frac{Y^2}{4} + \frac{W}{2}\right). \quad (8)$$

Подставляя эту формулу во второй интеграл правой части (5), получаем

$$\begin{aligned} & \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \int_{W^{1/4}}^{W^{3/4}} Y^4 f(Y, W) dY = \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \times \\ & \times \int_{W^{1/4}}^{W^{3/4}} \frac{\Psi(Y, W) Y^4 dY}{(\alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2)^2 + (\alpha\Psi(Y, W))^2} \cong \\ & \cong \frac{4\Gamma\eta^{2/3}\sqrt{2\pi}}{\pi\alpha^{5/2}W^4} \int_{W^{1/4}}^{W^{3/4}} \frac{Y^5}{2\pi} \exp\left(\frac{W}{2} - \frac{W^2}{4Y^2} - \frac{Y^2}{4}\right) dY \cong \\ & \cong \frac{2\Gamma\eta^{2/3}\sqrt{2}}{\pi\alpha^{5/2}W^{3/2}}. \end{aligned} \tag{9}$$

3. Область $W^{3/4} \leq Y \leq W^{3/2}$. В этом случае оценки показывают, что асимптотика функции $\Psi(Y, W)$ удовлетворяет уравнению (8), а выражение $\alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2$ в знаменателе $f(Y, W)$ в последней формуле (2) приближенно равно

$$\begin{aligned} & \alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2 \cong \alpha W^2 + \\ & + \frac{8\alpha\Gamma\eta^{2/3}}{Y^2} + \frac{2\alpha\Gamma\eta^{2/3}W^2}{Y^4} - 2Y^2. \end{aligned} \tag{10}$$

Приравнявая (10) к нулю, находим приближенный корень

$$Y_0 \cong W \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \left[1 + \frac{4\Gamma\eta^{2/3}(1 + 2\alpha)}{\alpha^2 W^4} \right]. \tag{11}$$

С целью дальнейшего исследования третий интеграл в правой части (5) для $e_1(W)$ удобно записать в виде суммы

$$\begin{aligned} & \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \int_{W^{3/4}}^{W^{3/2}} Y^4 f(Y, W) dY = \\ & = \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \left(\int_{W^{3/4}}^{Y_0-1/W^4} Y^4 f(Y, W) dY + \right. \\ & \left. + \int_{Y_0-1/W^4}^{Y_0+1/W^4} Y^4 f(Y, W) dY + \int_{Y_0+1/W^4}^{W^{3/2}} Y^4 f(Y, W) dY \right). \end{aligned} \tag{12}$$

Из формулы (4) следует, что при $Y_0 - 1/W^4 \leq Y \leq Y_0 + 1/W^4$ функция

$$\alpha\Psi(Y, W) \cong \alpha\sqrt{\pi}\Gamma\eta^{2/3} \frac{Y_0}{2\pi} \exp\left[-\left(\frac{W}{2Y_0} - \frac{Y_0}{2}\right)^2\right] = A(W),$$

обозначенная $A(W)$ (в дальнейшем для краткости функция $A(W)$ обозначена A , поскольку она не зависит от переменной интегрирования Y), имеет порядок $A \cong \alpha\sqrt{\pi}\Gamma\eta^{2/3}Y_0 \exp\left[-(W\sqrt{\alpha/8} - \sqrt{1/2\alpha})^2\right]/2\pi$, что гораздо меньше любого из слагаемых в правой части (10) при $W \rightarrow \infty$. Поэтому второй интеграл в правой части (12) приближенно равен следующему выражению:

$$\begin{aligned} & \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \int_{Y_0-1/W^4}^{Y_0+1/W^4} Y^4 f(Y, W) dY = \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{3/2}} \int_{Y_0-1/W^4}^{Y_0+1/W^4} \frac{AY^4 dY}{(\alpha\Phi(Y, W) - 2Y^2)^2 + A^2} \cong \\ & \cong \frac{4\sqrt{2}Y_0^4}{\pi\alpha^{3/2}} \int_{Y_0-1/W^4}^{Y_0+1/W^4} \frac{AdY}{(\alpha W^2 + 8\alpha\Gamma\eta^{2/3}Y^{-2} + 2\alpha\Gamma\eta^{2/3}W^2Y^{-4} - 2Y^2)^2 + A^2}. \end{aligned} \tag{13}$$

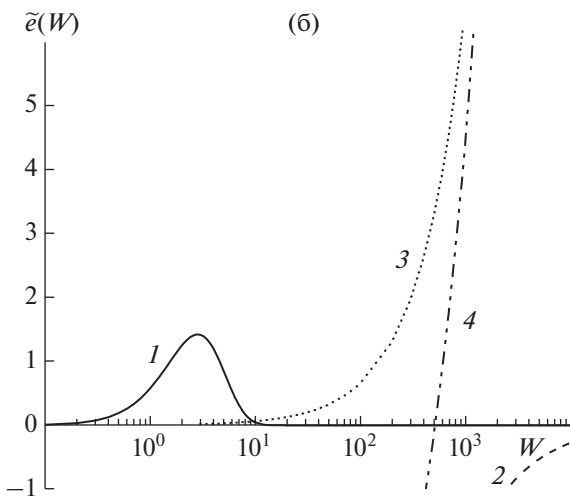
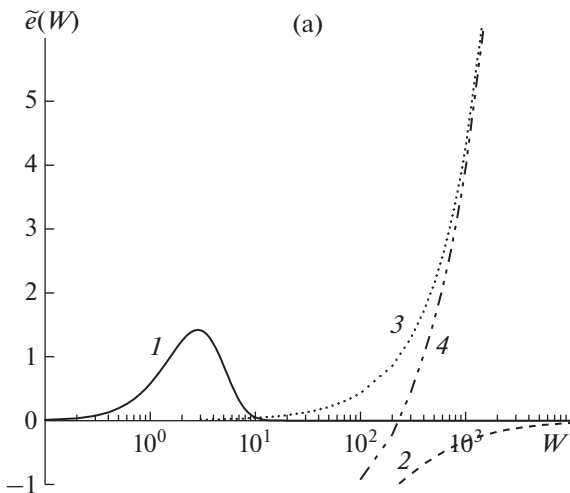
Введем переменную $Z = A^{-1}(2Y^2 - \alpha W^2 - 8\alpha\Gamma\eta^{2/3}Y^{-2} - 2\alpha\Gamma\eta^{2/3}W^2Y^{-4})$ и, подставляя в по-

следнее выражение формулу (11) для Y_0 , приходим к асимптотическому виду интеграла

$$\begin{aligned} & \frac{4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{1/2}} \int_{Y_0-1/W^4}^{Y_0+1/W^4} Y^4 f(Y, W) dY \cong \frac{4Y_0^4\sqrt{2}}{\pi\alpha^{3/2}} \times \left(4Y_0 + \frac{16\alpha\Gamma\eta^{2/3}}{Y_0^3} + \frac{8\alpha\Gamma\eta^{2/3}W^2}{Y_0^5} \right)^{-1} \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dZ}{Z^2 + A^2} \cong \frac{Y_0^3\sqrt{2}}{\alpha^{3/2}} \left(1 + \frac{4\alpha\Gamma\eta^{2/3}}{Y_0^4} + \frac{2\alpha\Gamma\eta^{2/3}W^2}{Y_0^6} \right)^{-1} \cong \\ & \cong \frac{W^3}{2} \left(1 + \frac{4\Gamma\eta^{2/3}(1 + 2\alpha)}{\alpha^2 W^4} \right)^3 \times \left(1 + \frac{16\Gamma\eta^{2/3}}{\alpha W^4} + \frac{16\Gamma\eta^{2/3}}{\alpha^2 W^4} \right)^{-1} \cong \frac{W^3}{2} - \frac{2\Gamma\eta^{2/3}(1 - 2\alpha)}{\alpha^2 W}. \end{aligned} \tag{14}$$

Используя формулы (3), (4) и асимптотику гипергеометрической функции, можно показать, что два других интеграла в правой части (12) по порядку

величины не превосходят $1/W^2$, т.е. не дают существенного вклада в $e_1(W)$. Следовательно, при больших W для функции $e_1(W)$ находим асимптотику



Распределение Планка: 1 – $W^3 [\exp(W) - 1]^{-1}$, 2 – $\tilde{e}_1(W) - W^3/2$, 3 – $\tilde{e}_2(W)$, 4 – $\tilde{e}_1(W) + \tilde{e}_2(W) - W^3/2$ при $\eta = 0.1$ и $\Gamma = 0.02$ (а), $\Gamma = 0.03$ (б); по горизонтальной оси масштаб логарифмический, по вертикальной – линейный.

$$e_1(W \gg 1) \cong \tilde{e}_1(W) = \frac{W^3}{2} - \frac{2\Gamma\eta^{2/3}(1-2\alpha)}{\alpha^2 W} + \frac{2\Gamma\eta^{2/3}\sqrt{2}}{\pi\alpha^{5/2}W^{3/2}} \quad (15)$$

Аналогично формулам (7)–(15) можно получить приближенную оценку для $e_2(W)$ в (6) и, соответственно, асимптотику полной спектральной плотности $e(W)$ в (1):

$$e_2(W \gg 1) \cong \tilde{e}_2(W) = \Gamma\eta^{2/3}W, \quad (16)$$

$$e(W \gg 1) \cong \tilde{e}_1(W) + \tilde{e}_2(W) = \frac{W^3}{2} + \Gamma\eta^{2/3}W - \frac{2\Gamma\eta^{2/3}(1-2\alpha)}{\alpha^2 W} + \frac{2\Gamma\eta^{2/3}\sqrt{2}}{\pi\alpha^{5/2}W^{3/2}} \quad (17)$$

Первые три члена в правой части (17) представляют собой перенормированные за счет наличия неидеального электронного газа нулевые колебания, являясь неким аналогом эффекта Казимира для плазменной среды. Однако среда в данном случае фигурирует не в виде стенок, ограничивающих электромагнитное излучение, а в виде слабонеидеального электронного газа. Вопрос о перенормировке нулевых колебаний в рамках приближения Бриллюэна рассмотрен впервые в [2], а аналогия с эффектом Казимира обсуждалась в [20].

Последний член в (17) описывает длинный “хвост”, возникающий в высокочастотной асимптотике планковской части спектральной плотности равновесного излучения, существование которого было впервые показано в [15].

На рисунке для примера представлены сравнительные графики распределения Планка и высокочастотной асимптотики спектральной плотности распределения энергии излучения по формулам (15)–(17) при значениях параметров $\eta = 0.1$ и двух значениях параметра $\Gamma = 0.02$ и 0.03 при $\alpha \ll 1$. Выход на асимптотический режим в зависящем от параметров электронного газа вкладе в нулевые колебания $e(W) - W^3/2$ с ростом Γ происходит при больших W .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получено высокочастотное разложение для полной спектральной плотности равновесного излучения в слабонеидеальном невырожденном электронном газе. Влияние плазменной подсистемы учитывается через поперечную диэлектрическую проницаемость, зависящую от частоты и волнового вектора. Выявлена определяющая роль в асимптотическом поведении части спектральной плотности $e_2(W)$, связанной с взаимодействием собственного тока и собственного векторного потенциала в гамильтониане взаимодействующих электронов и фотонов. Члены спектральной плотности излучения, приводящие к расходимости полной энергии электромагнитного поля, отнесены к перенормировке нулевых колебаний поля. Перенормированные нулевые колебания зависят от плотности и температуры электронов, что дает основания надеяться на возможность их экспериментального обнаружения, например по изменению лэмбовского сдвига. Как известно, учет вакуумных колебаний приводит к улучшению согласия с экспериментом по тонкому расщеплению уровней, впервые надежно измеренному для атома водорода Лэмбом и Резерфордом [21]. Расходящиеся вклады от спектральной плотности в полную энергию излучения приводят к конечному результату для величины расщепления уровней, близкому к измеренным данным (см., например, [22]). Полученные в статье результаты показывают, что экспериментальные данные по рас-

щеплению уровней могут иметь дополнительную зависимость от параметров плазменной среды.

Асимптотическое выражение для спектральной плотности включает также часть, приводящую к интегрируемому вкладу в полную энергию равновесного излучения. Данная часть должна интерпретироваться как длинный “хвост” планковского излучения, возникающий на высоких частотах при наличии плазменной среды. Возможность экспериментального обнаружения такого поведения требует дополнительного исследования. Результаты работы представляют, в частности, интерес в приложении к эволюции плазмы ранней Вселенной [23], а также к плазменным объектам при экстремальных плотностях и температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Planck M.* Entropie und Temperatur strahlender Wärme // *Annalen der Physik.* 1990. Bd. 306. № 4. S. 719.
2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Мир, 1984. 592 с.
3. *Левин М.Л., Рытов С.М.* Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике. М.: Наука, 1967. 307 с.
4. *Волокитин А.И., Перссон Б.Н.Дж.* Радиационная передача тепла и бесконтактное трение между наноструктурами // *УФН.* 2007. Т. 177. № 9. С. 921.
5. *Виноградов Е.А., Дорофеев И.А.* Термостимулированные электромагнитные поля твердых тел // *УФН.* 2009. Т. 179. № 5. С. 449.
6. *Trigger S.A.* Non-Planck Equilibrium Radiation in Plasma Model of Early Universe // *Phys. Lett. A.* 2007. V. 370. P. 365.
7. *Фортв В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Физика неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2010. 526 с.
8. *Фортв В.Е., Филинов В.С., Ларкин А.С., Эбелинг В.* Статистическая физика плотных газов и неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2020. 671 с.
9. *Dornheim T., Groth S., Bonitz M.* The Uniform Electron Gas at Warm Dense Matter Conditions // *Phys. Rep.* 2018. V. 744. P. 1.
10. *Medvedev M.V.* Thermodynamics of Photons in Relativistic $e^+ e^- \gamma$ Plasmas // *Phys. Rev. E.* 1999. V. 59. R4766.
11. *Bannur V.M.* Self-Consistent Quasiparticle Model Results for Ultrarelativistic Electron-Positron Thermodynamic Plasma // *Phys. Rev. E.* 2006. V. 73. 067401.
12. *Trigger S.A., Khomkin A.L.* Non-Planckian Equilibrium Radiation in Plasma-like Medium // *Plasma Phys. Rep.* 2010. V. 36. P. 1095.
13. *Munirov V.R., Fisch N.J.* Radiation in Equilibrium with Plasma and Plasma Effects on Cosmic Microwave Background // *Phys. Rev. E.* 2019. V. 100. 023202.
14. *Бобров В.Б., Соколов И.М., Тригер С.А.* О спектральном распределении энергии равновесного излучения в веществе // *Письма в ЖЭТФ.* 2015. Т. 101. № 5. С. 326.
15. *Бобров В.Б., Тригер С.А.* Высокочастотное спектральное распределение энергии равновесного излучения в плазме // *ТМФ.* 2016. Т. 187. № 1. С. 104.
16. *Маслов С.А., Тригер С.А., Гусейн-заде Н.Г.* Асимптотическое поведение спектральной функции распределения энергии излучения в максвелловской плазме при низких частотах // *Краткие сообщения по физике ФИАН.* 2018. № 8. С. 14.
17. *Trigger S.A.* Equilibrium Radiation in a Plasma Medium with Spatial and Frequency Dispersion // *Phys. Scr.* 2020. V. 95. № 7. 075504.
18. *Trigger S.A., Maslov S.A.* Primordial Plasma: Influence of Non-ideality on Equilibrium Radiation // *Phys. Scr.* 2021. V. 96. № 1. 015605.
19. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
20. *Игнатов А.М., Тригер С.А.* О спектральном распределении равновесного излучения и нулевых флуктуациях в кулоновской системе // *Краткие сообщения по физике ФИАН.* 2020. № 1. С. 11.
21. *Lamb W.E., Jr., Retherford R.C.* Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method // *Phys. Rev.* 1947. V. 72. P. 241.
22. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. 4-е изд. М.: Физматлит, 2002. 720 с.
23. *Зельдович Я.Б.* Теория вакуума, быть может, решает загадку космологии // *УФН.* 1981. Т. 133. № 3. С. 479.

УДК 536.715

О СДВИГЕ ГРАНИЦ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ АСИММЕТРИЧНОЙ КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЫ С УЧЕТОМ ЭФФЕКТА НЕЛИНЕЙНОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ

© 2021 г. И. А. Мартынова^{1, 2, *}, И. Л. Иосилевский^{1, 2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный, Россия

*E-mail: martina1204@yandex.ru

Поступила в редакцию 19.04.2021 г.

После доработки 17.11.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

В данной работе рассмотрена двухкомпонентная электронейтральная равновесная система макроионов конечных размеров с зарядом $Z \gg 1$ и точечных противоположно заряженных микроионов с единичным зарядом. На фазовой диаграмме комплексной плазмы в переменных κ – Γ (κ – безразмерный структурный параметр, Γ – параметр кулоновской неидеальности) выявлены области отрицательной сжимаемости и отрицательного давления для широкого диапазона зарядов макроионов. С учетом эффекта нелинейного экранирования макроионов микроионами в приближении Пуассона–Больцмана получена автомоделная зависимость эффективного заряда макроиона Z^* от исходного заряда Z , температуры системы и размеров макроионов для фиксированных параметров упаковки. В работе проведена оценка возможности достижения границы термодинамической неустойчивости с учетом полученной автомоделной зависимости. Показано, что граница термодинамической устойчивости по одному из уравнений состояния может оказаться недостижимой при характерных параметрах комплексной плазмы.

DOI: 10.31857/S0040364421060132

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена проблеме термодинамической устойчивости и фазовых переходов в неидеальной асимметричной комплексной плазме. Эта проблема занимает одно из центральных мест в творчестве В.Е. Фортова, что отражено, в частности, в целом ряде монографий ([1, 2] и др.) и подытожено в известной Энциклопедии низкотемпературной плазмы под его редакцией [3]. В своих работах В.Е. Фортов неоднократно обращался к проблеме влияния кулоновской неидеальности на макроскопические свойства низкотемпературной плазмы, и прежде всего, на возможность специфических фазовых переходов в такой плазме. Еще в одной из ранних работ [4] рассмотрена проблема гидродинамических аномалий, обязанных своим происхождением эффектам кулоновской неидеальности. В работе [5] сделана одна из первых попыток единым образом оценить параметры экспериментально труднодостижимых критических точек перехода газ–жидкость в плазме большого числа металлов, рассматриваемых именно как сильно-неидеальная система заряженных частиц. Теоретический подход, ставящий во главу угла именно “кулоновость” межчастичного взаимодействия плазмы металлов в окрестности их кри-

стических точек, успешно развивался впоследствии в работах А.А. Ликальтера [6–8] и др.

Специфика фазовых переходов в резко асимметричной ($Z \gg 1$) классической плазме изучалась во многих работах [1, 3, 9–23] и др. Так, в [24, 25] на примере модифицированной модели однокомпонентной плазмы (ОСР) на однородно-сжимаемом компенсирующем фоне (ОСР(–)) было показано существование в зоне сильной неидеальности обширных зон термодинамической неустойчивости, приводящей к фазовым переходам первого рода, включая энтальпийный (ван-дер-ваальсов) переход типа газ–жидкость со значительным межфазным скачком плотности. В этих и других работах подчеркивалось (см., например, обзоры [14, 26, 27] и ссылки в них), что суммарный эффект межчастичного притяжения в разнозарядных асимметричных кулоновских системах реализуется в виде двух конкурирующих между собой механизмов: образования конечных ассоциаций (связанных комплексов) и фазовых переходов. В модели ОСР(–) [24], как и в других вариантах семейства “безассоциативных” моделей плазмы [26], связанные комплексы отсутствуют по определению. Соответственно, весь эффект межчастичного притяжения реализуется в виде обширного

фазового перехода типа газ–жидкость с верхней критической точкой. Учет же локализации микроионов в виде плотного приповерхностного корреляционного слоя вокруг макроиона, например, описываемой приближением Пуассона–Больцмана [15, 28], должен по теории [26, 27] заметно сократить масштабы возможного фазового расслоения, вплоть до полного исчезновения “плазменного” фазового перехода типа газ–жидкость в специальной высоко асимметричной модели плазмы с так называемым “гладким” потенциалом Глаубермана, имеющим положительный фурье-образ и конечным при $r \rightarrow 0$ (см. [26, 27, 29] и ссылки в них)

$$\Phi_{\alpha,\beta}(r) = \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{r} \left(1 - \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \right).$$

Здесь $Z_\alpha = +Z$, $Z_\beta = -z$, $Z \gg z$, λ – длина экранирования. Указанной выше проблеме об изменениях границ термодинамической неустойчивости в асимметричной комплексной плазме посвящена настоящая работа.

Понятие “комплексная плазма” традиционно используется для обозначения целого семейства объектов и включает в себя несколько различных видов асимметричной по заряду плазмы. Среди них есть коллоидная плазма [11, 16], термически равновесная плазма с конденсированной дисперсной фазой (КДФ-плазма) [30], газоразрядная пылевая плазма [1, 2, 17, 31, 32], пылевая плазма серебристых облаков [33] и другие. В данной работе все эти виды плазмы будут рассматриваться как электронейтральные системы классических высокозаряженных макроионов конечных размеров (коллоидов, пылинок и пр.) и точечных микроионов, причем заряд макроионов будет во много раз превосходить заряд микроиона. Характерные значения рассматриваемых видов комплексной плазмы: для коллоидной плазмы концентрация макроионов $n_Z \sim 10^5 - 10^9 \text{ см}^{-3}$, абсолютное значение зарядового числа (далее – заряд) макроиона $Z \sim 10^2 - 10^4$, радиус макроиона $R_Z \sim 0.01 - 1 \text{ мкм}$, наиболее характерная температура системы – комнатная, система обычно находится в воде [16]. Для газоразрядной пылевой плазмы: $n_Z \sim 10^3 - 10^9 \text{ см}^{-3}$, $Z \sim 10^3 - 10^4$, $R_Z \sim 1 - 100 \text{ мкм}$, температура макроионов $kT_Z \approx 1 - 2 \text{ эВ}$, температура положительно заряженных микроионов $kT_i \approx 0.03 \text{ эВ}$, температура электронов (отрицательно заряженных микроионов) $kT_e \approx 1 - 7 \text{ эВ}$ [1, 2, 17]. Для КДФ-плазмы: $n_Z \sim 10^8 - 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $Z \sim 10^3 - 10^4$, температура и макроионов, и микроионов $kT \approx 2000 - 3000 \text{ К}$, $R_Z \sim 0.01 - 100 \text{ мкм}$ [30]; для пылевой плазмы серебристых облаков максимальное значение заряда $Z \sim 10^2$, $kT = kT_Z = kT_i = kT_e \approx 0.03 \text{ эВ}$, $n_Z \sim 10^0 - 10^4 \text{ см}^{-3}$, $R_Z \sim 1 \text{ мкм}$ [33]. Коллоидную плазму, КДФ-плазму и пылевую плазму серебристых облаков можно считать полностью равновесными, в то время как

газоразрядная пылевая плазма является в значительной мере неравновесной системой, в которой заряд макроиона переменный и зависит от параметров системы. Тем не менее, по аналогии с работами других авторов, в данной работе представлена полностью равновесная идеализированная модель, где заряд макроиона считается постоянным.

Здесь рассматриваются преимущественно резко асимметричные системы ($Z \gg 1$). Однако некоторое время назад очень активно изучались модели электролитов, где соотношение зарядов макроионов и микроионов обычно не превышало 3 : 1 (см., например, [34, 35] и др.). В работе [34] для симметричных (соотношение зарядов макроиона и микроиона – 1 : 1) и асимметричных (2 : 1 и 3 : 1) систем на основе предположения о составе низкотемпературной плазмы при температурах, близких к критическим, предложены параметры фазового перехода газ–жидкость. В [35] для определения поведения системы в области параметров, близких к критическим, применялся метод Монте-Карло в большом каноническом ансамбле для систем с асимметрией зарядов (соотношение заряда макроиона к заряду микроиона – 1 : 1, 2 : 1 и 3 : 1) и асимметрией радиусов макроиона и микроиона.

Многие авторы рассчитывали фазовые переходы для различных систем, описывающих комплексную плазму. Одной из таких работ является статья Хамагучи и др. [10], где фазовая диаграмма была промоделирована методом Монте-Карло для однокомпонентной системы с дебаевским потенциалом

$$\Phi_D(r) = \frac{(Ze)^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right). \quad (1)$$

В качестве прототипа для своей системы авторы рассматривали пылевую и коллоидную плазмы. На фазовой диаграмме [10] представлено три фазовых состояния: флюид, кристалл с объемноцентрированной решеткой (ОЦК) и кристалл с гранецентрированной решеткой (ГЦК). Фазовая диаграмма построена в переменных $\kappa - \Gamma$ (κ – безразмерный структурный параметр, Γ – параметр кулоновской неидеальности):

$$\kappa = \left(\frac{3}{4\pi n_Z}\right)^{1/3} \frac{1}{r_D}, \quad \Gamma = \frac{(Ze)^2}{kT} \left(\frac{4\pi n_Z}{3}\right)^{1/3}, \quad (2)$$

где r_D – дебаевский радиус. Для описания термодинамики в [10] рассматривалась двухкомпонентная система, и для этого случая дебаевский радиус имеет вид

$$r_D = \left(\frac{4\pi e^2 n_i}{kT}\right)^{-1/2},$$

где n_i – концентрация микроионов (из условия электронейтральности $n_i = Zn_Z$).

Аппроксимация для кривой плавления фазовой диаграммы [10] была получена в работе [20]. Чис-

ленно кривая плавления рассчитывалась также в других статьях, например в [21–23].

В контексте фазовых переходов в системе Юкавы следует упомянуть и работу [18], где приведена теоретическая оценка границы стеклования переохлажденной жидкой фазы системы Юкавы, которая не является фазовым переходом в строгом смысле, но в то же время представляется важным структурным переходом в рассматриваемой системе.

Принято считать, что в системе с отталкивательным потенциалом и отсутствием притяжения между макроионами невозможен фазовый переход типа газ–жидкость. Но, например, в работе [11] методом Монте-Карло моделируется однокомпонентная система с дебаевским потенциалом. Прямым моделированием в этой системе при достаточно высоких зарядах макроионов зафиксировано фазовое расслоение типа флюид–флюид на две фазы существенно разной плотности, условно называемой авторами [11] газом и жидкостью. Таким образом, в обеих работах [10, 11] моделировались однокомпонентные системы с дебаевским потенциалом, однако термодинамика в [10] рассчитывалась для многокомпонентной системы с одним сортом макроионов и одним или двумя сортами микроионов, а в [11] для однокомпонентной системы с дебаевским радиусом, зависящим от одной компоненты фона (в выражении для внутренней энергии в [10] есть слагаемые с притяжением, а в выражении [11] их нет). По уравнению состояния [10] давление в системе может получиться отрицательным, а по уравнению состояния [11] давление принимает только положительные значения. В работе [10] при моделировании приравнивались плотности макроионов и свободные энергии Гельмгольца, а в работе [11] на границе двух фаз при постоянной температуре системы приравнивались давления и свободные энергии Гиббса, что является более корректным, так как в обеих работах рассматриваются фазовые переходы первого рода, где должен наблюдаться скачок плотности. При этом на фазовой диаграмме [10] есть три фазовых состояния (флюид, ОЦК и ГЦК), а в статье [11] – более плотное (жидкость) и менее плотное (газ) состояния флюида. Более того, в [11] утверждается, что в некотором диапазоне зарядов макроионов может формироваться кристаллическая фаза, но она является неустойчивой в отличие от фазы флюида (более или менее плотного), так как свободная энергия кристаллической фазы по абсолютному значению меньше свободных энергий фаз жидкости и газа.

Еще более важной является работа [12], где моделируется непосредственно уже двухкомпонентная модель – прототип дебаевской модели [11]. Модель состоит из классических макроионов конечных размеров и противоположно заряженных точечных микроионов, где заряд макроиона Z боль-

ше и/или много больше заряда микроиона. В [12] в рамках прямого численного моделирования с помощью метода Монте-Карло рассчитываются все три стандартных фазовых перехода – плавление (кристалл–жидкость), испарение (жидкость–газ) и сублимация (кристалл–газ), и видно фазовое расслоение флюида на газ и жидкость. При этом скачок плотности на границе плавления достигает аномально высоких значений (~30%).

Другим важным примером теоретического предсказания возможности фазового перехода флюид–флюид (в принципе отсутствующего на диаграмме [10]) с большой величиной межфазного скачка плотности в асимметричной системе зарядов является работа [13], где в рамках строгого метода функционала плотности зафиксирован даже не один, а два типа таких переходов. В [13] рассматривалась система конечных по размеру положительно заряженных макроионов с зарядом Z в сочетании с микроионами двух сортов, отличающихся знаком заряда. Для упрощенной системы с одним сортом микроионов был зафиксирован фазовый переход типа газ–жидкость с верхней критической точкой, а для более сложной системы с двумя сортами микроионов в некотором интервале значений заряда макроионов был зафиксирован фазовый переход с двумя (!) критическими точками.

В [15] подчеркивалось, что при использовании уравнений состояния [19, 36] на фазовой диаграмме [10] присутствуют обширные области отрицательного давления и отрицательной сжимаемости. В равновесной системе подобная ситуация должна вести к фазовому расслоению на фазы разной плотности [37].

Фазовые переходы в неравновесной пылевой плазме также рассматривались в ряде работ, например в [17, 32].

В данной работе термодинамическая устойчивость в классической равновесной трехмерной двухкомпонентной электронейтральной асимметричной комплексной плазме анализируется с помощью автомодельных зависимостей эффективного заряда макроиона от исходного заряда макроиона, температуры системы, размеров и концентрации макроионов [38, 39]. В ходе расчета автомодельных зависимостей в двухкомпонентной равновесной системе макроионов конечных размеров с зарядом $Z \gg 1$ и противоположно заряженных точечных микроионов с единичным зарядом учитывалось нелинейное экранирование макроионов микроионами в рамках приближения Пуассона–Больцмана (ПБ) в средней сферически-симметричной электронейтральной ячейке Вигнера–Зейтца (ВЗ). Рассматривается одна ячейка, однако сама модель ячеек ВЗ позволяет учитывать корреляции между макроионами различных ячеек вне зависимости от силы взаимодействия между макроионами. Приближение ПБ поз-

волит корректно учитывать сильные корреляции между микроионами и макроионом одной ячейки.

ЗОНЫ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ И ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ СЖИМАЕМОСТИ НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЫ [10] С УЧЕТОМ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ [19, 36]

Рассматривается однотемпературная электронейтральная система классических макроионов с зарядом Z и микроионов фона с единичным зарядом. В такой системе параметры κ и Γ уже не являются независимыми. С учетом условия электронейтральности $Zn_Z = n_i$ и уравнения (1) получаем

$$\Gamma = \frac{Z}{3} \kappa^2.$$

Таким образом, при фиксированном значении Z все двумерное пространство значений температуры системы kT и концентрации макроионов n_Z в координатах κ и Γ редуцируются на единую одномерную кривую – параболу.

В данной работе для расчета областей отрицательного давления и отрицательной сжимаемости использовалось два уравнения состояния [19, 36]. В [19, 36] приведены зависимости безразмерной поправки на неидеальность для давления $p_{\text{ex}} = P_{\text{ex}}/(n_Z kT)$ как функции параметра Γ при фиксированных значениях параметра κ (P_{ex} – поправка на неидеальность для давления). Примечательно, что на обоих графиках $p_{\text{ex}}(\Gamma)$ принимает отрицательные значения. Более того, с ростом параметра Γ абсолютное значение безразмерной поправки на неидеальность для давления монотонно возрастает.

Анализ работ [19, 36] показывает, что существует неоднозначность в точном определении термодинамической роли фона микроионов, что является принципиальным в процедуре вычисления давления в плазме. Неоднозначность в определении термодинамической роли фона подтверждается тем, что кривые $p_{\text{ex}}(\Gamma)$ работ [19, 36] при фиксированных значениях κ не только не совпадают друг с другом, но также и с аппроксимацией для однокомпонентной плазмы ($\kappa = 0$), рассчитанной с использованием результатов [40] (см. подробнее [15]). Более того, наклон кривых при фиксированных κ [2, 12] при увеличении параметра κ меняется в разные стороны. Это происходит потому, что в работе [36] при выводе зависимости параметра κ от концентрации макроионов n_Z фон считается сжимаемым, поскольку вследствие условия электронейтральности дебаевский радиус (2) зависит от n_Z . Это дает право дифференцировать дебаевский радиус по n_Z и приводит к условию $(\partial\kappa/\partial n_Z)_T = \kappa/6n_Z$. Авторы [19] приводят аргументы в пользу того, что указанную выше зависимость параметра κ от n_Z не следует учитывать

при дифференцировании. Это приводит к условию $(\partial\kappa/\partial n_Z)_T = -\kappa/3n_Z$.

Безразмерное давление в электронейтральной системе макроионов и микроионов $p = P/(n_Z kT)$ можно записать как

$$p(\kappa, \Gamma) = 1 + Z + p_{\text{ex}}(\kappa, \Gamma).$$

Здесь первые два члена соответствуют идеальногазовому вкладу макроионов и микроионов. Обратную сжимаемость можно записать как

$$\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial P}{\partial n_Z} \right)_T = 1 + Z + p_{\text{ex}} + n_Z \left(\frac{\partial p_{\text{ex}}}{\partial n_Z} \right)_T.$$

Для расчета границ отрицательного давления и сжимаемости с помощью уравнения состояния [36] из этой работы была взята зависимость $p_{\text{ex}}(\kappa, \Gamma)$.

Второе уравнение состояния было получено в статье [19]. Обсуждаемая асимметричная плазма макроионов и микроионов рассматривается в этой работе как чисто кулоновская система, подчиняющаяся уравнению Пуассона. По этой причине и ввиду указанной выше неопределенности с учетом сжимаемости фона и необходимости дифференцирования по n_Z при вычислении давления и при вычислении границ термодинамической неустойчивости в настоящей работе используется известная связь кулоновских поправок на неидеальность к давлению p_{ex} и энергии u_{ex} , справедливая для кулоновских систем:

$$p_{\text{ex}}(\kappa, \Gamma) = u_{\text{ex}}(\kappa, \Gamma)/3, \quad (3)$$

с результатами непосредственного расчета поправки к энергии для $u_{\text{ex}}(\kappa, \Gamma)$ из [19]. В [19] фон микроионов считался несжимаемым. Здесь полагается, что учет сжимаемости фона является более корректным. Это позволяет, например, учитывать эффект исключенного объема, что было сделано в работе [28].

На рис. 1 на фазовую диаграмму [10] (сплошные линии без нумерации – границы фазовых переходов) нанесены параболы (штриховые линии), соответствующие определенным значениям заряда макроиона Z . Справа от линий $1a$ и $2a$ находятся области отрицательной сжимаемости, а справа от линий $1b$ и $2b$ – области отрицательного давления. При расчете линий $1a$ и $1b$ опирались на уравнение состояния [36], при расчете линий $2a$ и $2b$ на уравнение состояния [19]. Фон микроионов в обоих случаях считался сжимаемым.

Рис. 1 можно трактовать следующим образом: при движении слева направо вдоль параболы $\Gamma \sim \kappa^2$, соответствующей некоторому значению заряда макроиона Z , система изохорически охлаждается (или изотермически сжимается), и в некоторый момент ее сжимаемость становится отрицательной. В этом случае некоторые области на фазовой диаграмме становятся недостижимыми. Следует

подчеркнуть, что таким образом нельзя достичь, например, тройной точки на исходной фазовой диаграмме для двухкомпонентной равновесной трехмерной системы.

АВТОМОДЕЛЬНОСТЬ ЗАВИСИМОСТИ ЭФФЕКТИВНОГО ЗАРЯДА МАКРОИОНА ОТ ЕГО ИСХОДНОГО ЗАРЯДА, ТЕМПЕРАТУРЫ СИСТЕМЫ И РАЗМЕРОВ МАКРОИОНОВ

Известно, что эффект нелинейности в экранировании заряда проявляется прежде всего при учете вклада интенсивного притяжения макроиона и микроионов в области максимума притяжения вблизи поверхности макроиона, где нарушается условие линеаризации $|(e\varphi(r))/(kT)| \ll 1$ ($\varphi(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый макроионом и окружающими его микроионами). Хорошо известным следствием обсуждаемого эффекта (см., например, [30]) является резкий рост в этой зоне концентрации микроионов, локализованных вблизи поверхности макроиона, создающих своеобразную плотную “пленку” и образующих вместе с экранированным макроионом квазичастицу с эффективным (“видимым”) зарядом Z^* , который может быть заметно меньше исходного заряда макроиона Z . Такая локализация части микроионов вблизи поверхности макроиона делает обоснованным выделение этой части экранирующего облака микроионов в отдельный сорт связанных микроионов [16] с оставлением в разряде свободных микроионов в зоне, где выполняется упомянутое условие линеаризации.

Поскольку в рамках бескорреляционного приближения ПБ такое разделение микроионов на свободные и связанные является условным, в литературе обсуждаются различные способы этого разделения. Один из них [16] относится к свободным микроионам, расположенным вдали от макроиона – в области, где выполняется условие линеаризации и где параметры экранирования могут описываться линеаризованным дебаевским приближением. Другой способ выделения свободных ионов и определения эффективного заряда Z^* рассмотрен в [41]. Согласно этой процедуре к разряду свободных относят все микроионы с положительной полной энергией (т.е. суммой кинетической и потенциальной энергий), а все микроионы с отрицательной полной энергией – к связанным. Более простой вариант определения эффективного заряда с ориентацией на использование модели средней сферической ячейки ВЗ использован в [42]. В рамках этой процедуры свободными считаются микроионы с концентрацией, равной концентрации микроионов на границе ячейки ВЗ (с радиусом R) n_{i0} , однородно заполняющие все пространство ячейки, а связанными – все микроионы с концентрацией выше n_{i0} :

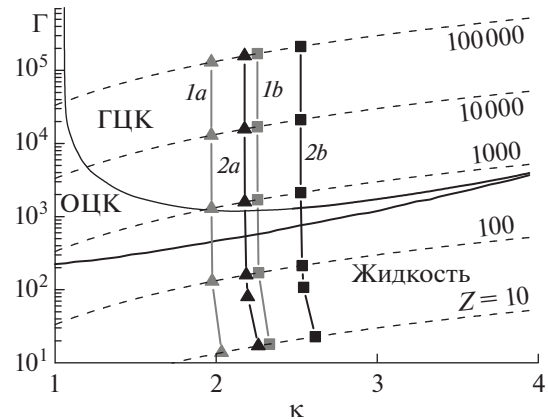


Рис. 1. Области отрицательной сжимаемости (справа от линий $1a$ и $1b$) и отрицательного давления (справа от линий $2a$ и $2b$) двухкомпонентной электронейтральной однотемпературной системы макроионов и противоположно заряженных микроионов, рассчитанные по уравнениям состояния [19, 36] на фазовой диаграмме [10]; сплошные линии – границы фазовых переходов диаграммы [10], штриховые линии – параболы $\Gamma = \kappa^2 Z / 3$; $1a, 1b$ рассчитаны с помощью уравнения состояния [36]; $2a, 2b$ – [19]; фон микроионов сжимаемый.

$$Z^* \equiv \frac{4\pi}{3} n_{i0} (R^3 - R_Z^3).$$

Этот упрощенный вариант был использован в [43] для учета эффекта нелинейного экранирования и соответствующей “перенормировки” заряда макроиона $Z \Rightarrow Z^*$ и последующей оценки предполагаемого сдвига фазового состояния системы на фазовой диаграмме [10] комплексной плазмы.

Как и в [43], в расчетах настоящей работы рассматривается электронейтральная сферически-симметричная ячейка ВЗ с центральным макроионом с зарядом Z и радиусом R_Z . Остальной объем ячейки заполнен противоположно заряженными точечными микроионами с единичным зарядом. Радиус ячейки равен R . Результаты расчета профиля микроионов в приближении ПБ приведены на рис. 2, где изображена зависимость перенормированного (эффективного) заряда Z^* от исходного Z в вариации последнего при фиксированных значениях температуры системы и концентрации макроионов (так называемый процесс “зарядки”).

Главный результат расчетов, демонстрируемый на рис. 1, состоит в отчетливом распаде всей зависимости $Z^*(Z)$ на два режима изменения эффективного заряда Z^* – слабого экранирования, когда $Z^* \approx Z$, и режима сильного экранирования (насыщения), когда $Z^* \approx \text{const}$, с плавным, но отчетливым переходом между ветвями. Характерно, что условия этого перехода между двумя режимами экранирования точно соответствуют этапу нарушения условия линеаризации. На рис. 2 нанесены границы интервала выхода из этого

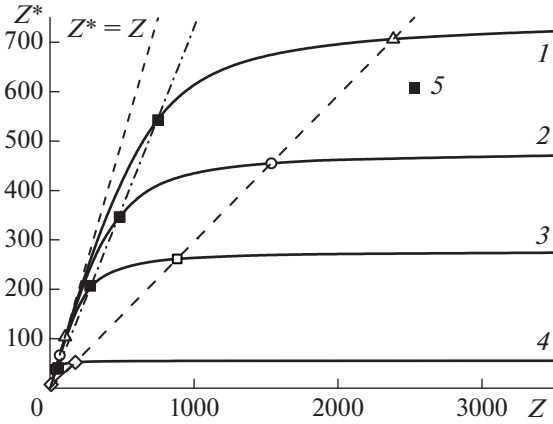


Рис. 2. Эффективный заряд макроиона как функция исходного заряда макроиона для различных температур в приближении Пуассона–Больцмана при $n_Z = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $R = 13.34 \text{ мкм}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$; 1 – $kT = 0.135 \text{ эВ}$, 2 – 0.087, 3 – 0.05, 4 – 0.01; левые и правые полые маркеры – $\Phi(R_Z) = 1$ и $\Phi(R_Z) = 10$ соответственно; 5 – условие $Ze^2/(R_Z kT) = 8$.

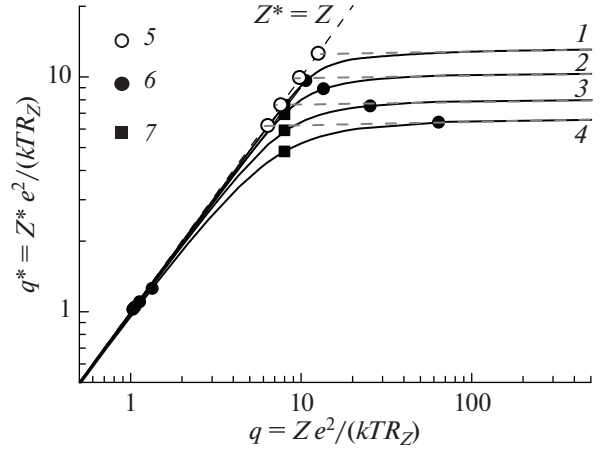


Рис. 3. Автомоделные зависимости $Z^*(Z, kT, R_Z)$ в приближении Пуассона–Больцмана при фиксированных параметрах упаковки: штриховые линии – касательные к кривым 1–4, 1 – $\phi = 4.2 \times 10^{-6}$ ($n_Z = 10^6 \text{ см}^{-3}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$), точка пересечения двух касательных $q^* = 6.2$; 2 – 4.2×10^{-5} ($n_Z = 10^7 \text{ см}^{-3}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$), 7.6; 3 – 4.2×10^{-4} ($n_Z = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$), 9.9; 4 – 4.2×10^{-3} ($n_Z = 10^9 \text{ см}^{-3}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$), 12.6; 5, 6 – точки пересечения двух касательных к каждой из кривых 1–4; 7 – условие $Ze^2/(R_Z kT) = 8$.

условия: $\Phi(R_Z) \equiv e\phi(R_Z)/(kT) = 1$ и $\Phi(R_Z) = 10$, где $\phi(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый макроионом и окружающими его микроионами. В дальнейшем в качестве простой условной границы обсуждаемой смены режима экранирования в приближении ПБ можно взять приближенное положение середины участка перехода – точку максимального перегиба, также отмеченную на рис. 3, с простым условием $Ze^2/(R_Z kT) = 8$.

Еще одно замечательное свойство ПБ-экранирования, которое следует из рис. 2, это своеобразная автомоделность зависимости $Z^*(Z, kT, R_Z)$. Следует уточнить, что данная автомоделность означает возможность простым и физически понятным масштабированием совместить воедино все зависимости $Z^*(Z)$, отвечающие различным температурам макроионов. Это иллюстрируется на рис. 3, где обе величины как исходного заряда Z , так и рассчитанного в приближении ПБ эффективного заряда Z^* отнесены к величине температуры плазмы для различных фиксированных параметров упаковки $\phi \equiv 4\pi n_Z R_Z^3/3$. Для простоты дальнейшего использования введены более краткие обозначения безразмерных комбинаций параметров по горизонтальной и вертикальной осям соответственно

$$q = \frac{Ze^2}{R_Z kT}, \quad q^* = \frac{Z^* e^2}{R_Z kT}. \quad (4)$$

Для каждой из автомоделных кривых рис. 3 проведено две касательных – к участкам, отвечающим за линейное ($Z^* \approx Z$) и нелинейное ($Z^* \approx \text{const}$)

насыщение. Точки пересечения обозначены незаполненными кружками. Именно эти точки используются в качестве условной границы между двумя режимами экранирования для соответствующей фиксированной концентрации макроионов.

В данной работе понятие эффективного заряда макроиона используется для демонстрации автомоделности зависимости этого заряда от различных параметров плазмы и оценки достижимости границы термодинамической устойчивости на основе полученной автомоделной зависимости. Расчет же термодинамических потенциалов с использованием эффективного заряда макроиона в данной работе не проводится.

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ДОСТИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ

Как известно, реальное фазовое состояние системы зависит от эффективного межчастичного взаимодействия макроионов на средних расстояниях между ними. Предполагается [43], что это определяется эффективным зарядом макроиона Z^* , экранируемым только свободными микроионами с концентрацией $n_0(r)$, а не исходным зарядом макроиона Z и концентрацией всех микроионов n_i . При этом структура фазовой диаграммы [10] приближенно сохраняется для асимметричной системы-прототипа, состоящей из макроионов ко-

нечных размеров и точечных микроионов, но уже в переменных $\kappa^* - \Gamma^*$:

$$\kappa^* = \left(\frac{3}{4\pi n_Z} \right)^{1/3} \left(\frac{4\pi e^2 n_{i0}}{kT} \right)^{-1/2}, \quad \Gamma^* = \frac{(Z^* e)^2 (4\pi n_Z)^{1/3}}{kT}.$$

Поскольку $Z^* < Z$ и $n_{i0} < n_i$, то при учете эффекта нелинейного экранирования реальное положение фазового состояния указанной системы-прототипа на исходной фазовой диаграмме смещается в сторону меньших Γ и κ . Вывод, который можно сделать о положении фазовых состояний электронной нейтральной системы макроионов конечных размеров и точечных микроионов с учетом эффекта нелинейного экранирования, позволяет предположить, что учет нелинейного экранирования в подходе [11] может привести к существенному смещению границ фазовых состояний такой же системы-прототипа относительно их положений для рассматриваемой однокомпонентной системы макроионов на сжимаемом фоне микроионов [11]. Более того, границы отрицательного давления и отрицательной сжимаемости, полученные в настоящей работе, также сохраняются, но не в переменных $\kappa - \Gamma$, а в переменных $\kappa^* - \Gamma^*$.

Выражая n_{i0} из уравнения (3) и подставляя туда радиус ячейки $R = (3/4\pi n_Z)^{1/3}$, находим

$$n_{i0} = \frac{Z^* n_Z}{(1 - \phi)}. \quad (5)$$

Подставим это выражение в уравнения для κ^* и Γ^* (4) и получим соотношение между этими параметрами в двухкомпонентной системе

$$\Gamma^* = \kappa^{*2} \frac{Z^*}{3(1 - \phi)}.$$

Так как параметр упаковки в комплексной плазме обычно принимает значения примерно от 10^{-3} до 10^{-8} [39], то выражение (5) приобретает вид

$$\Gamma^* \approx \kappa^{*2} Z^*/3.$$

В таком случае безразмерный параметр q^* можно выразить и через Γ^* , и через κ^* . Запишем первый вариант

$$q^* = \frac{\Gamma^*}{Z^*} \frac{1}{\phi^{1/3}}.$$

На рис. 4 проведены вертикальные оценочные кривые, примерно соответствующие границам отрицательного давления и отрицательной сжимаемости [19] рис. 1. Последние две кривые, как утверждалось в данном разделе выше, с учетом эффекта нелинейного экранирования должны сохраняться в переменных $\kappa^* - \Gamma^*$. Штрихпунктир на рис. 4 соответствуют параметрам упаковки кривых 1–4 рис. 3. Линии 1–4 на рис. 4 соответствуют значениям q^* в точках пересечения двух касатель-

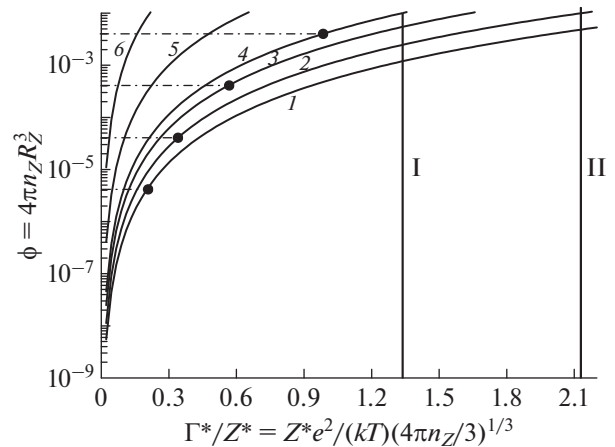


Рис. 4. Оценка достижимости термодинамической неустойчивости по уравнению состояния [19]: I – граница отрицательной (справа от линии) сжимаемости, II – граница отрицательного (справа) давления по уравнению состояния [19]; штрихпунктирные линии – $\phi = \text{const}$ (снизу вверх: $\phi = 4.2 \times 10^{-6}, 4.2 \times 10^{-5}, 4.2 \times 10^{-4}, 4.2 \times 10^{-3}$ в соответствии с линиями 1–4); 1 – $q^* = 12.6, 2 - 9.9, 3 - 7.6, 4 - 6.2, 5 - 3, 6 - 1$.

ных к кривым 1–4 на рис. 3 соответственно. Для каждой автомодельной кривой на рис. 3 при росте параметра q значение параметра q^* в режиме насыщения практически остается постоянным, поэтому можно считать, что значение q^* точки пересечения касательных является практически максимальным для соответствующего параметра упаковки. Следовательно, при перемещении вдоль любой штрихпунктирной кривой рис. 4 слева направо значение q^* повышается до некоторого максимального значения, которое отмечено черным кружком в точке пересечения кривых $\phi = \text{const}$ и $q^* = \text{const}$. Все четыре точки находятся сравнительно далеко от границ отрицательного давления и отрицательной сжимаемости по уравнению состояния [19]. Исходя из этого, можно предположить, что граница термодинамической неустойчивости по уравнению состояния [19] не достигается.

В работе [16] также показано, что учет нелинейного экранирования в двухкомпонентной коллоидной плазме и результирующая перенормировка исходного заряда макроиона ведут к тому, что фазовый переход типа газ–жидкость отсутствует в такой системе. Без учета данного эффекта наблюдается фазовое расслоение. Отличие указанного результата [16] от настоящей работы заключается в использовании другого определения эффективного заряда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получены границы областей отрицательного давления и отрицательной сжимаемости, задаваемых уравнениями состояния [19, 36] на

фазовой диаграмме асимметричной комплексной плазмы [10]. Значительная часть фазовой диаграммы занята областью отрицательных значений давления и сжимаемости.

С учетом эффекта нелинейного экранирования макроионов микроионами в приближении Пуассона–Больцмана в средней сферической ячейке Вигнера–Зейтца была получена автомодельная зависимость эффективного заряда макроиона Z^* от исходного заряда Z , температуры системы kT и радиуса макроиона R_Z при фиксированном параметре упаковки.

Проведенная на основе полученной автомодельной зависимости $Z^*(Z, kT, R_Z)$ оценка возможности достижения границы термодинамической устойчивости по уравнению состояния [19] дает основание полагать, что указанная граница может оказаться недостижимой. В работе получены границы отрицательного давления и отрицательной сжимаемости по уравнениям состояния [19, 36] на фазовой диаграмме [10] комплексной плазмы. Показано, что большая часть данной фазовой диаграммы также лежит в области отрицательных значений давлений и сжимаемости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Физика неидеальной плазмы. Учеб. пособ. М.: Физматлит, 2004. 528 с.
2. *Фортов В.Е., Морфилл Г.Е.* Комплексная и пылевая плазма: из лаборатории в космос / Под ред. Фортова В.Е., Морфилла Г.Е. Пер. с англ. под ред. Храпака А.Г. М.: Физматлит, 2012. 444 с.
3. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. прилож. III-1 / Под ред. Фортова В.Е. М.: Физматлит, 2004. 535 с.
4. *Фортов В.Е.* Гидродинамические эффекты в неидеальной плазме // ТВТ. 1972. Т. 10. № 1. С. 168.
5. *Фортов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А.* Простые и единые оценки параметров критических точек многих веществ // ТВТ. 1975. Т. 13. № 5. С. 1072.
6. *Ликальтер А.А.* Газообразные металлы // УФН. 1992. Т. 162. С. 119.
7. *Ликальтер А.А.* О критических параметрах металлов // ТВТ. 1985. Т. 23. № 3. С. 465.
8. *Ликальтер А.А.* Плазма металлов и полупроводников в окрестности критической точки конденсации // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. прилож. III-1 / Под ред. Старостина А.Н., Иосилевского И.Л. Под общ. ред. Фортова В.Е. М.: Физматлит, 2004. С. 349.
9. *Иосилевский И.Л.* Фазовые переходы в кулоновских системах. В сб.: Уравнение состояния в экстремальных условиях / Под ред. Гадияка Г.В. Новосибирск: Изд-во СОАН СССР, 1981. С. 20.
10. *Hamaguchi S., Farouki R., Dubin D.* Phase Diagram of Yukawa Systems near the One-component-plasma Limit Revisited // J. Chem. Phys. 1996. V. 105. № 17. P. 7641.
11. *Dijkstra M., van Roij R.* Vapour-liquid Coexistence for Purely Repulsive Point-Yukawa Fluids // J. Phys. Condens. Matter. 1998. V. 10. № 6. P. 1219.
12. *Hynninen A.-P., Panagiotopoulos A. Z.* Disappearance of the Gas-liquid Phase Transition for Highly Charged Colloids // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. № 19. P. 198301.
13. *Warren P.B.* Phase Separation, Interface Properties, and Charge Density Waves in a Simplified Model for a Macroion Suspension // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. № 1. P. 011411.
14. *Иосилевский И.Л., Старостин А.Н.* Проблема термодинамической устойчивости и фазовых переходов в низкотемпературной плазме // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. прилож. III-1 / Под ред. Фортова В.Е. М.: Наука, 2000. С. 327.
15. *Martynova I., Iosilevskiy I.* Features of Phase Transitions in Models of Complex Plasma // Contrib. Plasma Phys. 2016. V. 56. № 5. P. 432.
16. *Diehl A., Barbosa M., Levin Y.* Charge Renormalization and Phase Separation in Colloidal Suspensions // EPL. 2001. V. 53. № 1. P. 86.
17. *Фортов В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А., Молотков В.И., Петров О.Ф.* Пылевая плазма // УФН. 2004. Т. 174. № 5. С. 495.
18. *Yazdi A., Ivlev A., Khrapak S., Thomas H., Morfill G.E., Löwen H., Wysocki A., Sperl M.* Glass-transition Properties from Hard Spheres to Charged Point Particles // Phys. Rev. E. 2014. V. 89. P. 063105.
19. *Khrapak S., Khrapak A., Ivlev A., Morfill G.* Simple Estimation of Thermodynamic Properties of Yukawa Systems // Phys. Rev. E. 2014. V. 89. № 2. P. 023102.
20. *Vaulina O., Khrapak A.* Scaling Law for the Fluid-solid Phase Transition in Yukawa Systems (Dusty Plasmas) // JETP. 2000. V. 90. № 2. P. 289.
21. *Vaulina O.S., Koss X.G.* Solid–Liquid Phase Transitions in 3D Systems with the Inverse-power and Yukawa Potentials // Phys. Lett. A. 2016. V. 380. № 13. P. 1290.
22. *Meijer E.J., Frenkel D.* Melting Line of Yukawa System by Computer Simulation // J. Chem. Phys. 1991. V. 94. № 3. P. 2269.
23. *Kremer K., Robbins M.O., Grest G.S.* Phase Diagram of Yukawa Systems: Model for Charge-stabilized Colloids // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. № 21. P. 2694.
24. *Иосилевский И.Л.* Фазовый переход в простейшей модели плазмы // ТВТ. 1985. Т. 23. № 6. С. 1041.
25. *Iosilevski I., Chigvintsev A.* Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Physics of Non-ideal Plasmas / Eds. Ebeling W., Forster A., Radtke R. Stuttgart–Leipzig: Teubner, 1992. P. 87.
26. *Иосилевский И.Л.* Эффекты неидеальности в низкотемпературной плазме // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. прилож. III-1 / Под ред. Старостина А.Н., Иосилевского И.Л. Под общ. ред. Фортова В.Е. М.: Физматлит, 2004. С. 349.
27. *Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Сон Э.Е., Фортов В.Е.* Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме. М.: Изд-во МФТИ, 2000. 476 с.
28. *Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A.* Macroions Non-linear Screening in Complex Plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 946. P. 012147.
29. *Иосилевский И.Л.* Физика неидеальных кулоновских систем. Saarbruecken: Lambert Acad. Publ., 2011. 235 с.

30. Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Ионизационное равновесие в сильно неидеальной плазме с конденсированной дисперсной фазой // ТВТ. 1984. Т. 22. № 5. С. 833.
31. Лунаев А.М., Молотков В.И., Жуховицкий Д.И., Наумкин В.Н., Усачев А.Д., Зобнин А.В., Петров О.Ф., Фортвов В.Е. Исследования пылевой газоразрядной плазмы на космической установке “Плазменный кристалл-3 плюс” (обзор) // ТВТ. 2020. Т. 58. № 4. С. 485.
32. Khrapak S.A., Klumov B.A., Huber P., Molotkov V.I., Lipraev A.M., Naumkin V.N., Ivlev A.V., Thomas H.M., Schwabe M., Morfill G.E., Petrov O.F., Fortov V.E., Malentschenko Yu., Volkov S. Fluid-solid Phase Transition in Three-dimensional Complex Plasmas under Microgravity Conditions // Phys. Rev. E. 2012. V. 85. P.066407.
33. Клумов Б., Морфилл Г., Попель С. Формирование структур в запыленной ионосфере // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. № 1. С. 171.
34. Хомкин А.Л., Муленко И.А. Фазовый переход в моделях электролитов, несимметричных по размеру и заряду // ТВТ. 2003. Т. 41. № 5. С. 659.
35. Kim Y.C., Fisher M.E., Panagiotopoulos A.Z. Universality of Ionic Criticality: Size- and Charge-asymmetric Electrolytes // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. № 19. P. 195703.
36. Farouki R.T., Hamaguchi S. Thermodynamics of Strongly-coupled Yukawa Systems near the One-component-plasma Limit. II. Molecular Dynamics Simulations // J. Chem. Phys. 1994. V. 101. № 11. P. 9885.
37. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Учеб. пособ. В 10-ти т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. М.: Физматлит, 2002. 616 с.
38. Martynova I., Iosilevskiy I. Macroion Effective Charge in Complex Plasmas with Regard to Microions Correlations // Contrib. Plasma Phys. 2021. V. 61. e202000142.
39. Martynova I., Iosilevskiy I. Self-similarity of Nonlinear Screening in Asymmetric Complex Plasmas // Contrib. Plasma Phys. 2021. V. 61. e202100007.
40. Chabrier G., Potekhin A.Y. Equation of State of Fully Ionized Electron-ion Plasmas // Phys. Rev. E. 1998. V. 58. № 4. P. 4941.
41. Szichman H., Eliezer S., Salzmann D. Calculation of the Moments of the Charge State Distribution in Hot and Dense Plasmas Using the Thomas–Fermi Models // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1987. V. 38. № 4. P. 281.
42. Martynova I., Iosilevskiy I. Effect of Non-linear Screening on Thermodynamic Properties of Complex Plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1147. P. 012107.
43. Martynova I.A., Iosilevskiy I.L. Non-linear Screening and Phase States of a Complex Plasma // Contrib. Plasma Phys. 2018. V. 58. № 2–3. P. 203.

УДК 537.5

ОБМЕННО-КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭКСИТОНЫ В ПЛАЗМЕННЫХ СРЕДАХ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО И “ПРОБЛЕМА ЗНАКОВ”

© 2021 г. В. С. Филинов^{1, 2, *}, П. Р. Левашов^{1, 2}, А. С. Ларкин^{1, 2}¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский физико-технический институт, Москва, Россия

*E-mail: vladimir_filinov@mail.ru

Поступила в редакцию 27.03.2021 г.

После доработки 27.03.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

В работе для учета интерференционных эффектов кулоновского и обменного взаимодействий электронов разработано новое представление матрицы плотности через интеграл по траекториям в каноническом ансамбле при конечных температурах. Развитое представление позволяет снизить влияние “проблемы знака” при моделировании фермионных систем частиц методом Монте-Карло. Полученные результаты для парных функций распределения в плазме и однородном электронном газе указывают на образование обменно-корреляционных экситонов. Данный физический эффект ранее не наблюдался при моделировании плазменных сред с помощью метода Монте-Карло.

DOI: 10.31857/S0040364421060053

ВВЕДЕНИЕ

Однокомпонентная плазма (one-component plasma – OCP) состоит из одного вида заряженных частиц, погруженных в жесткий нейтрализующий фон. OCP, состоящую из вырожденных электронов (однородный электронный газ, uniform electron gas – UEG), можно использовать как фундаментальную модель простых металлов. Хотя UEG не соответствует реальной физической системе, тем не менее точное описание его свойств имеет решающее значение для теории функционала плотности (density functional theory – DFT) [1, 2]. В рамках DFT сильно взаимодействующая многоэлектронная система преобразуется в эффективную невзаимодействующую систему частиц посредством введения эффективного внешнего потенциала, который содержит все обменные и корреляционные эффекты и который можно аппроксимировать обменно-корреляционной энергией системы [3, 4].

Надежные данные для UEG при нулевой температуре были получены с помощью квантового метода Монте-Карло [5, 6] и широко использовались в расчетах методом DFT. Улучшенные данные для основного состояния представлены в [7]. Однако все эти результаты ограничены нулевой температурой и неприменимы к сильно неидеальным плазменным средам.

Надежные расчеты свойств плазменных сред при конечных температурах можно выполнить в рамках фейнмановской формулировки квантовой механики с помощью метода Монте-Карло, кото-

рый позволяет рассчитать термодинамические величины, представленные в виде интегралов по траекториям (path integral Monte Carlo – PIMC [8–12]. За последние два десятилетия для фермионных систем были получены многочисленные результаты, включая, например, свойства коррелированных электронов в квантовых точках [13, 14] или в плотной плазме [15–17]. Эти результаты использовались в DFT в качестве реперных для построения приближенных зависящих от температуры выражений для локальной (спиновой) плотности (the local (spin-)density approximation – L(S)DA) и для более сложных градиентных приближений [18–24]. Энергия и другие результаты расчетов методом Монте-Карло для UEG важны для понимания формализма отклика плотности [25–32].

Основная трудность квантового моделирования системы фермионов с помощью PIMC – “проблема знаков”, связанная с требованием антисимметризации матрицы плотности. В результате все термодинамические величины представляются как суммы положительных и отрицательных слагаемых, относящиеся к четным и нечетным перестановкам. Результат определяется малой разностью этих двух больших вкладов. Численные расчеты в этом случае сильно затруднены. Для преодоления этой трудности были разработаны различные подходы, но “проблема знаков” для сильно коррелированных фермионов так и не была полностью решена за последние 50 лет.

В [33, 34] была использована вигнеровская формулировка квантовой механики, чтобы избежать антисимметризации матричных элементов и тем са-

мым избежать “проблемы знаков” и реализовать принцип запрета Паули. Однако этот подход неприменим при высоком вырождении фермионов.

В [35], чтобы избежать “проблемы знаков”, был развит метод Монте-Карло с ограничениями (restricted fixed-node path-integral Monte Carlo – RPIMC) для моделирования UEG при конечной температуре. В RPIMC учитываются только положительные перестановки, поэтому точность результатов трудно количественно оценить [36].

Более интересными подходами являются методы permutation blocking path integral Monte Carlo (PB-PIMC) и configuration path integral Monte Carlo (CPIMC) [22]. Основная идея CPIMC состоит в представлении матрицы плотности в виде интеграла по траекториям в пространстве чисел заполнения. Однако оказывается, что метод CPIMC также подвержен “проблеме знаков”. В PB-PIMC сумма по перестановкам представлена в виде обменного детерминанта, который может быть вычислен прямыми методами линейной алгебры, что позволит частично преодолеть “проблему знаков”. Однако недостатком этого метода является то, что обменные детерминанты представляют собой знакопеременные функции, что ухудшает точность расчетов методом PIMC и порождает новую “проблему знаков детерминанта”.

В данной работе, чтобы избежать “проблемы знака детерминанта”, для сильно вырожденной фермионной системы разработано приближение, в котором обменный детерминант преобразован в детерминант Грама, не принимающий отрицательных значений. Чтобы повысить точность этого приближения и учесть интерференционные эффекты кулоновского и обменного взаимодействия электронов, разработано новое представление матрицы плотности в виде интегралов по траекториям, в котором взаимодействие включено в обменный детерминант. Для выполнения расчетов разработан новый метод (modified fermionic path integral Monte Carlo approach – MFPMIC), который позволяет в значительной степени избежать “проблемы знаков”. В работе исследуется квантовое упорядочение электронов в кулоновских системах в каноническом ансамбле при конечных температурах. Наблюдаемое упорядочение электронов вызвано эффектом исключенного объема обменных “дырок”, которые возникают за счет ферми-отталкивания и кулоновского взаимодействия электронов с этими положительно заряженными “дырками”. В результате формируются нейтральные обменно-корреляционные экситоны в “море ферми-электронов”, возможность образования которых рассматривалась в работах [37–39].

Концепция обменно-корреляционных “дырок” позволяет как построить интуитивно понятную физическую картину явления, так и получить количественные результаты для обменно-корреляци-

онной энергии. Более того, обменно-корреляционная “дырка” является одним из фундаментальных понятий теории функционала плотности [37–39].

Обменная “дырка” связана с пространственным локальным понижением электронной плотности, порожденным обменной корреляцией двух электронов с одинаковым спином. Обменная корреляция между двумя электронами вызвана обменным взаимодействием, возникающим вследствие антисимметризации волновой функции. Это реализует принцип Паули, который удерживает электроны с одинаковыми спинами на расстоянии порядка длины волны друг от друга. Возникающий “исключенный объем” приводит к образованию вокруг “дырки” сферической области повышенной концентрации электронов. В результате электроны в “море Ферми” могут быть окружены обменной дыркой с противоположным зарядом.

Понятие “обменная дырка” может быть уточнено путем добавления других корреляций, таких как экранирование. Экранировка обычно слабее обменного взаимодействия, тем не менее можно говорить об обменно-корреляционных “дырках” с эффективным зарядом. Обменная “дырка” может быть положительно заряжена, что нейтрализует заряд электрона на нескольких атомных расстояниях. Дополнительный электрон может присоединяться к обменной дырке, образуя нейтральный обменный экситон. Экранированное кулоновское взаимодействие между электронами и нейтральные обменные экситоны позволяют использовать модели слабо взаимодействующей ферми-жидкости в металлах, несмотря на высокую плотность электронов. Учет обменно-корреляционных экситонов важен для построения аналитических и численных моделей теории функционала плотности [37–39]. Данный эффект не возникает для электронов с противоположным спином и симметричной волновой функцией.

В выполненных MFPMIC-расчетах появление обменно-корреляционных экситонов подтверждается парными функциями распределения для двухкомпонентной плазмы и однородного электронного газа. В дальнейшем для анализа трехчастичных корреляций, связанных с экранировкой и обменными экситонами, рассматриваются парные функции распределения для электронов с параллельными и антипараллельными спинами, а также парные функции распределения для положительных зарядов и электронов. Анализ парных корреляций позволяет получить оценки плотностей заряда, средних расстояний и плотностей обменной “дырки” и электронов. Такой эффект никогда ранее не наблюдался при моделировании с использованием стандартного PIMC.

МНОГОЧАСТИЧНАЯ МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

Рассмотрим нейтральную систему квантовых электронов и положительных классических (для простоты) зарядов с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}^c$, содержащим кинетическую \hat{K} и кулоновскую $\hat{U}^c = \hat{U}_{pp}^c + \hat{U}_{ee}^c + U_{ep}$ энергии. Термодинамические свойства системы частиц в каноническом ансамбле с заданной температурой T и фиксированным объемом V полностью описываются оператором плотности $\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{H}}$ со статистической суммой $Z(N_e, N_p, V; \beta) = \frac{1}{N_e! N_p!} \sum_{\sigma} \int_V dx \rho(x, \sigma; \beta)$, где $\beta = 1/k_B T$ и $\rho(x, \sigma; \beta) = \langle x | e^{-\epsilon\hat{H}} | x \rangle$ обозначает диагональные элементы матрицы плотности в координатном представлении.

Здесь $x = \{x_e, x_p\}$ (отнесенные к тепловой длине волны $\tilde{\lambda}_a = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m_a M}}$) – пространственные координаты электронов и положительных зарядов, т.е. $x_a = \{x_{1,a}, \dots, x_{N_a,a}\}$ и $\sigma = \{\sigma_{1,e}, \dots, \sigma_{N_e,e}\}$ – спиновые степени свободы электронов.

Как правило, точные матричные элементы матрицы плотности неидеальных квантовых систем частиц неизвестны, но могут быть получены с помощью интегралов по траекториям, которые основаны на операторном тождестве $e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\epsilon\hat{H}} \cdot e^{-\epsilon\hat{H}} \dots e^{-\epsilon\hat{H}}$ ($\epsilon = \beta/M$) [8]. Тождество включает M одинаковых высокотемпературных матриц плотности с температурой MT :

$$\begin{aligned} \rho(x, \sigma; x, \sigma; \beta) &= \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle \approx \\ &\approx \sum_{\sigma} \sum_P (-1)^{K_P} \mathcal{S}(\sigma, \hat{P}\sigma) \prod_{m=0}^M e^{-\epsilon U_m} \langle x | e^{-\epsilon\hat{K}} | \hat{P}x \rangle = \\ &= \int dx^{(1)} \dots dx^{(M-1)} \exp \left\{ - \sum_{m=0}^{M-1} \left[\pi |x^{(m)} - x^{(m+1)}|^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \epsilon U(x^{(m)}) \right] \right\} \det \|\Psi(x)\|, \end{aligned} \quad (1)$$

где индекс $m = 0, \dots, M$ маркирует недиагональные матричные элементы высокотемпературных матриц плотности. Здесь каждый высокотемпературный сомножитель представлен в виде $\langle x^{(m)} | e^{-\epsilon\hat{H}} | x^{(m+1)} \rangle \approx \langle x^{(m)} | e^{-\epsilon\hat{U}_m} | x^{(m+1)} \rangle \rho_0^{(m)}$, ($\rho_0^{(m)} = \langle x^{(m)} | e^{-\epsilon\hat{K}} | x^{(m+1)} \rangle = e^{-\pi |x^{(m)} - x^{(m+1)}|^2}$) – матрица плотности идеальной системы частиц с ошибкой порядка $1/M^2$, возникающей из-за пренебрежения коммутатором $\epsilon^2/2 [K, U^c]$. В пределе $M \rightarrow \infty$ погрешность всего

произведения стремится к нулю ($\propto 1/M$), и возникает точное представление статистической суммы через интеграл по траекториям. Теперь каждая частица представлена траекторией, состоящей из набора M координат $x^{(m)}$. Спин порождает спиновую часть матрицы плотности (\mathcal{S}) с обменными эффектами, которые учитываются благодаря операторам перестановки \hat{P} , действующим на координаты электрона в $x^{(M)}$ и проекции спина σ . Суммирование ведется по всем перестановкам с четностью K_P . Предполагается, что в термодинамическом пределе основной вклад в сумму по спиновым переменным дает член с равным количеством $(N_e/2)$ электронов с одинаковой проекцией спина [40, 41], поэтому $\det \|\Psi(x)\| =$

$$\det \left\| e^{-\pi |x_{k,e}^{(M)} - x_{l,e}^{(0)}|^2} \right\|_1^{N_e/2} \times \det \left\| e^{-\pi |x_{k,e}^{(M)} - x_{l,e}^{(0)}|^2} \right\|_1^{N_e/2}.$$

Элементы матрицы плотности включают эффективное парное взаимодействие $U = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \Phi_{kl}$, которое аппроксимируется потенциалом Кельбга, задаваемым выражением: $\Phi_{ab}(x_{ab}; \epsilon) = \frac{e_a e_b}{\tilde{\lambda}_{ab} x_{ab}} \times [1 - e^{-x_{ab}^2} + \sqrt{\pi} x_{ab} \{1 - \text{erf}(x_{ab})\}]$.

Здесь $\tilde{\lambda}_{ab} x_{ab} = |q_{k,a} - q_{l,b}| \tilde{\lambda}_e$, $\tilde{\lambda}_{ab}^2 = 2\pi\hbar^2 \epsilon / m_{ab}$, $\tilde{\lambda}_{ab}^2 = 2\pi\hbar^2 \epsilon / m_{ab}$, $1/m_{ab} = 1/m_a + 1/m_b$, $1/m_{ab} = 1/m_a + 1/m_b$, $\tilde{\lambda}_e^2 = 2\pi\hbar^2 \epsilon / m_e$, $\text{erf}(x)$ – стандартная функция ошибок. При $x_{ab} \geq \lambda_e$ потенциал Кельбга совпадает с кулоновским, а при $x_{ab} \rightarrow 0$ конечен в силу своей квантовой природы [40].

НОВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Недостатком уравнения (1) является знакпеременный детерминант $\det \|\Psi(x)\|$, который порождает “проблему знаков”, экспоненциально ухудшающую точность расчетов с помощью РИМС. Далее для простоты рассмотрим бесспиновые фермионы. Обобщение для фермионов со спиновой степенью свободы тривиально. Чтобы избежать “проблемы знаков”, заменим переменные интегрирования $x^{(m)}$ на $q^{(m)}$: $x^{(m)} = (Px - x) \frac{m}{M} + x + q^{(m)}$ для любой конкретной перестановки P в стандартном представлении матрицы плотности через интеграл по траекториям (1) [8, 11, 42]:

Таблица 1. Исходная матрица парного потенциала для P_c

0	$\tilde{\Phi}_{12}$	$\star\tilde{\Phi}_{13}$	$\tilde{\Phi}_{14}$	$\star\tilde{\Phi}_{15}$	$\tilde{\Phi}_{16}$	$\tilde{\Phi}_{17}$	$\tilde{\Phi}_{18}$	$\tilde{\Phi}_{19}$
$\tilde{\Phi}_{21}$	0	$\tilde{\Phi}_{23}$	$\tilde{\Phi}_{24}$	$\tilde{\Phi}_{25}$	Φ_{26}	$\tilde{\Phi}_{27}$	Φ_{28}	Φ_{29}
$\star\tilde{\Phi}_{31}$	$\tilde{\Phi}_{32}$	0	$\tilde{\Phi}_{34}$	$\star\tilde{\Phi}_{35}$	$\tilde{\Phi}_{36}$	$\tilde{\Phi}_{37}$	$\tilde{\Phi}_{38}$	$\tilde{\Phi}_{39}$
$\tilde{\Phi}_{41}$	$\tilde{\Phi}_{42}$	$\tilde{\Phi}_{43}$	0	$\tilde{\Phi}_{45}$	$\tilde{\Phi}_{46}$	$\star\tilde{\Phi}_{47}$	$\tilde{\Phi}_{48}$	$\tilde{\Phi}_{49}$
$\star\tilde{\Phi}_{51}$	$\tilde{\Phi}_{52}$	$\star\tilde{\Phi}_{53}$	$\tilde{\Phi}_{54}$	0	$\tilde{\Phi}_{56}$	$\tilde{\Phi}_{57}$	$\tilde{\Phi}_{58}$	$\tilde{\Phi}_{59}$
$\tilde{\Phi}_{61}$	Φ_{62}	$\tilde{\Phi}_{63}$	$\tilde{\Phi}_{64}$	$\tilde{\Phi}_{65}$	0	$\tilde{\Phi}_{67}$	Φ_{68}	Φ_{69}
$\tilde{\Phi}_{71}$	$\tilde{\Phi}_{72}$	$\tilde{\Phi}_{73}$	$\star\tilde{\Phi}_{74}$	$\tilde{\Phi}_{75}$	$\tilde{\Phi}_{76}$	0	$\tilde{\Phi}_{78}$	$\tilde{\Phi}_{79}$
$\tilde{\Phi}_{81}$	Φ_{82}	$\tilde{\Phi}_{83}$	$\tilde{\Phi}_{84}$	$\tilde{\Phi}_{85}$	Φ_{86}	$\tilde{\Phi}_{87}$	0	Φ_{89}
$\tilde{\Phi}_{91}$	Φ_{92}	$\tilde{\Phi}_{93}$	$\tilde{\Phi}_{94}$	$\tilde{\Phi}_{95}$	Φ_{96}	$\tilde{\Phi}_{97}$	Φ_{89}	0

$$\begin{aligned} \rho(x, \sigma; x, \sigma; \beta) &\equiv \int dq^{(1)} \dots dq^{(M-1)} \times \\ &\times \exp \left[- \sum_{m=0}^{M-1} \epsilon U(x + q^{(m)}) \right] \times \\ &\times \left\{ \sum_{\sigma} \sum_P (\pm 1)^{k_P} \mathcal{S}(\sigma, \hat{P}\sigma) \exp \left[- \pi \frac{|Px - x|^2}{M} - \right. \right. \\ &\left. \left. - \sum_{m=0}^{M-1} \left[\pi |\eta^{(m)}|^2 + \epsilon U \left((Px - x) \frac{m}{M} + x + q^{(m)} \right) - \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. - \epsilon U(x + q^{(m)}) \right] \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\eta^{(m)} \equiv q^{(m)} - q^{(m+1)}$.

Из выражения для потенциальной энергии $\epsilon U \left((Px - x) \frac{m}{M} + x + q^{(m)} \right)$ в уравнении (2) следует, что к каждой координате вектора x_k может быть добавлено слагаемое $(x_{Pk} - x_k) \frac{2m}{M}$, если $Pk \neq k$. Парные потенциалы в U для $Pk = k$ и $Pt = t$ обозначим далее символами $\Phi_{kt} = \Phi(|r_{kt} + q_{kt}^{(m)}|)$, в противном случае используется обозначение $\tilde{\Phi}_{kt} = \Phi \left(\left| r_{ik} \frac{2m}{M} + r_{kt} + q_{kt}^{(m)} \right| \right)$. Разность матричных элементов $\Delta \tilde{\Phi}_{kt} = \tilde{\Phi}_{kt} - \Phi_{kt}$ не равна нулю, только если перестановка изменяет число k или/и t ($Pk \neq k$ или/и $Pt \neq t$). Таким образом, ненулевые элементы $\Delta \tilde{\Phi}_{kt}$ любой данной перестановки P образуют строки и столбцы с соответствующими номерами k и t .

В сумме по перестановкам в уравнении (2) каждая перестановка P состоит из композиции циклических перестановок без общих компонентов [43], поэтому без ограничения общности можно рассматривать только циклические перестановки. В свою очередь, циклическую перестановку можно

представить как композицию парных циклических перестановок (k, t) [43].

Рассмотрим приближение, позволяющее ослабить “проблему знаков” и использовать преимущества прямых методов линейной алгебры для вычисления детерминантов, описывающих обменное взаимодействие. Поясним с помощью таблицы парных потенциалов взаимодействия используемое приближение на примере простой перестановки, состоящей из двух нетривиальных циклических перестановок и четырех тождественных циклов $P_c = (1, 3, 5), (4, 7), (2, 2), (6, 6), (8, 8), (9, 9)$ для девяти электронов. В табл. 1 заменим парные потенциалы $\tilde{\Phi}_{kt}$ на Φ_{kt} в строке k и столбце t , кроме общего элемента на их пересечении, который пометим звездочкой $\star\tilde{\Phi}_{kt}$. Тогда в табл. 2 в строке k и столбце t все матричные элементы $\Delta \tilde{\Phi}_{kt} = \tilde{\Phi}_{kt} - \Phi_{kt}$ равны нулю, кроме $\star\Delta \tilde{\Phi}_{kt}$.

В результате этого приближения в уравнении (2) для P_c имеем

$$\exp \left[- \pi \frac{|P_c x - x|^2}{M} - \Delta U_{P_c} \right] \approx \phi_{13}^* \phi_{35}^* \phi_{51}^* \phi_{47}^* \phi_{74}^*,$$

где $\phi_{kt}^* = \exp \{ - \pi |r_{kt}|^2 / M \} \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{M-1} (\epsilon \star \Delta \tilde{\Phi}_{kt}) \right\}$ и

$\phi_{kk}^* = 1$. (Произведение $\phi_{31}^* \phi_{15}^* \phi_{53}^*$ будет учтено симметричным циклом, как в матрице 3×3 .)

Благодаря этому приближению частицы любого заданного цикла взаимодействуют с остальными частицами с помощью парного потенциала Φ_{kt} вместо $\tilde{\Phi}_{kt}$, а частицы, входящие в циклическую перестановку, последовательно взаимодействуют с помощью потенциала $\tilde{\Phi}_{kt}$. В табл. 3 приведены парные межчастичные потенциалы для полученного приближения.

Сумма по всем перестановкам сворачивается в детерминант, и в результате проведенных преобра-

Таблица 2. Аппроксимация матрицы парных разностей потенциалов для P_c

0	0	$\star\Delta\tilde{\Phi}_{13}$	0	$\star\Delta\tilde{\Phi}_{15}$	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\star\Delta\tilde{\Phi}_{31}$	0	0	0	$\star\Delta\tilde{\Phi}_{35}$	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	$\star\Delta\tilde{\Phi}_{47}$	0	0
$\star\Delta\tilde{\Phi}_{51}$	0	$\star\Delta\tilde{\Phi}_{53}$	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	$\star\Delta\tilde{\Phi}_{74}$	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0

Таблица 3. Итоговая матрица парных потенциалов Φ_{kt} и $\star\tilde{\Phi}_{kt}$ для P_c

0	Φ_{12}	$\star\tilde{\Phi}_{13}$	Φ_{14}	Φ_{15}	Φ_{16}	Φ_{17}	Φ_{18}	Φ_{19}
Φ_{21}	0	Φ_{23}	Φ_{24}	Φ_{25}	Φ_{26}	Φ_{27}	Φ_{28}	Φ_{29}
Φ_{31}	Φ_{32}	0	Φ_{34}	$\star\tilde{\Phi}_{35}$	Φ_{36}	Φ_{37}	Φ_{38}	Φ_{39}
Φ_{41}	Φ_{42}	Φ_{43}	0	Φ_{45}	Φ_{46}	$\star\tilde{\Phi}_{47}$	Φ_{48}	Φ_{49}
$\star\tilde{\Phi}_{51}$	Φ_{52}	Φ_{53}	Φ_{54}	0	Φ_{56}	Φ_{57}	Φ_{58}	Φ_{59}
Φ_{61}	Φ_{62}	Φ_{63}	Φ_{64}	Φ_{65}	0	Φ_{67}	Φ_{68}	Φ_{69}
Φ_{71}	Φ_{72}	Φ_{73}	$\star\tilde{\Phi}_{74}$	Φ_{75}	Φ_{76}	0	Φ_{78}	Φ_{79}
Φ_{81}	Φ_{82}	Φ_{83}	Φ_{84}	Φ_{85}	Φ_{86}	Φ_{87}	0	Φ_{89}
Φ_{91}	Φ_{92}	Φ_{93}	Φ_{94}	Φ_{95}	Φ_{96}	Φ_{97}	Φ_{98}	0

зований диагональные матричные элементы матрицы плотности можно переписать в виде интеграла по “замкнутым” траекториям $\{q^{(0)}, \dots, q^{(M)}\}$:

$$\begin{aligned} \rho(x, \sigma; x, \sigma; \beta) &\equiv \int dq^{(1)} \dots dq^{(M-1)} \times \\ &\times \exp \left[- \sum_{m=0}^{M-1} \epsilon U(x + q^{(m)}) \right] \times \\ &\times \left\{ \sum_{\sigma} \sum_P (\pm 1)^K \mathcal{G}(\sigma, \hat{P}\sigma) \exp \left[- \pi \frac{|Px - x|^2}{M} - \right. \right. \\ &- \sum_{m=0}^{M-1} \left[\pi |\eta^{(m)}|^2 + \epsilon U \left((Px - x) \frac{m}{M} + x + q^{(m)} \right) - \right. \\ &\left. \left. \left. - \epsilon U(x + q^{(m)}) \right] \right] \right\} \approx \int dq^{(1)} \dots dq^{(M-1)} \times \\ &\times \exp \left\{ - \sum_{m=0}^{M-1} \left[\pi |\eta^{(m)}|^2 + \epsilon U(x + q^{(m)}) \right] \right\} \det \|\psi(x)\|, \end{aligned} \tag{3}$$

где $\det \|\psi(x)\| = \det \|\phi_{kt}\|_1^{N_e/2} \|\det \phi_{kt}\|_{N_e/2}^{N_e}$, $q^{(0)} = q^{(M)} = 0$,

$$\begin{aligned} \phi_{kt} &= \exp \left\{ - \pi |r_{kt}|^2 / M \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{M-1} \left(\epsilon \Phi \left(r_{ik} \frac{2m}{M} + r_{kt} + q_{kt}^{(m)} \right) - \right. \right. \\ &\left. \left. - \epsilon \Phi \left(r_{kt} + q_{kt}^{(m)} \right) \right) \right\}, \end{aligned} \tag{4}$$

а $r_{kt} \equiv (x_k - x_t)(k, t = 1, \dots, N_e)$.

При возмущении потенциальной энергии (Φ_{kt} вместо $\tilde{\Phi}_{kt}$) изменение соответствующей свободной энергии имеет порядок $n_e \lambda_e^3 / 2 \int_V dr_{12} \int dq_{12}^{(1)}, \dots, dq_{12}^{(M-1)} g_{ee}(r_{12}, q_{12}^{(1)} \dots q_{12}^{(M-1)}) (\exp(-\sum_{m=0}^{M-1} \epsilon \Delta \tilde{\Phi}_{12}) - 1) \sim \sim n_e \lambda_e^3 / 2 g_{ee}((n_e \lambda_e^3)^{-1/3}) (-\beta \Delta \tilde{\Phi}((n_e \lambda_e^3)^{-1/3})) \sim n_e \lambda_e^3 / 2 g_{ee} \times \times ((n_e \lambda_e^3)^{-1/3}) (\beta e^2 / \lambda_e)$ и им можно пренебречь для не-больших $\Delta \tilde{\Phi}$ и $n_e \lambda_e^3 \lesssim 1$. Здесь $\beta e^2 / \lambda_e = \sqrt{\beta R y} / \pi$ и g_{ee} — парная функция распределения электронов. Эта оценка может быть получена в рамках обобщения техники разложения Майера для неидеальных

систем частиц с помощью алгебраического подхода, развитого в [44, 45].

Приближение (3) воспроизводит оба предела сильно вырожденной и невырожденной систем фермионов. В классическом пределе из-за множителя $\exp[-\pi|Px - x|^2/M]$ основной вклад вносит тождественная перестановка, и разности потенциальных энергий в экспоненте уравнения (3) равны нулю. В то же время для сильно вырожденной плазмы, где тепловая длина волны частицы больше среднего межчастичного расстояния и траектории сильно запутаны, потенциальная энергия в уравнении (3) слабо зависит от перестановки, что позволяет заменить все перестановки P на тождественную E , как в [33, 34, 40, 41].

При промежуточных вырождениях детерминант в уравнении (3) учитывает интерференционные эффекты кулоновского и обменного взаимодействия электронов, а также позволяет снизить влияние “проблемы знаков” за счет использования прямых методов вычисления определителей. Заметим, что при умеренном вырождении ($n_e \lambda_e^3 \lesssim 1$) из-за ферми-отталкивания основной вклад в обменный детерминант дают парные перестановки [33, 34]. Следует подчеркнуть, что элементы обменной матрицы ϕ_{kt} и приближенная матрица плотности (3) совпадают с точными аналогичными функциями для двух фермионов:

$$\begin{aligned} \rho(x_1, x_2) &\equiv \int dq^{(1)} \dots dq^{(M-1)} \times \\ &\times \left\{ \exp \left[-\sum_{m=0}^{M-1} \left[\pi |\eta^{(m)}|^2 + \epsilon \Phi(|r_{12} + q_{12}^{(m)}|) \right] \right] - \right. \\ &\quad - \exp \left[-\pi \frac{|r_{12}|^2}{M} - \pi \frac{|r_{21}|^2}{M} - \sum_{m=0}^{M-1} \times \right. \\ &\quad \times \left[\pi |\eta^{(m)}|^2 + \frac{\epsilon}{2} \Phi \left(|r_{21} \frac{2m}{M} + r_{12} + q_{12}^{(m)}| \right) + \right. \\ &\quad \left. \left. + \left[\frac{\epsilon}{2} \Phi \left(|r_{12} \frac{2m}{M} + r_{21} + q_{21}^{(m)}| \right) \right] \right] \right] \Big\} \equiv \\ &\equiv \int dq^{(1)} \dots dq^{(M-1)} \exp \left\{ -\sum_{m=0}^{M-1} \pi |\eta^{(m)}|^2 \right\} \times \\ &\times \left\{ \exp \left\{ -\sum_{m=0}^{M-1} \epsilon \Phi(r_{12} + q_{12}^{(m)}) \right\} - \exp \left\{ -\frac{\pi}{M} 2r_{12}^2 \right\} \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ -\sum_{m=0}^{M-1} \epsilon \Phi \left[r_{12} (1 - 2m/M) + q_{12}^{(m)} \right] \right\}, \end{aligned} \tag{5}$$

где $q_{12}^{(m)} = q_1^{(m)} - q_2^{(m)}$, $\det \|\psi(x)\| = 1 - \phi_{12}\phi_{21}$.

Более того, для произвольного числа фермионов в условиях преобладания парного обменного взаимодействия ($n_e \lambda_e^3 \lesssim 1$) разложение Лапласа обменного детерминанта по минорам и парным обменным блокам показывает, что обменный детерми-

нант в уравнении (3) стремится к произведению соответствующих точных двухфермионных детерминантов $\prod (1 - \phi_{kt}\phi_{tk})$, см. уравнение (5). Это подтверждает надежность приближения матрицы плотности (3) и позволяет проводить уверенные расчеты термодинамических величин.

Рассмотрим особенности поведения обменного детерминанта для $N_e = 2$ и $M = 2$ на малых межчастичных расстояниях. Основной вклад в разность потенциальной энергии двух одинаковых частиц определяется первым дифференциалом в ϕ_{kt} . После сокращения подобных членов имеем

$$\begin{aligned} &\Phi(|\tilde{r}_{12} + (r_{12} + q_{12}^{(1)})|) - \Phi(|(r_{12} + q_{12}^{(1)})|) \approx \\ &\approx \langle \nabla \Phi(|(r_{12} + q_{12}^{(1)})|) \tilde{r}_{12} \rangle = \\ &= |\nabla \Phi(|(r_{12} + q_{12}^{(1)})|) \cdot \tilde{r}_{12}| \cos \theta_1, \\ &\Phi(|\tilde{r}_{21} + (r_{21} + q_{21}^{(1)})|) - \Phi(|(r_{21} + q_{21}^{(1)})|) \approx \\ &\approx \langle \nabla \Phi(|(r_{21} + q_{21}^{(1)})|) \tilde{r}_{21} \rangle = \\ &= |\nabla \Phi(|(r_{21} + q_{21}^{(1)})|) \cdot \tilde{r}_{21}| \cos \theta_2. \end{aligned}$$

Здесь угловые скобки $\langle \rangle$ обозначают скалярное произведение двух векторов. Из-за косинуса угла между векторами $\tilde{r}_{kt} = r_{kt}$ и $\nabla \Phi(|(r_{kt} + q_{kt}^{(1)})|)$ определитель является осциллирующей функцией и можно ожидать осцилляций в поведении парных функций распределения на малых межчастичных расстояниях. Для больших межчастичных расстояний $|r_{kt}|$ потенциал взаимодействия приближается к нулю и детерминант является монотонной функцией.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В двухкомпонентной плазме (two component plasma – TCP) все заряды из-за взаимодействия коррелированы, в то время как в модели UEG положительные частицы должны быть некоррелированными, чтобы моделировать нейтрализующий фон [42, 46]. Далее плотность электронов характеризуется параметром Бракнера $r_s = a/a_B$, где $a = [3/(4\pi n_e)]^{1/3}$, n_e – плотность электронов, а a_B – радиус Бора. В проведенных расчетах методом MFPIMC использовался алгоритм Метрополиса [11, 40]. Для проверки сходимости расчетов варьировалось максимально доступное число частиц (в диапазоне $N_e = 30, \dots, 50$) и количество высокотемпературных множителей (в диапазоне $M = 20-30$). Для анализа влияния межчастичного взаимодействия в обменной матрице проведение сравнение внутренней энергии и парных функций распределения (pair distribution functions – PDF) для матрицы $\|\phi_{kt}\|$ (4) (далее используется обозначение A1) и приближения $\tilde{\phi}_{kt} \approx e^{-\pi|x_k - x_t|^2}$ (да-

лее называется A2), которое часто используется в литературе.

ПАРНЫЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Начнем с физического анализа пространственного расположения электронов и положительных частиц. Парные функции распределения $g_{ab}(R)$ определяются как

$$g_{ab}(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|) = \left(\frac{V}{N}\right)^2 \sum_{\sigma} \sum_{i,j,i \neq j} \delta_{a_i,a} \delta_{a_j,b} \times \\ \times \frac{1}{Z} \int d\mathbf{r} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_j) \rho(x, \sigma; \beta),$$

где a и b – типы кулоновских частиц ($a = e, p$; $b = e, p$). PDF зависит только от разности координат частиц $r = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$ из-за трансляционной инвариантности системы.

На рис. 1 приведены PDF для UEG и TSP при $r_s = 2$ и $T = 12Ry$. В не взаимодействующей классической системе зарядов $g_{ep}(R) = g_{pp} \equiv 1$, тогда как межчастичные взаимодействия и квантовая статистика приводят к перераспределению частиц (см. линии 1–4 на рис. 1). Для TSP кулоновское притяжение приводит к возрастанию $g_{ep}(r)$ на малых расстояниях, в то время как кулоновское отталкивание, наоборот, уменьшает $g_{pp}(r)$. Благодаря экранировке обе функции на больших расстояниях стремятся к единице. В UEG жесткий нейтрализующий фон моделируется как идеальный газ некоррелированных классических положительных зарядов, равномерно распределенных в пространстве, поэтому g_{pp} и g_{ep} тождественно равны единице, что демонстрируют линии 3 и 4 на рис. 1а. Для TSP линии 1 и 2 демонстрируют g_{ee} , рассчитанные согласно (3) для матрицы $\|\phi_{kt}\|$ (A1), в то время как линии 3 и 4 представляют g_{ee} , соответствующие приближению $\|\tilde{\phi}_{kt}\|$ (A2).

Отметим различие в поведении g_{ee} , полученных для расчетов в случае A1 и его приближения A2. В отличие от приближения A2, выражение A1 более точно учитывает кулоновское и ферми-отталкивания электронов, что и приводит к появлению пика на PDF g_{ee} , который отсутствует в расчетах A2 (ср. линии 1 и 3 на рис. 1). PDF g_{ee} в случае A2 (линии 3) ведет себя стандартным известным в литературе образом.

Для электронов с антипараллельными спинами для расчетов в случаях A1 и A2 этот эффект отсутствует (линии 2 и 4 на рис. 1б) и поведение PDF определяется эффективным потенциалом Кельбга, не имеющим кулоновской особенности в нуле за счет учета квантовых эффектов, в частности учета туннелирования на расстояниях порядка тепловой длины волны электрона. Есте-

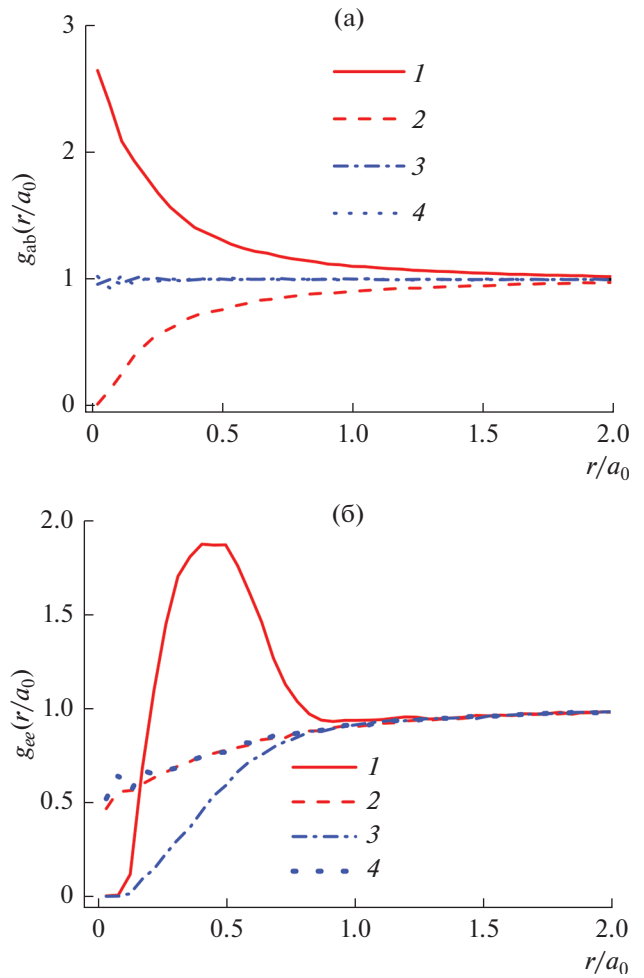


Рис. 1. Парные функции распределения для $r_s = 2$ и $T = 12Ry$: (а) 1 – g_{ep} (TSP), 2 – g_{pp} (TSP), 3 – g_{ep} (UEG), 4 – g_{pp} (UEG); (б) – g_{ee} (TSP): 1 – параллельные спины A1, 2 – антипараллельные спины A1, 3 – параллельные спины A2, 4 – антипараллельные спины A2; тепловая волна электрона $\lambda_e \approx 1a_0$.

ственно, что линии 2 и 4 практически совпадают. Небольшие колебания PDF вызваны статистической ошибкой метода Монте-Карло.

Рассмотрим физические причины и особенности поведения g_{ee} на расстояниях порядка тепловой длины волны электрона (рис. 1б), которые возникают за счет интерференционных эффектов кулоновского и обменного взаимодействий электронов, учтенных в детерминанте в уравнении (3). Наблюдаемое в расчетах MFPIMC упорядочение электронов в кулоновских системах вызвано эффектом исключенного объема обменных “дырок”, которые возникают за счет ферми-отталкивания и кулоновского взаимодействия электронов. Сопоставление PDF g_{ee} и g_{ep} позволяет сделать вывод о формировании на расстояниях порядка длины

волны электрона компактных трехчастичных комплексов, состоящих из двух электронов и положительно заряженной частицы. В результате в “дырке” в среднем на малых расстояниях от электрона может преобладать положительный заряд, который за счет присутствия второго электрона будет скомпенсирован при увеличении этого расстояния до длины волны электрона. Для проверки этого утверждения рассмотрим относительные вероятности найти две частицы сорта a и b на расстоянии r друг от друга. Эти вероятности, пропорциональные $r^2 g_{ab}(r)$, показаны на рис. 2 в логарифмическом масштабе для $T = 12\text{Ry}$ и $T = 6\text{Ry}$ ($r_s = 2$). Оценить заряд такого комплекса можно с помощью интегралов от относительных вероятностей нахождения двух частиц сорта a и b на расстоянии r друг от друга ($\sim r^2 g_{ab}(r)$) по формуле

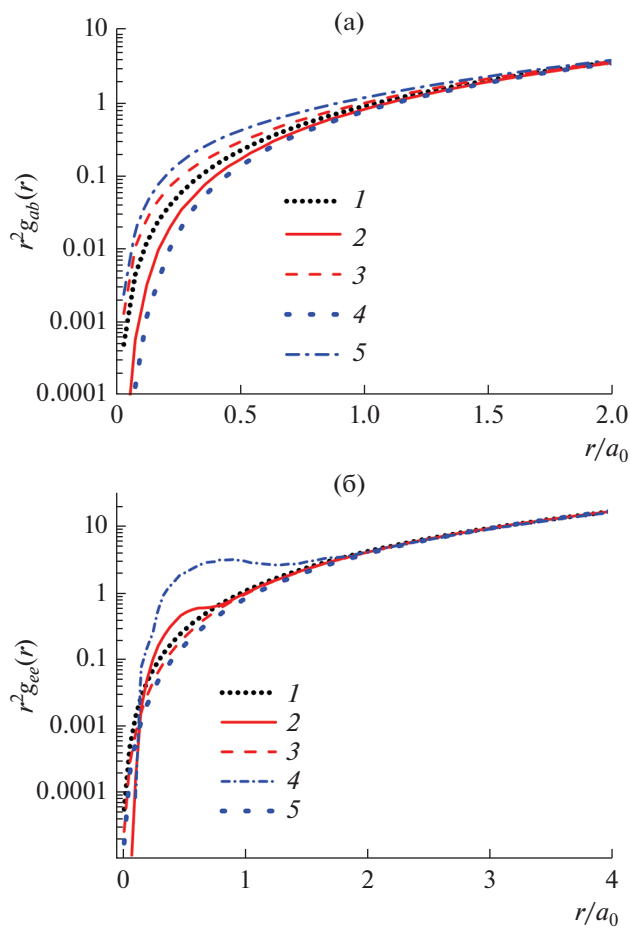


Рис. 2. Относительные вероятности нахождения двух частиц сорта a и b на расстоянии r друг от друга ($r^2 g_{ab}(r)$) для $T = 6\text{Ry}$ и $T = 12\text{Ry}$ (ТСП): (а) 1 – идеальные частицы; 2, 3 – $E = 12\text{Ry}$; 4, 5 – $E = 6\text{Ry}$; (б) – $r^2 g_{ee}$: 1 – идеальные частицы; 2, 3 – параллельные спины; 4, 5 – антипараллельные спины.

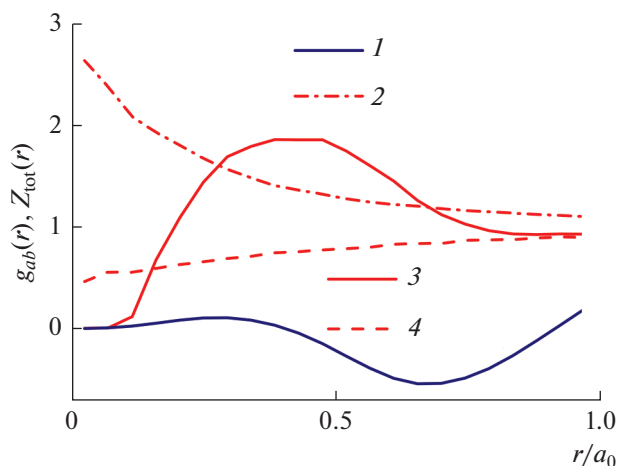


Рис. 3. Распределение суммарного заряда в нейтральном экситоне при $T/\text{Ry} = 12$ (условные единицы), ТСП: 1 – Z_{tot} ; 2 – g_{ep} ; 3 – g_{ee} , параллельные спины; 4 – g_{ee} , антипараллельные спины; тепловая волна электрона: $\lambda_e \approx 1a_0$ при $T/\text{Ry} = 12$ и $\lambda_e \approx 1.4a_0$ при $T/\text{Ry} = 6$.

$Z_{\text{tot}}(\tilde{r}) \sim \int_0^{\tilde{r}} 4\pi r^2 (g_{ep}(r) - g_{ee}(r)) dr$ при $\tilde{r} \sim \lambda_e$. На рис. 2 линиями 1–4 показаны относительные вероятности для одноименно и разноименно заряженных частиц. Поведение линии 1 на рис. 3 позволяет понять распределение суммарного заряда в трехчастичном комплексе и подтверждает его электронейтральность, так как полный осредненный заряд “дырки”, создаваемой парой электронов и присутствием в ней положительно заряженной частицы, стремится к нулю при $\tilde{r} \rightarrow \lambda_e$. Это согласуется с теоретическим результатом, согласно которому заряд “обменной дырки” вокруг электрона равен по модулю и противоположен по знаку заряду электрона [47]. Таким образом, наблюдаемое в расчетах МFPИМС упорядочение электронов связано с формированием квазинейтральных обменно-корреляционных экситонов в “море ферми-электронов”. Возникновение нейтральных обменно-корреляционных экситонов обсуждалось в [37–39], где в качестве причины этого явления также рассматривался эффект исключенного объема [48] и взаимодействие электронов с положительно заряженной обменно-корреляционной дыркой, появляющейся благодаря ферми-отталкиванию электронов на расстояниях порядка длины волны.

Сопоставление рассчитанных по МFPИМС относительных вероятностей нахождения двух частиц сорта a и b на расстоянии r друг от друга для ТСП и UEG при температуре $T = 6\text{Ry}$ проведено на рис. 4. Необходимо отметить очень хорошее совпадение рассчитанных вероятностей для системы электронов с одинаковым и противоположным спинами,

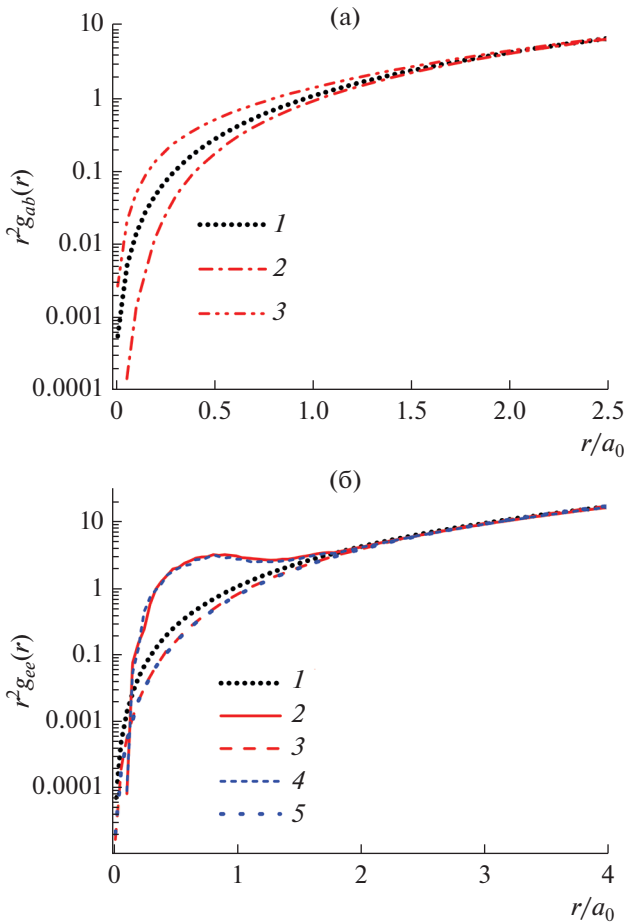


Рис. 4. Относительные вероятности нахождения двух частиц сорта a и b на расстоянии r друг от друга ($r^2 g_{ee}(r)$) для $T = 6Ry$ (ТСР и UEG): (а) 1 – g_{pp} , g_{ep} (UEG); 2 – g_{pp} (ТСР); 3 – g_{ep} (ТСР); (б) – g_{ee} , 1 – идеальные частицы, 2 – параллельные спины (ТСР), 3 – антипараллельные спины (ТСР), 4 – параллельные спины (UEG), 5 – антипараллельные спины (UEG); тепловая волна электрона: $\lambda_e \approx 1.4a_0$ при $T/Ry = 6$.

несмотря на абсолютно различный характер положительных зарядов, нейтрализующих кулоновскую систему частиц, и соответствующих парных функций распределения.

ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ

Расчет внутренней энергии производился с помощью выведенного ранее выражения [42, 46]. При $r_s = 2$ и $T/Ry = 6$ имеем следующие результаты для внутренней энергии согласно формуле (3) с выражением A1 для ψ :

$$\text{энергия ТСР } E_{\text{tcp}}/(k_B T) = 1.419,$$

$$\text{UEG } E_{\text{ueg}}/(k_B T) = 1.356.$$

Для внутренней энергии, рассчитанной по формуле (3) с приближением A2 для ψ , получено:

$$E_{\text{tcp}}/(k_B T) = 1.349,$$

$$E_{\text{ueg}}/(k_B T) = 1.256.$$

Внутренняя энергия для ТСР и UEG оказывается ниже для обменной матрицы ψ в приближении A2 по сравнению с A1. Это связано с тем, что PDF для выражения A1 выше, чем в приближении A2.

Разница заметная, но не очень большая для интегральных термодинамических характеристик, поскольку произведение $r^2 g_{ab}(r)$ уменьшает удельные вклады в интегралы на малых межчастичных расстояниях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приближение A2 справедливо для сильно вырожденной системы. В этом случае определитель $\psi(x)$ эквивалентен определителю Грама [43] $\det \|\langle \chi(x_i) | \chi(x_k) \rangle\|$ для линейно независимой системы векторов $N_e |\chi_p(x_k)\rangle = |e^{i\langle p|x_k\rangle/\hbar}\rangle$ со скалярным произведением $\langle \chi(x_i) | \chi(x_k) \rangle = \int dp e^{i\langle p|x_k - x_i\rangle/\hbar} \times \times e^{-\beta p^2/2m} / \int dp e^{-\beta p^2/2m} = e^{-\pi |r_{ki}|^2 / \lambda_e^2}$. Определитель Грама всегда неотрицателен [43] и позволяет решить “проблему знака” в PIMC-моделировании фермионов в данном приближении.

Для сравнения рассмотрим аналогичный матричный элемент $e^{-\pi |\chi_k^{(M)} - x_i^{(0)}|^2}$ в обменном детерминанте $\det \Psi(x)$ уравнения (1), который обычно используется в стандартном PIMC. Отметим, что матричные элементы в $\psi(x)$ имеют другую структуру по сравнению с матричными элементами в $\Psi(x)$, которые определяются аналогичным скалярным произведением, но для другого набора векторов $2N_e |e^{i\langle p|x_k^{(M)}\rangle/\hbar}\rangle$ и $|e^{i\langle p|x_k^{(0)}\rangle/\hbar}\rangle$. Обменный детерминант $\det \Psi(x)$ – знакопеременная функция, порождающая “проблему знака” в уравнении (1), что приводит к снижению точности расчетов PIMC.

Таким образом, модифицированный метод MF-PIMC демонстрирует квантовое упорядочение электронов на малых расстояниях, возникающее от кулоновского взаимодействия электронов с обменными “дырками”. Это явление известно в литературе [37, 38] и связано с образованием обменных экситонов, модифицирующих парные функции распределения.

Авторы признательны профессору М. Боницу за плодотворные обсуждения. Теоретический подход, вывод основных уравнений и алгоритмическая реализация метода MF-PIMC поддержаны Российским научным фондом (грант № 20-42-04421). Выражаем благодарность ЦКП “Суперкомпью-

терный центр ОИВТ РАН”, МСЦ РАН и ЦКП “Дальневосточный вычислительный ресурс” за предоставленное компьютерное время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kohn W., Sham L.J.* Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* 1965. V. 140. № 4A. A1133.
2. *Hohenberg P., Kohn W.* Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* 1964. V. 136. № 3B. B864.
3. *Vosko S.H., Wilk L., Nusair M.* Accurate Spin-dependent Electron Liquid Correlation Energies for Local Spin Density Calculations: A Critical Analysis // *Canadian J. Physics.* 1980. V. 58. № 8. P. 1200.
4. *Perdew J.P., Zunger A.* Self-interaction Correction to Density-functional Approximations for Many-electron Systems // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 23. № 10. P. 5048.
5. *Ceperley D.M., Alder B.J.* // *Phys. Rev. Lett.* 1980. V. 45. P. 566.
6. *Spink G., Needs R., Drummond N.* // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 88. P. 085121.
7. *Shepherd J.J., Booth G., Grüneis A., Alavi A.* // *Phys. Rev. B.* 2012. V. 85. 081103.
8. *Feynman R.P., Hibbs A.R., Styer D.F.* Quantum Mechanics and Path Integrals. Courier Corporation, 2010.
9. *Binder K., Ciccotti G.* Monte Carlo and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems. V. 49. Compositori, 1996.
10. *Ceperley D.M.* // *Rev. Modern Phys.* 1995. V. 67. P. 279.
11. *Zamalin V., Norman G., Filinov V.* The Monte Carlo Method in Statistical Thermodynamics. M.: Nauka, 1977.
12. *Filinov A., Filinov V., Lozovik Y.E., Bonitz M.* In: Introduction to Computational Methods for Many-body Physics. Princeton: Rinton Press, 2006.
13. *Egger R., Häusler W., Mak C., Grabert H.* // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 82. P. 3320.
14. *Filinov A., Bonitz M., Lozovik Y.E.* // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. P. 3851.
15. *Militzer B., Pollock E.* // *Phys. Rev. E.* 2000. V. 61. P. 3470.
16. *Militzer B.* // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. 175501.
17. *Filinov V., Bonitz M., Fortov V.* // *JETP Lett.* 2000. V. 72. P. 245.
18. *Karasiev V.V., Caldern L., Trickey S.* // *Phys. Rev. E.* 2016. V. 93. 063207.
19. *Ramakrishna K., Dornheim T., Vorberger J.* // *Phys. Rev. B.* 2020. V. 101. 195129.
20. *Karasiev V., Hu S., Zaghoo M., Boehly T.* // *Phys. Rev. B.* 2019. V. 99. 214110.
21. *Karasiev V.V., Sjostrom T., Dufty J., Trickey S.* // *Phys. Rev. Lett.* 2014. V. 112. 076403.
22. *Dornheim T., Groth S., Bonitz M.* // *Phys. Rep.* 2018. V. 744. P. 1.
23. *Perdew J.P., Burke K., Wang Y.* // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 16533.
24. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. P. 3865.
25. *Moroni S., Ceperley D.M., Senatore G.* // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 69. P. 1837.
26. *Moroni S., Ceperley D.M., Senatore G.* // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 75. P. 689.
27. *Sugiyama G., Bowen C., Alder B.* // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 46. 13042.
28. *Bowen C., Sugiyama G., Alder B.* // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. P. 14838.
29. *Corradini M., Del Sole R., Onida G., Palumbo M.* // *Phys. Rev. B.* 1998. V. 57. 14569.
30. *Ortiz G., Ballone P.* // *EPL (Europhys. Lett.).* 1993. V. 23. P. 7.
31. *Ortiz G., Ballone P.* // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. P. 1391.
32. *Ortiz G., Ballone P.* // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 56. P. 9970.
33. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* Pauli Blocking by Effective Pair Pseudopotential in Degenerate Fermi Systems of Particles // *Contrib. Plasma Phys.* 2017. V. 57. № 10. P. 506.
34. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* Peculiarities of the Momentum Distribution Functions of Strongly Correlated Charged Fermions // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. V. 51. P. 035002.
35. *Brown E.W., Clark B.K., DuBois J.L., Ceperley D.M.* Path-integral Monte Carlo Simulation of the Warm Dense Homogeneous Electron Gas // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110. Iss. 14. P. 146405.
36. *Филинов В.С.* Аналитические противоречия при расчете матрицы плотности в рамках “fixed-node”-подхода // *ТБТ.* 2014. Т. 52. № 5. С. 651.
37. *Weisskopf V.F.* On the Self-energy and the Electromagnetic Field of the Electron // *Phys. Rev.* 1939. V. 56. № 1. P. 72.
38. *Löwdin P.-O.* Quantum Theory of Many-particle Systems. III. Extension of the Hartree–Fock Scheme to Include Degenerate Systems and Correlation Effects // *Phys. Rev.* 1955. V. 97. № 6. P. 1509.
39. *Himpel F.J.* The Exchange Hole in the Dirac Sea. 2017. arXiv:1701.08080
40. *Ebeling W., Fortov V., Filinov V.* Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas. Berlin: Springer, 2017.
41. *Форттов В.Е., Филинов В.С., Ларкин А.С., Эбелинг В.* Статистическая физика плотных газов и неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2020.
42. *Filinov V., Larkin A., Levashov P.* Uniform Electron Gas at Finite Temperature by Fermionic-path-integral Monte Carlo Simulations // *Phys. Rev. E.* 2020. V. 102. № 3. P. 033203.
43. *Gantmacher F.R., Brenner J.L.* Applications of the Theory of Matrices. Courier Corporation, 2005.
44. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты. М.: Мир, 1971.
45. *Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С.* Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. М.: Наука, 1981.
46. *Filinov V., Fortov V., Bonitz M., Moldabekov Z.* Fermionic Path-integral Monte Carlo Results for the Uniform Electron Gas at Finite Temperature // *Phys. Rev. E.* 2015. V. 91. № 3. P. 033108.
47. *Martin R.M.* Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge Univ. Press, 2020.
48. *Barker J., Henderson D.* Theories of Liquids // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 1972. V. 23. P. 439.

УДК 536.71

АНОМАЛИИ ПРОФИЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДИФИЦИРОВАННЫХ МОДЕЛЯХ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

© 2021 г. И. Л. Иосилевский^{1, 2, *}, А. Ю. Чигвинцев^{1, 2, **}, Л. Ю. Ногинова³, И. Г. Зорина⁴

¹ФГАОУ ВО “Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)”, г. Долгопрудный, Россия

²ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

³ФГАОУ ВО “Национальный исследовательский технологический
университет “МИСиС”, Москва, Россия

⁴ФГБОУ ВО “Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)”, Москва, Россия

*E-mail: iosilevskiy@gmail.com

**E-mail: alex012008@gmail.com

Поступила в редакцию 27.09.2021 г.

После доработки 27.09.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

В работе обсуждается появление разрывов в равновесных профилях пространственного заряда в неоднородных кулоновских системах в широком спектре задач термоэлектростатики. Такие разрывы рассматриваются как своеобразное микроуровневое проявление фазовых переходов и внутренних макроуровневых эффектов неидеальности в локальном уравнении состояния, которое используется для описания неидеальной электронной или ионной подсистемы в рамках приближения локальной плотности (“псевдожидкость”, “желе” и т.д.). Особое внимание в статье уделяется эффектам неидеальности в неоднородных ионных подсистемах, таким как профиль микроионов в экранирующем “облаке” вокруг макроионов в сложной (пылевой, коллоидной и т.д.) плазме, равновесный профиль заряда в ионных ловушках или в окрестности “заряженной стенки”. Также в работе построено многофазное уравнение состояния для упрощенной ионной модели классических заряженных твердых сфер на однородно сжимаемом электростатическом компенсирующем фоне и рассчитано несколько иллюстративных примеров обсуждаемых прерывистых ионных профилей.

DOI: 10.31857/S0040364421060077

ВВЕДЕНИЕ

Проблема возможности существования специфических фазовых переходов в плазме и наличие особых свойств, присущих фазовым превращениям в системах с дальнедействующим кулоновским взаимодействием, была одной из главных сквозных тем, характерных для всего научного творчества Владимира Евгеньевича Форгова [1–3] и др. Наряду с теоретическими и экспериментальными поисками гипотетических “плазменных” фазовых переходов в плотных и нагретых состояниях (в неидеальной плазме) реальных веществ, таких как цезий [4], ксенон [5], водород (дейтерий) [6] и др., важную роль в изучении проблемы фазовых переходов в плазме играет исследование особенностей фазовых превращений и проявлений аномалий с их участием в простейших кулоновских моделях (см., например, [1, 7]).

Приближение “желе” (или приближение “квазиоднородности” [8], или приближение локальной

плотности – ПЛП [9] и др.), т.е. замена равновесного ансамбля дискретных частиц (электронов и/или ионов) гипотетической псевдожидкостью с чисто локальными термодинамическими свойствами (т.е. зависящими только от температуры и локальной плотности), широко используется не только в гидродинамических приложениях, но и в термоэлектростатике, т.е. при расчете равновесного распределения заряженных частиц вблизи источника неоднородности. Для этого используется локальное уравнение состояния (УРС), которое связывает локальное давление, энергию и химический потенциал заряженных частиц с локальной плотностью и температурой [9]. В большинстве случаев это уравнение состояния идеального газа, основанное на “бескорреляционных” приближениях Томаса–Ферми или Пуассона–Больцмана (например, [8]). Основная проблема такого подхода в приложении к сильно неидеальным системам: корректный учет влияния межчастичных корреляций (т.е. неидеальности). Самый простой способ сделать это в рамках

приближения локальной плотности – использовать локальную форму поправок на корреляции, что приводит к приближениям Томаса–Ферми–Дирака для вырожденных систем электронов или же к приближению Пуассона–Больцмана–Дебая для классических зарядов [10] и [11]. Уже в ряде ранних статей утверждалось [12–14], что очевидным решением этой проблемы в рамках ПЛП является замена приближения уравнения состояния идеального газа точным уравнением состояния для неидеальных однокомпонентных электронных или ионных подсистем с полностью развитыми корреляциями.

ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ТЕРМОЭЛЕКТРОСТАТИКИ

Хорошо известно (см., например, [8]), что любую задачу термoeлектростатики можно в наиболее общем виде сформулировать как вариационную задачу для экстремума термодинамического потенциала (свободной энергии Гельмгольца), как функционала от пространственной плотности зарядов $n(r)$ при наложенных линейных ограничениях сохранения числа частиц и электронейтральности:

$$F = \min_{n(\cdot)} F[n(\cdot)] = Ze \int \phi_{\text{ext}}(\bar{x}) n(\bar{x}) d\bar{x} + \frac{Z^2 e^2}{2} \int \frac{n(\bar{x}) n(\bar{y})}{|\bar{x} - \bar{y}|} d\bar{x} d\bar{y} + F^*[n(\cdot)]. \quad (1)$$

Здесь первый и второй члены представляют собой соответственно энергию зарядов во внешнем поле (например, в поле центрального заряда атомной ячейки или в “поле” ионной ловушки и др.) и кулоновскую энергию зарядов в “бескорреляционном” приближении среднего поля. Третий член – это априори неизвестный член, учитывающий все корреляции зарядов и их кинетическую энергию – $F^*[n(\cdot)]$. По своему смыслу этот член соответствует свободной энергии неоднородной неидеальной системы зарядов, “натянутой” на противоположно заряженный компенсирующий фон с плотностью $n(r)$. В широко используемом, как правило, приближении “локальной плотности” (или “квазиоднородности” [8], или локального термодинамического равновесия (ЛТР)) данное слагаемое аппроксимируется, как интеграл от удельной (локальной) свободной энергии макроскопической системы зарядов $f(n(r))$:

$$F^*[n(\cdot), T] \approx \int f(n(\bar{x})) n(\bar{x}) d\bar{x}, \quad (2)$$

$$f(n) \equiv \lim \left\{ \frac{F(N, V, T)}{N} \right\}_{N \rightarrow \infty, N/V = n}.$$

Если $F(N, V, T)$ представляет собой свободную энергию идеального газа (Больцмана или Ферми), то приходим к хорошо известным бескорреляционным приближениям Пуассона–Больцмана или Томаса–Ферми соответственно [8]. В случае

же когда в рамках приближения ЛТР выполняется попытка учесть корреляции зарядов, то в качестве $F(N, V, T)$ выступает уже свободная энергия однокомпонентного неидеального газа с полностью развитыми межчастичными корреляциями. Существенно [12–14], что в этом случае последнее слагаемое функционала (1) становится свободной энергией модифицированной модели однокомпонентной плазмы – ОСР(♯) (one component plasma), но уже на однородно сжимаемом компенсирующем фоне (см. подробнее [15, 16]). Следует подчеркнуть, что в этом случае во взаимодействии данной однокомпонентной системы помимо эффекта кулоновского отталкивания зарядов есть еще и эффект притяжения с “фоном” (!). Как прямой результат этого обстоятельства, все эффекты указанного притяжения, включая, прежде всего, наличие при достаточно низких температурах различных фазовых переходов, непосредственно входят вместе с используемой в (1), (2) удельной свободной энергией $f(n, T)$ в процедуру минимизации (1), где должны проявиться в тех или иных особенностях финального равновесного профиля зарядов.

СЕМЕЙСТВО МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ ЗАРЯДОВ НА ОДНОРОДНО СЖИМАЕМОМ ФОНЕ

Хорошо известная классическая однокомпонентная плазма – это идеализированная электронейтральная в целом система заряженных частиц, погруженных в однородный несжимаемый (“замороженный”) фон заряда противоположного знака (обозначаемая ниже как ОСР(♯)). Модель демонстрирует единственный фазовый переход – кристаллизацию Вигнера. Этот переход в модели ОСР(♯) происходит без изменения плотности.

В ряде предыдущих исследований [12–14, 17–19] в контексте обсуждаемой проблемы было предложено семейство модифицированных (“безассоциативных” [12]) моделей плазмы (общее обозначение ниже – ОСР(∼)) со следующими общими чертами:

- отсутствие индивидуальных корреляций между зарядами разного знака;
- возможность однородной сжимаемости всей системы в целом или ее отдельных макроскопических частей (фаз).

В частности, были изучены следующие варианты “безассоциативных” моделей:

- 1) классические точечные заряды на однородно сжимаемом компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов [13];
- 2) квантовый взаимодействующий электронный газ на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне [14];

3) классические заряженные твердые сферы на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне [20] (обозначается ниже как HS-ОСР(\sim));

4) “сдвоенная” модель ОСР (double-ОСР) – суперпозиция двух пространственно совмещенных разнозаряженных ОСР(\sim) с равными или различающимися массами (например, “бескорреляционные” системы электронов и ионов или электронов и дырок) [13, 14].

Указанному семейству “безассоциативных” моделей может быть дано точное формальное определение, позволяющее прямое моделирование свойств каждой из них [19]. Определение первой из перечисленных моделей (классические точечные заряды на сжимаемом компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов) выглядит следующим образом [19]:

$$\begin{aligned} (F/NkT)_{\text{ОСР}(-)} &= f_{\text{ОСР}(-)} = \\ &= (f_{\text{id}} + \Delta f_{\text{int}})_{ii} + (f_{\text{id}})_{ee} = (f_{\text{ОСР}(\#)})_{ii} + (f_{\text{id}})_{ee}, \end{aligned}$$

где f_{ee} и f_{ii} – удельные свободные энергии подсистем, учитывающие соответственно электрон-электронные и ион-ионные корреляции и включающие идеальные f_{id} и неидеальные Δf_{int} части.

ФАЗОВЫЕ РАССЛОЕНИЯ В МОДИФИЦИРОВАННЫХ МОДЕЛЯХ ОСР НА ОДНОРОДНО СЖИМАЕМОМ ФОНЕ

Однородная сжимаемость фона в семействе “безассоциативных” моделей ОСР(\sim) приводит к появлению трех стандартных фазовых переходов: плавление, испарение и сублимация (см. [13, 14]). Благодаря постулируемому в моделях отсутствию индивидуальных корреляций между подсистемами разных знаков (например, ион-электронных корреляций), все параметры фазовых переходов (включая параметры спиnodальных и метастабильных ветвей) могут быть явно вычислены, если известны уравнения состояния подсистем зарядов.

Для рассматриваемых далее модельных задач термоэлектростатики (а именно, электроны в атомной ячейке; электроны вблизи заряженной стенки; Z-пинч; полиион в электролите, коллоидной и пылевой плазме; заряды в макроскопической полости) понадобятся уравнения состояния идеального и/или неидеального ферми-газа электронов и уравнение состояния заряженных твердых сфер на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне. Следует подчеркнуть, что для расчета профиля заряда в задачах термоэлектростатики нельзя использовать УРС классических точечных зарядов на сжимаемом, компенсирующем электростатическом фоне [21]. Это связано с тем, что при температурах классической ионной подсистемы ниже критической температуры фазового перехода в этом варианте модели

ОСР(\sim) точечные ионы “конденсируются” (налипают) на поверхность источника неоднородности (центрального макроиона), образуя на его поверхности бесконечно тонкую и бесконечно плотную “пленку” (в работе [21] эта аномалия названа “структурной катастрофой”).

РАЗРЫВНЫЕ ПРОФИЛИ ЗАРЯДА В НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЕ КАК ОТРАЖЕНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МОДЕЛИ ОСР(\sim)

Явление, которое на макроскопическом уровне в модели ОСР(\sim) выглядит как фазовый переход, на микроскопическом уровне при соответствующих условиях (достаточно низких температурах и высоких плотностях) выглядит как разрыв в равновесном неоднородном профиле заряда (рис. 1). Это должно происходить, даже когда для учета эффекта корреляций зарядов используются простые локальные приближения типа Томаса–Ферми–Дирака или Пуассона–Больцмана–Дебая. Тем более это реализуется при использовании в вариационной процедуре (1) “точных” (т.е. полученных в рамках прямого численного моделирования) локальных уравнений состояния равновесной неоднородной системы зарядов.

Следует подчеркнуть, что это “фазовое расслоение” экранирующего заряда происходит в системе взаимно отталкивающихся частиц и, по-видимому, является одним из примеров ситуации, когда малость локального параметра неидеальности $\Gamma(r)$, оцененного в приближении Пуассона–Больцмана, никак не гарантирует не только количественной, но и качественной правильности профиля заряда, который дает это приближение.

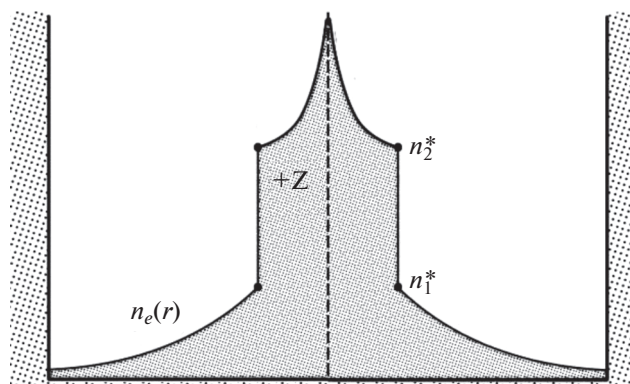


Рис. 1. Схематическое изображение ячейки Вигнера–Зейтца с разрывным профилем электронов: +Z – заряд ядра, $n_e(r)$ – профиль электронов, n_1^* – плотность “газовой фазы”, n_2^* – плотность “жидкой фазы” [13].

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В НЕИДЕАЛЬНОМ ФЕРМИ-ГАЗЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ОДНОРОДНО СЖИМАЕМОМ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОМ ФОНЕ

Модель квантового электронного газа на несжимаемом фоне хорошо изучена [22]. Переход к варианту с однородным, но сжимаемым фоном приводит к появлению фазового перехода типа газ–жидкость с верхней критической точкой (рис. 2). Наиболее существенным отличием обсуждаемой модели по сравнению со случаем электронов на несжимаемом фоне является то, что новый фазовый переход исключает возможность существования вигнеровского электронного кристалла, поскольку его кривая плавления оказывается расположенной глубоко внутри области абсолютной неустойчивости (спинодали) перехода газ–жидкость [13, 14]. Рассмотрим несколько модельных задач, иллюстрирующих вышеприведенные утверждения.

АНОМАЛИИ ПРОФИЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМНОЙ ЯЧЕЙКЕ

В иерархии приближений, используемых для решения этой задачи, видное место занимает бескорреляционное приближение (Томаса–Ферми), дающее гладкий монотонный профиль электронов [10]. Переход в рамках локального приближения [10, 22] к неидеальному УРС как путем добавления локальной обменной поправки (приближение Томаса–Ферми–Дирака), так и в более сложных вариантах [23] может при $T < T_c$ привести к разрывному профилю электронов, распадающемуся на плотную “конденсированную кап-

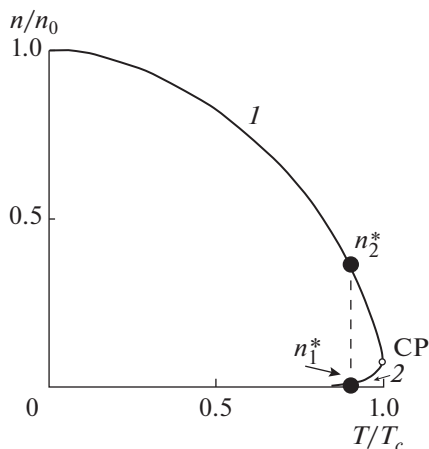


Рис. 2. Фазовая диаграмма модели неидеального ферми-газа электронов на однородно сжимаемом электростатическом фоне: CP – критическая точка; пунктирная линия – фазовый переход газ–жидкость при определенной температуре; 1 – жидкость, 2 – газ, n_1^* – плотность газа, n_2^* – плотность жидкости [14].

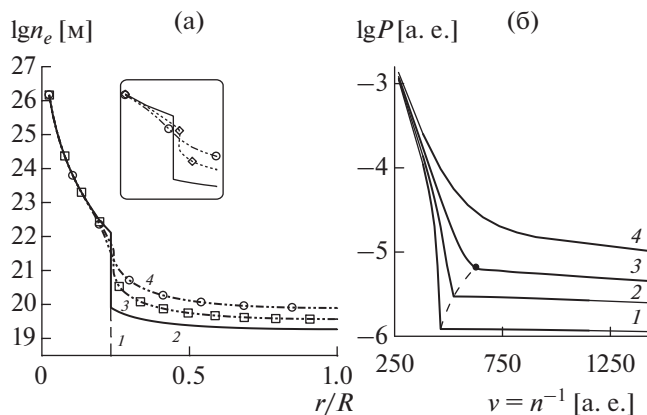


Рис. 3. Результаты расчета профиля электронов в атомной ячейке Pb (а): 1 – $T = 0$, 2 – $0.8T_c$, 3 – T_c , 4 – $1.6T_c$; (б) – электронная составляющая уравнения состояния атомной ячейки Pb [19]: 1 – $T = 0.8T_c$, 2 – $0.9T_c$, 3 – T_c , 4 – $1.2T_c$.

лю” вблизи ядра и диффузную “газовую корону” на периферии ячейки [13, 14] (рис. 1).

При $T = 0$ плотность “короны” равна нулю, и такой результат хорошо известен (например, см. рис. 12–15 в [10]). В то же время в литературе практически не обсуждается вид профиля электронов при $T > 0$ и не встречается вариантов интерпретации разрыва в терминах фазового перехода в модели ОСР [13]. На рис. 3а представлен расчет профиля электронов в сферической электронеutralной ячейке Вигнера–Зейтца с использованием вместо обменной поправки Дирака “точного” уравнения состояния квантового взаимодействующего электронного газа в виде аналитической аппроксимации [24], справедливой для произвольной степени вырождения и неидеальности электронного газа.

Аномальные профили электронов в свою очередь приводят к аномалии в суммарном УРС вещества, вычисляемом с их использованием. Аномалия в уравнении состояния появляется, когда при сжатии ячейки ее граница касается соответствующего разрыва в электронной плотности. Из-за неидеального характера локального УРС электронов суммарные давление и химический потенциал остаются непрерывными при скачкообразном изменении плотности электронов на границе ячейки. Однако производные этих величин по плотности терпят разрыв. Результирующая аномалия в УРС имеет вид излома, т.е. разрыва второго рода (рис. 3б).

Подчеркнем, что в координатах давление–температура для электронной составляющей уравнения состояния соответствующая кривая эквивалентна кривой испарения вышеупомянутого фазового перехода в модели электронного газа. Дальнейший учет нелокальности электронов сглаживает обсуждаемую аномалию, так что она не

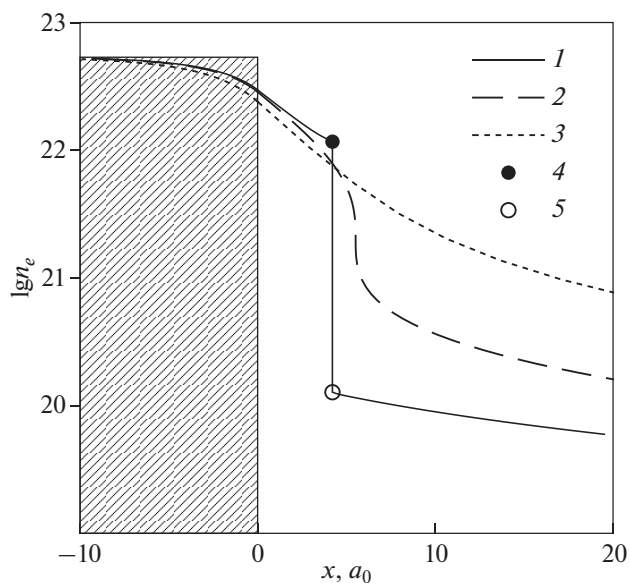


Рис. 4. Расчет профиля электронов на границе полубесконечного жесткого положительного фона (простейшая модель поверхности металлов) при различных температурах: 1 – $T = 0.8T_c$, 2 – T_c , 3 – $2T_c$; 4 – точка, соответствующая плотности испарения в модели ОСР(~) неидеального электронного газа; 5 – точка, соответствующая плотности насыщения в модели ОСР(~) неидеального электронного газа; x – расстояние в атомных единицах.

означает реального фазового перехода второго рода в веществе, а всего лишь резкое падение сжимаемости, имитирующее наличие “собственного объема” атома.

АНОМАЛЬНЫЕ ПРОФИЛИ ЗАРЯДОВ ВБЛИЗИ ЗАРЯЖЕННОЙ СТЕНКИ

Ряд физических задач можно формализовать как задачу расчета равновесного профиля заряженных частиц вблизи заряженной стенки (проницаемой или непроницаемой). Например, простейшая модель металлической поверхности (“модель желе”) рассматривает профиль электрона вблизи конца полубесконечного жесткого положительного фона. В физике пылевой плазмы интерес представляет профиль заряженных частиц в окрестности стенки. При попытке учесть корреляции в подсистеме заряженных частиц необходимо перейти в функционале плотности к использованию свободной энергии неидеального газа: в первом случае – ОСР электронов [25], во втором – ОСР заряженных твердых шаров на сжимаемом компенсирующем фоне. При низкой температуре (т.е. при температурах ниже критической для данной модели) фазовый переход, существующий в ОСР(~), проявляется как разрыв в равновесном профиле заряженных частиц, например электронов (рис. 4).

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ТВЕРДЫХ СФЕР НА СЖИМАЕМОМ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОМ ФОНЕ

Уравнение состояния модели классической системы заряженных твердых сфер (НС-ОСР) на сжимаемом электростатическом фоне может быть получено с помощью широко используемого подхода, когда свободную энергию, связанную с неидеальностью, представляют как сумму свободной энергии системы твердых сфер $F_{НС}$ и свободную энергию точечных зарядов $F_{ОСР}$ [26]:

$$F(V, N, T) = F_{НС} + F_{ОСР}.$$

В литературе можно найти множество аппроксимаций для свободной энергии системы жидких и кристаллических твердых сфер [27]. Для представления электростатической составляющей использовалось так называемое среднее сферическое приближение [21]. Фазовая диаграмма модели НС-ОСР(~) демонстрирует все три стандартных фазовых перехода между газовой, жидкой и кристаллической фазами: плавление, кипение и сублимацию (рис. 5).

ЭКРАНИРОВАНИЕ МАКРОИОНА В АСИММЕТРИЧНОЙ КОЛЛОИДНОЙ ИЛИ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ

Расчет пространственного распределения зарядов в задачах моделирования полиионов в электро-

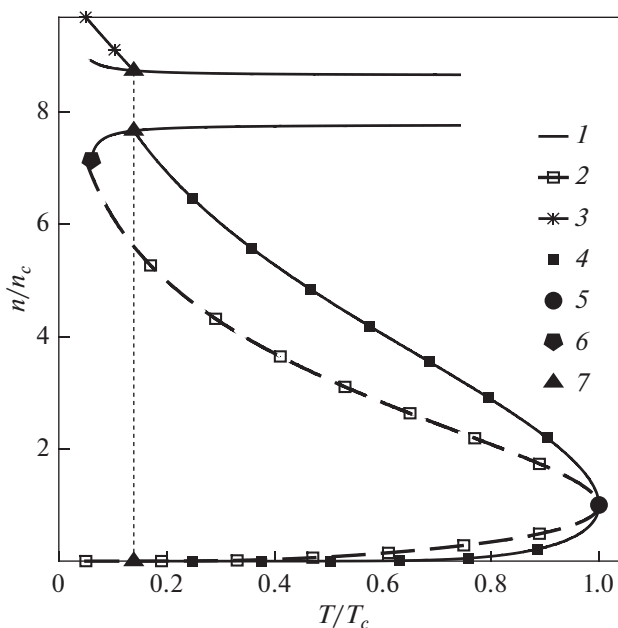


Рис. 5. Фазовая диаграмма модели заряженных твердых сфер на сжимаемом электростатическом фоне: 1 – плавление, 2 – спиноподобный флюида, 3 – кристаллическая бинодаль, 4 – флюидная бинодаль, 5 – критическая точка, 6 – спиноподобный распад зоны плавления, 7 – тройная точка; n_c – критическая плотность.

лите, коллоидной и пылевой плазме требует правильного учета ион-ионной корреляции. Простейшим способом сделать это в рамках ПЛП является замена идеального газа (в данном случае, Больцмана [28]) в уравнении Пуассона точным уравнением состояния неидеальной классической системы заряженных твердых сфер (HS-ОСР) на сжимаемом электростатическом фоне (рис. 6).

ВОЗМОЖНЫЕ АНОМАЛИИ РАВНОВЕСНОГО ПРОФИЛЯ ИОНОВ В ЛОВУШКЕ

В качестве простейшей модели “ионной ловушки” может быть рассмотрена сферическая полость, в которой находятся одноименно заряженные микроионы (рис. 7). При учете неидеальности ионной подсистемы в приближении локальной плотности, т.е. при использовании УРС HS-ОСР(–), так же как и в предыдущем случае, при достаточно низкой температуре в профиле микроионов будут наблюдаться два разрыва, связанные с кристаллизацией/плавлением и конденсацией/испарением в модели HS-ОСР(–).

При этом плотная фаза (кристалл/жидкость) будет образовываться не в центре ячейки, а на ее периферии (рис. 8).

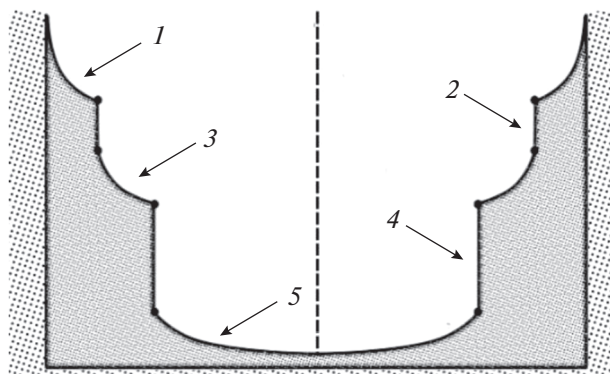


Рис. 7. Схематическое изображение простейшей модели “ионной ловушки” – сферическая полость, заполненная микроионами: 1 – “кристалл”; 2 – разрыв в профиле ионов, соответствующий фазовому переходу кристалл–жидкость в модели HS-ОСР(–); 3 – “жидкость”; 4 – разрыв в профиле ионов, соответствующий фазовому переходу газ–жидкость в модели HS-ОСР; 5 – “газ”.

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ В ПРИМИТИВНОЙ МОДЕЛИ “Z-ПИНЧА”

Электрон-ионная система сильноточного разряда “Z-пинч” [29, 15] фактически является двух-

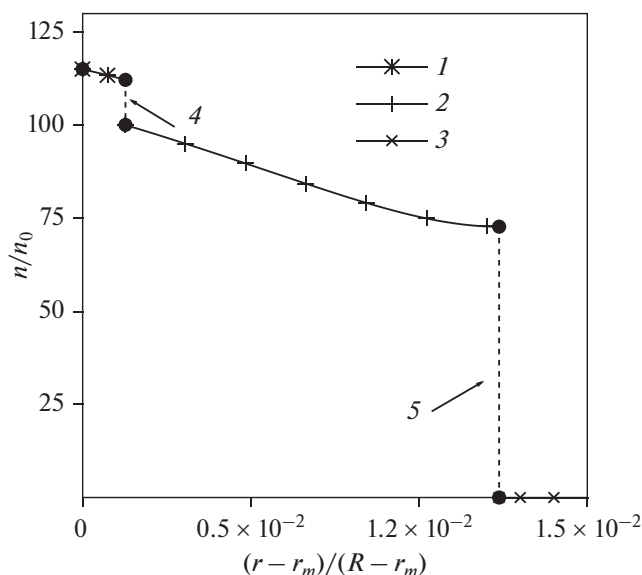


Рис. 6. Расчет распределения микроионов вокруг макроиона $Z_{\text{macroion}} = 10^5 e$ при температуре ионной подсистемы $0.35 T_c$: 1 – “кристалл”, 2 – “жидкость”, 3 – “газ”; 4 – разрыв в профиле, соответствующий фазовому переходу кристалл–жидкость в модели HS-ОСР(–); 5 – переход жидкость–газ; n_0 – средняя плотность микроионов, r_m – радиус макроиона, R – радиус ячейки.

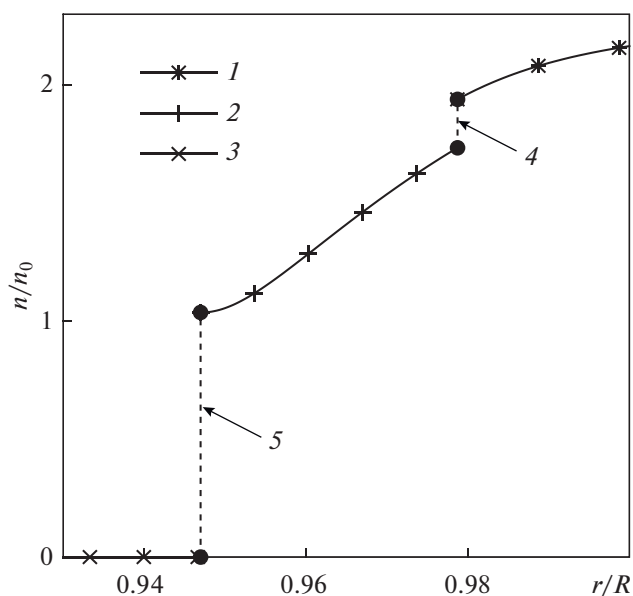


Рис. 8. Расчет распределение микроионов в ячейке R при температуре ионной подсистемы $0.5 T_c$: 1 – “кристалл”; 2 – “жидкость”; 3 – “газ”; 4 – разрыв в профиле, соответствующий фазовому переходу кристалл–жидкость в модели HS-ОСР(–); 5 – переходу газ–жидкость.

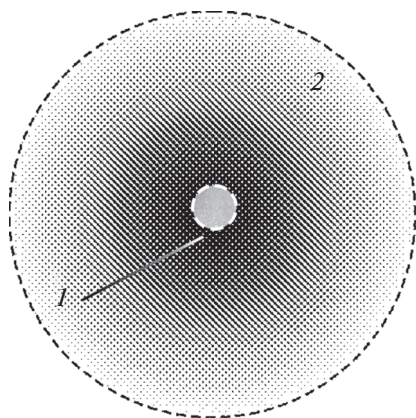


Рис. 9. Схематическое изображение цилиндрической ячейки – простейшая модель “Z-пинча”: 1 – “сколлапсировавшие” в “струну” токнесущие электроны, 2 – неоднородный равновесный флюид ионов.

компонентной системой, однако из-за большой средней скорости токнесущих электронов относительно практически неподвижных ионов обе подсистемы можно в хорошем приближении считать не коррелирующими друг с другом, т.е. взаимодействующими лишь “в среднем” [29, 15]. Более того, из-за большой инерции ионная подсистема гораздо медленнее эволюционирует в процессе сжатия пинча, и на определенной стадии развития может быть оправдано использование следующей идеализированной модели. Все свободные электроны сжались в тонкую токне-

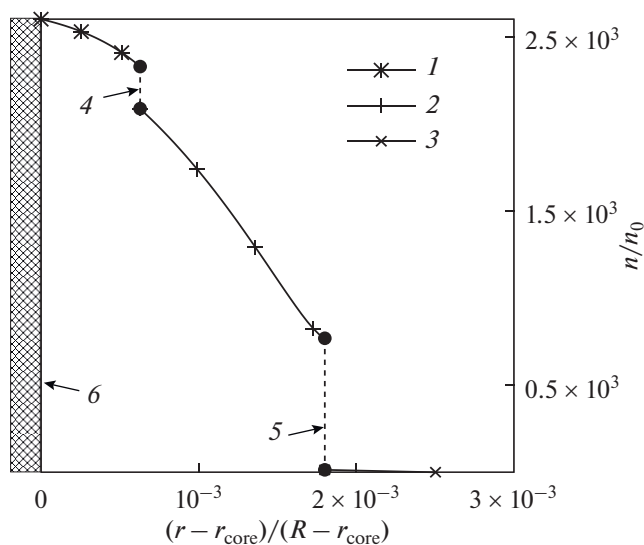


Рис. 10. Расчет профиля ионов в модели “Z-пинча” при $T=0.8T_c$: 1 – “кристалл”; 2 – “жидкость”; 3 – “газ”; 4 – разрыв в профиле, соответствующий фазовому переходу кристалл–жидкость в модели HS-ОСР(~); 5 – переходу газ–жидкость; 6 – токнесущие электроны; r_{core} – размер центрального линейного заряда “сколлапсировавших” электронов.

сущую “нить”, и необходимо найти равновесное распределение ионов вокруг центрального линейного заряда в центре цилиндрической ячейки (рис. 9). Переход от бескорреляционного приближения в описании профиля ионов, например в рамках задачи на экстремум функционала плотности, к полному описанию ион-ионных корреляций потребует использования для ионной подсистемы уравнения состояния ОСР для заряженных твердых/мягких шариков на сжимаемом компенсирующем фоне. Содержащийся в данной модели HS-ОСР(~) фазовый переход проявляется при определенном наборе параметров в виде разрыва в равновесном профиле ионов (рис. 10).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Несмотря на кулоновское отталкивание одноименных зарядов, учет их корреляций в приближении локальной плотности в вариационной формулировке решения задач термoeлектростатики эквивалентен дополнительному эффективному притяжению зарядов, вследствие чего их результирующие равновесные профили будут более крутыми в сравнении с профилями, рассчитанными в широко используемом “бескорреляционном” приближении.

- При достаточно низких температурах (даже при малом параметре неидеальности Γ) этот эффект столь значителен, что может привести к резкому изменению профиля заряженных частиц вплоть до реализации разрывной формы этого профиля.

- Факт возникновения разрывов в пространственном распределении зарядов, а также параметры, при которых это происходит, получают естественную интерпретацию в терминах фазовых переходов в модели однокомпонентной плазмы на однородно сжимаемом компенсирующем фоне – ОСР(~), уравнение состояния которой заменяет уравнение состояния идеального газа в локальном приближении обменно-корреляционного члена в функционале плотности.

Авторы благодарят И.А. Мартынову за плодотворные обсуждения проблем, затронутых в данной статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Форт В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. М.: Физмалит, 2004.
2. Форт В.Е. Уравнения состояния вещества. От идеального газа до кварк-глюонной плазмы. М.: Физмалит, 2013. 492 с.
3. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. I / Под ред. Фортова В.Е. М.: Наука, 2000.
4. Бушман А.В., Ломакин Б.Н., Сеченов В.А., Форт В.Е., Щекотов О.Е., Шарипджанов И.И. Термодинамика неидеальной плазмы цезия // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 5. С. 1624.

5. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортвов В.Е. Расчет ударных адиабат аргона и ксенона // ПМТФ. 1973. Т. 3. С. 70.
6. Fortov V.E., Ilkaev R.I., Arinin V.A., Burtzev V.V., Golubev V.A., Iosilevskiy I.L., Khrustalev V.V., Mikhailov A.L., Mochalov M.A., Ternovoi V.Ya., Zhernokletov M.V. Phase Transition in Strongly Non-ideal Deuterium Plasma, Generated by Quasi-isentropical Compression at Megabars // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. Iss. 18. 185001.
7. Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Сон Э.Е., Фортвов В.Е. Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме. М.: Изд-во МФТИ, 2002. 476 с.
8. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. Статистическая модель вещества // УФН. 1975. Т. 117. № 1. С. 3.
9. Фортвов В.Е. Физика высоких плотностей энергии. М.: Физматлит, 2013. 712 с.
10. Гомбаш П. Статистическая теория атома. Пер. с нем. М.: Изд-во иностр. лит., 1951. 400 с.
11. Жуховицкий Д.Н., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Ионизационное равновесие в плазме с конденсированной дисперсной фазой. В сб.: Химия плазмы / Под ред. Смирнова Б.М. М.: Энергоатомиздат, 1984. Т. 11. С. 130.
12. Иосилевский И.Л. Фазовые переходы в кулоновских моделях. В сб.: Уравнение состояния в экстремальных условиях / Под ред. Гадияка Г.В. Новосибирск: ИТПМ, 1981. С. 20.
13. Иосилевский И.Л. Фазовый переход в простейшей модели плазмы // ТВТ. 1985. Т. 23. № 6. С. 1041.
14. Iosilevski I., Chigvintsev A. Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Physics of Non-Ideal Plasmas / Eds. Ebeling W., Forster A., Radtke R. Stuttgart—Leipzig: Teubner, 1992. P. 87.
15. Мейерович Б.Э. На пути к осуществлению электромагнитного коллапса // УФН. 1986. Т. 149. № 2. С. 221.
16. Чигвинцев А.Ю., Иосилевский И.Л. Приближение сплошной среды и аномалии в неоднородной неидеальной плазме // Физика экстремальных состояний вещества / Ред. Фортвов В.Е. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2008. С. 243.
17. Iosilevski I., Chigvintsev A. Anomalous Phase Diagram in Simplest Plasma Model. In: Strongly Coupled Coulomb Systems / Eds. Kalman G., Blagoev K., Rommel J. N.Y.—London: Plenum Press, 1998. P. 135.
18. Iosilevski I., Chigvintsev A. Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Physics of Strongly Coupled Plasmas / Eds. Kraeft W., Schlanges M. Singapore—London: World Sci., 1996. P. 145.
19. Iosilevski I. Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Strongly Coupled Plasma Physics / Eds. Horn H.V., Ichimaru S. Rochester: University of Rochester Press, 1993. P. 343.
20. Chigvintsev A. Yu., Iosilevskiy I.L., Zorina I.G., Noginova L. Yu. Phase Transitions in Local Equation-of-state Approximation and Anomalies of Spatial Charge Profiles in Non-uniform Plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 946. 012092.
21. Penfold R., Nordholm S. A Simple Analysis of the Classical Hard-sphere One-component Plasma // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. P. 2048.
22. Теория неоднородного электронного газа / Под ред. Марча Н. М.: Мир, 1966.
23. Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю. Фазовый переход в модели ОСР и аномалии в приближении УрС Томаса—Ферми. В сб.: Уравнение состояния вещества / Под ред. Фортвова В.Е. Нальчик: КБГУ, 1997. С. 109.
24. Ichimaru S., Yyetomi H., Tanaka S. Statistical Physics of Dense Plasmas: Thermodynamics, Transport Coefficients, and Dynamic Correlations // Phys. Rep. 1987. V. 149. Iss. 2–3. P. 91.
25. Иосилевский И.Л. Эффекты неидеальности в низкотемпературной плазме. В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под общ. ред. Фортвова В.Е. Т. III-1 / Под ред. Старостина А.Н., Иосилевского И.Л. М.: Физматлит, 2004. С. 349.
26. Brilliantov N., Malinin V., Netz R. Systematic Field-theory for the Hard-core One-component Plasma // Eur. Phys. J. D. 2002. V. 18. P. 339.
27. Theory and Simulation of Hard-Sphere Fluids and Related Systems / Eds. Mulero A. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008.
28. Martynova I., Iosilevskiy I. Macroion Effective Charge in Complex Plasmas with Regard to Microions Correlations // Contrib. Plasma Phys. 2021. V. 61. e202000142.
29. Мейерович Б.Э. Канал сильного тока. М.: ФИМА, 1999.

УДК 538.9

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В КРЕМНИИ, НАВЕДЕННЫЙ ИМПУЛЬСОМ ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

© 2021 г. О. В. Чefonov¹, *, А. В. Овчинников¹, **, М. Б. Агранат¹, ***¹ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: oleg.chefonov@gmail.com

**E-mail: a.ovtch@gmail.com

***E-mail: agranat2004@mail.ru

Поступила в редакцию 25.02.2021 г.

После доработки 30.08.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

В работе представлены экспериментальные результаты исследования нелинейного оптического эффекта в образцах кристаллического кремния с различной степенью и типом легирования, индуцированного электрическим полем ультракороткого импульса терагерцевого излучения в диапазоне напряженностей от 4 до 10 МВ/см. Экспериментально измерен электрооптический коэффициент для образцов кремния разной толщины и степенью легирования на длине волны 1240 нм. Получены оценки действительной части объемной нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$, постоянной Керра и нелинейного показателя преломления n_2 .

DOI: 10.31857/S0040364421050033

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время экспериментальные исследования с использованием терагерцевого (ТГц) излучения представляют собой активно развивающуюся междисциплинарную область [1–5]. Благодаря прогрессу в генерации ТГц-импульсов [6] стало возможным получение электромагнитных полей с пиковой напряженностью в несколько десятков МВ/см в спектральном диапазоне 1–10 ТГц с помощью относительно компактных настольных установок [7–13]. Такие высокие значения напряженности электрического поля позволили открыть область нелинейной ТГц-спектроскопии, в которой низкочастотные моды вещества переводятся в режимы с колебаниями большой амплитуды [14–17], проводить исследования и получать ранее недоступную информацию о силовом воздействии ТГц-импульсов на тонкие металлические пленки [18–21], исследовать генерацию носителей заряда за счет ударной ионизации и нелинейные эффекты в полупроводниках [22–29], управлять спиновой динамикой в ферроиках [30–32].

С развитием интенсивных источников терагерцевого диапазона стало возможным наблюдать и изучать нелинейные оптические эффекты, индуцированные ТГц-полем, в различных аморфных и кристаллических средах [33–39]. Одним из таких эффектов, возникающих под действием импульсов ТГц-излучения, является эффект Керра, который описывает изменение показателя преломления среды под действием внешнего электрического поля.

Данный эффект пропорционален квадрату напряженности приложенного электрического поля, в отличие от эффекта Поккельса, который по полю линейен, и может наблюдаться в любых материалах. Оба электрооптических эффекта практически безынерционны (временной отклик порядка 1 фс [40]) и в связи с этим активно используются при создании современных оптических модуляторов и затворов.

Для постоянного электрического поля закон Керра выражается как $\Delta n = K\lambda E^2$, где K – постоянная Керра, λ – длина волны в вакууме, E – напряженность электрического поля. На оптических частотах наблюдается зависящая от интенсивности модуляция показателя преломления $\Delta n = n_2 I$, что приводит к хорошо известным нелинейным оптическим эффектам, таким как самофокусировка (линза Керра), фазовая самомодуляция и двойное лучепреломление, которые обычно измеряются посредством деполяризации слабого зондирующего излучения (оптический эффект Керра).

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований нелинейного оптического эффекта в образцах кристаллического кремния с различными степенью и типом легирования, индуцированного электрическим полем субпикосекундного импульса терагерцевого излучения при напряженностях электрического поля от 4 до 10 МВ/см.

Результаты подобных исследований крайне важны для развития кремниевой фотоники и кремниевой оптоэлектроники, которые в настоящее время рассматриваются как основные платформы для оптической связи в центрах обработки и передачи данных, разработки и оптимизации сверхбыстрого кремниевого электрооптического переключателя для интегрально-оптических приложений, а также для задач, где требуются дополнительные кремниевые функциональные возможности, основанные на оптических нелинейностях, включая квантовую фотонику.

ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Схема экспериментов изображена на рис. 1. Экспериментальные исследования выполнялись на базе уникальной хром-форстеритовой лазерной системы [41], собранной по схеме усиления chirпированного импульса и состоящей из задающего генератора, стретчера, усилительных каскадов и временного компрессора. В обычном режиме работы лазерная система позволяет получить на выходе из временного компрессора оптические импульсы на длине волны 1240 нм с энергией до 40 мДж, длительностью 100 фс и частотой

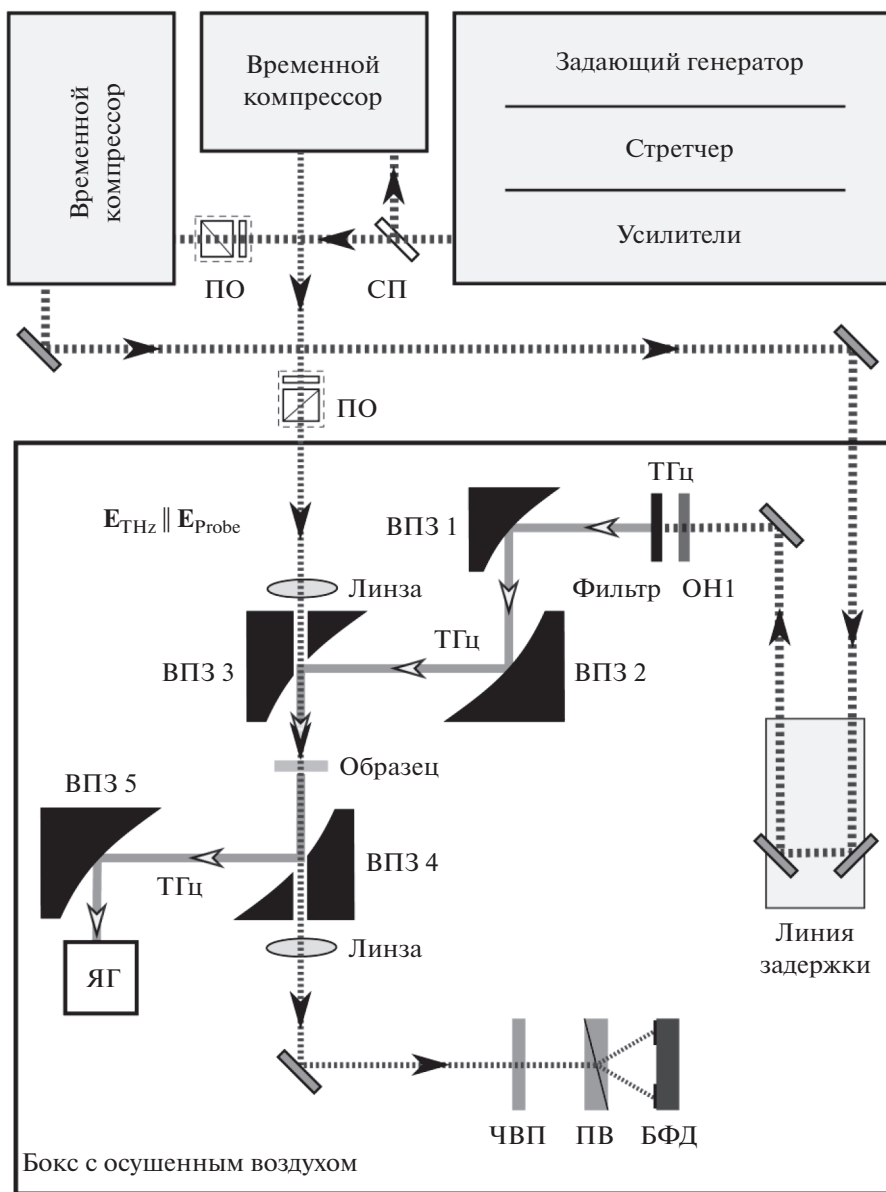


Рис. 1. Схема экспериментов: СП – светоделительная пластина; ПО – поляризационные ослабители; ВПЗ 1, ВПЗ 2, ВПЗ 3, ВПЗ 4, ВПЗ 5 – внеосевые параболические зеркала; ЯГ – ячейка Голея; ЧВП – четвертьволновая пластина; ПВ – призма Волластона; БФД – балансные фотодиоды; E_{THz} , E_{Probe} – векторы напряженности электрического поля терагерцевого и зондирующего импульсов.

повторения 10 Гц. Лазерное излучение после усиленных каскадов делилось на две части с помощью светоделительной пластины (СП). Основная часть энергии лазерного импульса (98%) предназначалась для накачки нелинейного кристалла и генерации терагерцевых импульсов, а другая часть (2%) служила в качестве зондирующего импульса. Регулировка энергии импульса накачки и зондирующего импульса осуществлялась поляризационными ослабителями (ПО), состоящими из полуволновой пластины и призмы Глана–Томпсона.

ТГц-импульсы генерировались методом оптического выпрямления фемтосекундных импульсов хром-форстеритовой лазерной системы в нелинейном органическом кристалле ОН1 (2-(3-(4-гидроксистирил)-5,5-диметилциклогексо-2-энилиден)малонитрил) толщиной 570 мкм и диаметром 8 мм. Плотность энергии лазера накачки, падающей на кристалл ОН1, имела величину порядка 10 мДж/см², при этом эффективность преобразования излучения лазерной накачки в терагерцевое составила 2.5%. После кристалла ОН1 был установлен отрезающий широкополосный ТГц-фильтр (LPF8.8-47, Tydex), блокирующий длины волн меньше 34 мкм. Коэффициент ослабления отрезающего фильтра на длине волны излучения лазерной накачки 1240 нм составлял не менее 10⁸. Для достижения максимальной напряженности электрического поля ТГц-импульса и максимальной плотности энергии ТГц-пучков на выходе из кристалла ОН1 расширился с 8 до 48 мм с помощью телескопа, собранного из двух внеосевых параболических зеркал (ВПЗ 1 и ВПЗ 2) с эффективными фокусными расстояниями 25.4 и 152.4 мм. Фокусировка ТГц-излучения на экспериментальный образец осуществлялась внеосевым параболическим зеркалом (ВПЗ 3) с эффективным фокусным расстоянием 50.8 мм и диаметром 50.8 мм. Радиус ТГц-пучка в фокальной плоскости составил 154 мкм по уровню 1/е². Измерения размера ТГц-пучка проводились специализированной терагерцевой камерой (RIGI, Swiss Terahertz). Энергия ТГц-импульсов измерялась с помощью дополнительной пары параболических зеркал (ВПЗ 4 и ВПЗ 5) и калиброванной ячейки Голя (ЯГ) (GS-1D, Tydex). Максимальная энергия ТГц-импульсов в экспериментах равнялась 120 ± 4 мкДж. Длительность ТГц-импульса определялась по измеренной волновой форме и составила порядка 400 фс по уровню FWHM (полная ширина на уровне половинной амплитуды). Волновая форма ТГц-импульса была измерена методом электрооптического детектирования на кристалле GaP (фосфид галлия) толщиной 200 мкм. На рис. 2 приведены временной профиль ТГц-импульса (рис. 2а) и его спектр (рис. 2б), восстановленный преобразованием Фурье. По измеренным параметрам ТГц-излучения (размер пучка, энергия, длительность) выполнена оценка максимального значения напря-

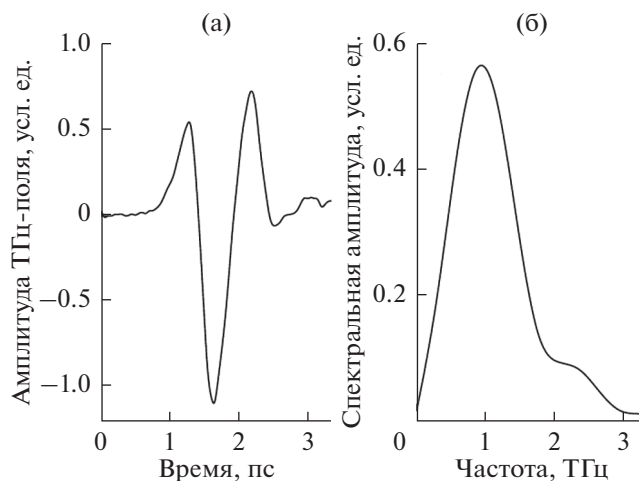


Рис. 2. Временной профиль электрического поля ТГц-импульса (а) и восстановленный спектр ТГц-импульса с помощью преобразования Фурье (б).

женности электрического поля ТГц-импульса [42], которая составила около 24 МВ/см.

Зондирующий импульс (1240 нм) распространялся в одном направлении с ТГц-импульсом и фокусировался на образце в центральную область ТГц-пучка в пятно диаметром 20 мкм (по уровню 1/е²) линзой с фокусным расстоянием 100 мм. Интенсивность зондирующего излучения на образце составляла 10¹¹ Вт/см².

Зондирующий импульс перед образцом имеет линейную поляризацию, а после прохождения через образец приобретает эллиптическую поляризацию за счет двойного лучепреломления, наведенного электрическим полем ТГц-импульса. Эллиптичность детектируется в схеме с четвертьволновой пластинкой (ЧВП) и призмой Волластона (ПВ), которая разделяет входящий луч на два луча ортогональной поляризации, разность интенсивностей которых измеряется балансными фотодиодами (БФД) (PDB210C/M, Thorlabs), как функция временной задержки между ТГц-накачкой и оптическим зондирующим импульсом.

В экспериментах использовались пластины монокристаллического кремния марок КЭФ (100) толщиной 245 мкм (*n*-тип с концентрацией основных носителей $\sim 9 \times 10^{16}$ см⁻³), КДБ (100) толщиной 235 мкм (*p*-тип, $\sim 1.6 \times 10^{15}$ см⁻³) и КДБ (111) толщиной 470 мкм (*p*-тип, $\sim 1 \times 10^{12}$ см⁻³). Для первых двух образцов (*n*- и *p*-типа) концентрация основных носителей, которые использовались в предыдущих работах [23, 24, 26, 27], была измерена методом эффекта Холла. Для третьего образца концентрация носителей рассчитывалась по удельному сопротивлению, приведенному в паспорте производителя. Каждый образец фиксировался на специальном ин-

дивидуальном держателе и устанавливался на моторизованной двухкоординатной системе линейного позиционирования, которая позволяла перемещать образец вдоль и поперек оптической оси. Установка образцов в фокальную плоскость зеркала ВПЗ 3 (рис. 1) осуществлялась по результатам измерения терагерцевого пропускания образца методом z -сканирования [23, 24]. Для этого образец перемещался вдоль оптической оси ТГц-пучка в окрестностях его перетяжки, а прошедшее через образец ТГц-излучение регистрировалось ячейкой Голя с помощью зеркала ВПЗ 4 и ВПЗ 5. Эксперименты проводились при комнатной температуре в боксе с осушенным воздухом для уменьшения поглощения энергии ТГц-импульса водяными парами (абсолютная влажность при температуре 23°C составляла $\sim 0.43 \text{ г/м}^3$) в диапазоне значений напряженностей электрического поля ТГц-импульсов 4–10 МВ/см.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 приведены временные зависимости наведенного оптического двулучепреломления в различных образцах кремния на длине волны 1240 нм при воздействии на них ТГц-импульсом с напряженностью электрического поля 6.5 МВ/см. Для сравнения на рис. 3 также представлена возведенная в квадрат волновая форма ТГц-импульса (пунктирная кривая), которая показывает, что форма сигналов наведенного двойного лучепреломления не повторяет в точности форму ТГц-

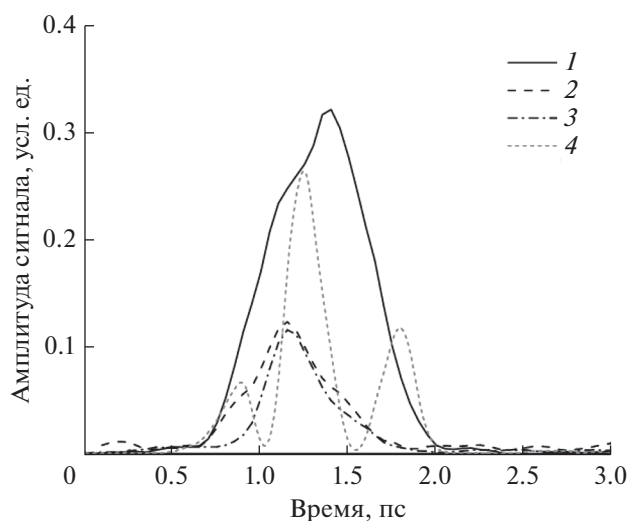


Рис. 3. Временные зависимости сигнала оптического двулучепреломления в кремнии, наведенного электрическим полем ТГц-импульса с напряженностью 6.5 МВ/см: 1 – кремний p -типа толщиной 470 мкм; 2 – p -типа, 235 мкм; 3 – s -типа, 245 мкм; 4 – квадрат волновой формы ТГц-импульса.

поля, а имеет вид огибающей волновой формы с одним центральным максимумом.

В общем случае величина регистрируемого электрооптического сигнала будет прямопропорциональна напряженности электрического поля E_{THz} , приложенного к кристаллу, его линейному электрооптическому коэффициенту r и толщине L :

$$S(\omega) \propto \frac{\omega L}{c} \Delta n = \frac{2\pi L}{\lambda} n_0^3 E_{\text{THz}} t_{\text{THz}} r, \quad (1)$$

где ω – круговая частота зондирующего импульса, c – скорость света, Δn – наведенное двойное лучепреломление, λ – длина волны зондирующего импульса, n_0 – показатель преломления кристалла на частоте зондирующего импульса, $t_{\text{THz}} = 2/(n_{\text{THz}} + 1)$ – амплитудный коэффициент пропускания Френеля кристалла на терагерцевой частоте, n_{THz} – показатель преломления кристалла на терагерцевой частоте.

Поведение сигнала, описываемое выражением (1), проиллюстрировано на рис. 3. При увеличении толщины кристалла (образцы кремния p -типа) в два раза происходит двукратное увеличение сигнала наведенного двулучепреломления при фиксированном значении напряженности поля.

Для кристалла GaP зависимость сигнала наведенного двулучепреломления от величины приложенного поля должна быть линейной (в области полей, где нелинейными эффектами среды можно пренебречь), так как обусловлена в основном эффектом Поккельса – линейным по полю электрооптическим эффектом, который связан с нелинейной восприимчивостью второго порядка $\chi^{(2)}$. В кремнии, который является центросимметричным кристаллом, нелинейная восприимчивость второго порядка отсутствует и $\chi^{(2)} = 0$, вследствие чего будут отсутствовать и нелинейные эффекты второго порядка, а его нелинейность будет определяться кубической восприимчивостью $\chi^{(3)}$. Поэтому для кремния полевая зависимость сигнала наведенного двулучепреломления должна быть квадратичной $\sim E_{\text{THz}}^2$, так как данное явление относится к процессам с нелинейной восприимчивостью третьего порядка – электрооптический эффект Керра.

На рис. 4 представлены зависимости максимального значения электрооптического сигнала образцов кремния от максимальной амплитуды напряженности электрического поля ТГц-импульса. Как видно из графиков, в диапазоне напряженностей электрических полей от 4 до 10 МВ/см, которые значительно превышают пороговые пробойные значения для кремния ~ 0.5 МВ/см (для постоянного во времени поля), зависимости сигналов достаточно хорошо аппроксимируются степенной функцией с показателем степени 2, как и предпо-

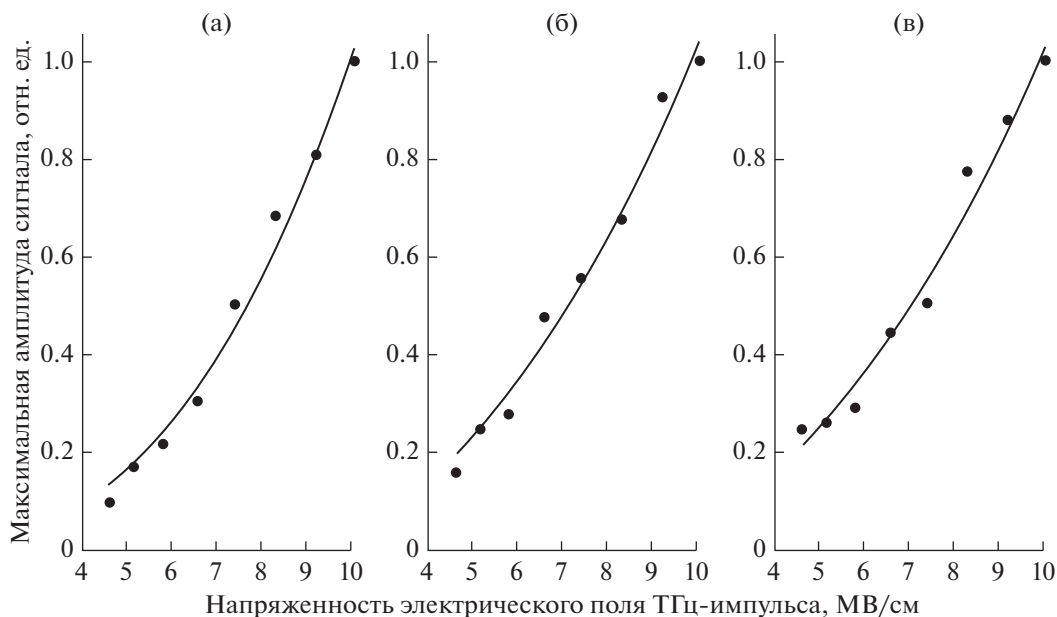


Рис. 4. Зависимости сигнала оптического двулучепреломления в кремнии, индуцированного электрическим полем ТГц-импульса в диапазоне напряженностей 4–10 МВ/см: (а) – кремний *p*-типа толщиной 470 мкм; (б) – *p*-типа, 235 мкм; (в) – *s*-типа, 245 мкм; точки – экспериментальные данные, линии – степенная аппроксимация.

лагалось выше (коэффициенты аппроксимации приведены в табл. 1).

По экспериментальным данным были получены оценки электрооптических коэффициентов образцов кремния на длине волны 1240 нм, действительной части объемной нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$, постоянной Керра и нелинейного показателя преломления n_2 (коэффициент Керра) в диапазоне полей ТГц-импульсов 4–10 МВ/см.

Для этого с помощью выражения (1) с использованием измеренных параметров кристалла GaP было получено соотношение, позволяющее оценить эквивалентный линейный электрооптический коэффициент образцов кремния

$$r_{\text{Si}}^* = \frac{S_{\text{Si}}^{\text{meas}} k_{\text{GaP}} r_{\text{GaP}}}{S_{\text{GaP}}^{\text{meas}} k_{\text{Si}}}$$

Здесь $S_{\text{Si}}^{\text{meas}}$ и $S_{\text{GaP}}^{\text{meas}}$ – измеренные максимальные значения электрооптического сигнала для кристаллов кремния и фосфида галлия в условных единицах; k_{GaP} и $k_{\text{Si}} = \frac{2\pi L}{\lambda} n_0^3 E_{\text{THz}} t_{\text{THz}}$ – множитель из выражения (1) при электрооптическом коэффи-

циенте r для соответствующего кристалла; r_{GaP} – электрооптический коэффициент кристалла GaP. Параметры кристалла GaP: $r_{\text{GaP}} = 0.7 \times 10^{-12}$ м/В для частоты 1 ТГц, $n_0 = 3.1$ для длины волны 1240 нм, $n_{\text{THz}} = 3.34$ [43, 44], $S_{\text{GaP}}^{\text{meas}} = 6.5$ для поля 6.5 МВ/см. Параметры образцов кремния: $n_0 = 3.52$ для длины волны 1240 нм [45], $n_{\text{THz}} = 3.4$, $S_{\text{Si}}^{\text{meas}} = 0.32$ для *p*-типа толщиной 470 мкм, $S_{\text{Si}}^{\text{meas}} = 0.12$ для *p*-типа толщиной 235 мкм, $S_{\text{Si}}^{\text{meas}} = 0.11$ для *n*-типа толщиной 245 мкм для поля 6.5 МВ/см (см. рис. 3).

Следует отметить, что в экспериментах для каждого кристалла амплитуда сигнала зондирующего импульса на балансных диодах в отсутствие ТГц-поля устанавливалась на одном и том же уровне, так как измеряемый сигнал двойного лучепреломления зависит от интенсивности зондирующего импульса из-за специфики схемы регистрации.

Линейный электрооптический коэффициент r связан в свою очередь с нелинейной восприимчивостью второго порядка $\chi^{(2)}$ как $r = 2\chi^{(2)}/n_0^4$. Отсюда можно получить выражение для эквивалентной вос-

Таблица 1. Коэффициенты аппроксимационных функций вида $y = ax^b$ для рис. 4

Коэффициенты	<i>p</i> -Si, 470 мкм	<i>p</i> -Si, 235 мкм	<i>s</i> -Si, 245 мкм
<i>a</i>	0.0024 ± 8.121	0.00738 ± 0.0023	0.00964 ± 0.0029
<i>b</i>	2.6252 ± 0.154	2.14652 ± 0.1441	2.02435 ± 0.1418

Таблица 2. Экспериментальные оценки нелинейной восприимчивости $\chi^{(3)}$, постоянной Керра K и нелинейного коэффициента показателя преломления n_2 для различных образцов кремния на длине волны 1240 нм в диапазоне полей 4–10 МВ/см

Материал	$\chi^{(3)}$, $10^{-21} \text{ м}^2/\text{В}^2$	K , $10^{-16} \text{ м}/\text{В}^2$	n_2 , $10^{-20} \text{ м}^2/\text{Вт}$
<i>p</i> -Si (111), 470 мкм	1.2	8.3	2.7
<i>p</i> -Si (100), 235 мкм	0.9	6.2	2.1
<i>n</i> -Si (100), 245 мкм	0.8	5.7	1.9

приимчивости второго порядка $\chi_{\text{eq}}^{(2)}$ для кремния – $\chi_{\text{eq}}^{(2)} = \chi^{(3)} E_{\text{THz}} = r_{\text{Si}}^* n_0^4 / 2$, и далее найти значения нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$ и другие параметры [46]. В табл. 2 приведены результаты оценок нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$, постоянной Керра $K = 3\chi^{(3)} / (\lambda n_0)$ и нелинейного коэффициента показателя преломления $n_2 = 3\chi^{(3)} / (4n_0^2 c \epsilon_0)$, где $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ Ф}/\text{м}$ – диэлектрическая постоянная, для экспериментальных образцов на длине волны 1240 нм в диапазоне полей ТГц-импульсов 4–10 МВ/см.

На рис. 5 приведены измеренные временные зависимости сигнала оптического двулучепреломления в образцах кремния *p*-типа толщиной 235 и 470 мкм на длине волны 1240 нм, индуцированно-го электрическим полем ТГц-импульса с напря-

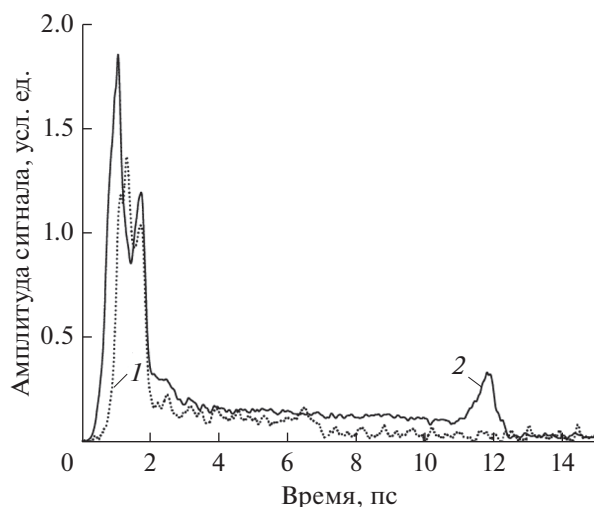


Рис. 5. Временные зависимости сигнала наведенного оптического двулучепреломления в кремнии *p*-типа толщиной 235 (1) и 470 мкм (2) при воздействии ТГц-импульсом с напряженностью электрического поля 24 МВ/см.

женностью 24 МВ/см, в диапазоне временных задержек до 15 пс.

В начальный момент времени 0–2 пс сигналы демонстрируют временную структуру с особенностями, напоминающую отклики, приведенные на рис. 3, но с провалом в центральной части в окрестности 1.2 пс, где интенсивность ТГц-импульса максимальна. После окончания действия ТГц-импульса (от 2 пс и далее) сигнал наведенного двулучепреломления резко спадает, но полностью не исчезает и далее плавно затухает в течение нескольких пикосекунд в зависимости от толщины образца. При временах задержки около 6.5 и 12 пс во временной зависимости можно заметить усиление в сигнале наведенного двулучепреломления, по форме напоминающее то, которое наблюдается в начальный момент перекрытия импульсов накачки и зондирования на рис. 3. Оценки показывают, что эти времена соответствуют двукратному переотражению ТГц-импульса в образцах кремния толщиной 235 и 470 мкм соответственно. На временах, превышающих время двукратного переотражения, сигнал наведенного двойного лучепреломления исчезает полностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены экспериментальные измерения нестационарного оптического двойного лучепреломления образцов кристаллического кремния с различной степенью легирования и толщиной на длине волны 1240 нм, индуцированного интенсивными ТГц-импульсами в диапазоне напряженностей электрических полей 4–10 МВ/см. В данном диапазоне напряженностей для всех образцов наблюдается квадратичная зависимость сигнала двулучепреломления от величины ТГц-поля, которая соответствует электрооптическому эффекту Керра. Получены оценки электрооптического коэффициента, действительной части объемной нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$, постоянной Керра и нелинейного показателя преломления n_2 для образцов кремния на длине волны 1240 нм.

Показано, что при воздействии ТГц-импульса с напряженностью электрического поля 24 МВ/см на образцы кремния *p*-типа толщиной 470 и 235 мкм наблюдается сильно нелинейный отклик в сигнале наведенного двулучепреломления. После окончания действия ТГц-импульса индуцированная анизотропия продолжает сохраняться в течение нескольких пикосекунд и пропадает на временах, превышающих время двукратного переотражения ТГц-импульса в образце.

Все экспериментальные работы были выполнены на уникальной тераваттной хром-форстеритовой лазерной системе (УНУ “ЛТФК”) в центре коллективного пользования “Лазерный фемтосекундный комплекс” ОИВТ РАН. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства нау-

ки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Manjappa M., Singh R.* Materials for Terahertz Optical Science and Technology // *Adv. Opt. Mater.* 2020. V. 8. P. 1901984.
2. *Ильина И.В., Ситников Д.С., Агранат М.Б.* Современное состояние исследований влияния терагерцевого излучения на живые биологические системы // *ТВТ.* 2018. Т. 56. № 5. С. 814.
3. *Peng Y., Shi Ch., Wu X., Zhu Y., Zhuang S.* Terahertz Imaging and Spectroscopy in Cancer Diagnostics: A Technical Review // *BME Frontiers.* 2020. V. 2020. P. 2547609.
4. *Feng Ch., Otani Ch.* Terahertz Spectroscopy Technology as an Innovative Technique for Food: Current State-of-the-Art Research Advances // *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 2020. <https://doi.org/10.1080/10408398.2020.1779649>
5. *Papaioannou E.Th., Beigang R.* THz Spintronic Emitters: a Review on Achievements and Future Challenges // *Nanophotonics.* 2021. V. 10. P. 1243.
6. *Jazbinsek M., Puc U., Abina A., Zidansek A.* Organic Crystals for THz Photonics // *Appl. Sci.* 2019. V. 9. P. 882.
7. *Vicario C., Ovchinnikov A., Ashitkov S., Agranat M., Fortov V., Hauri C.* Generation of 0.9-mJ THz Pulses in DSTMS Pumped by a Cr:Mg₂SiO₄ Laser // *Opt. Lett.* 2014. V. 39. P. 6632.
8. *Vicario C., Monoszlai B., Hauri C.P.* GV/m Single-Cycle Terahertz Fields from a Laser-Driven Large-Size Partitioned Organic Crystal // *Phys. Rev. Lett.* 2014. V. 112. P. 213901.
9. *Shalaby M., Hauri C.P.* Demonstration of a Low-frequency Three-dimensional Terahertz Bullet with Extreme Brightness // *Nat. Commun.* 2015. V. 6. P. 5976.
10. *Vicario C., Jazbinsek M., Ovchinnikov A., Chefonov O., Ashitkov S., Agranat M., Hauri C.* High Efficiency THz Generation in DSTMS, DAST and OH1 Pumped by Cr:forsterite Laser // *Opt. Express.* 2015. V. 23. P. 4573.
11. *Овчинников А.В., Чефонов О.В., Молчанов В.Я., Юшков К.Б., Викарио К., Хаури К.* Генерация перестраиваемого по частоте импульсного терагерцевого излучения хром-форстеритовой лазерной системой с акустооптическим управлением временным профилем импульсов // *Квантовая электроника.* 2016. V. 46. № 12. С. 1149.
12. *Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B., Fortov V.E., Jazbinsek M., Hauri C.P.* Generation of Strong-field Spectrally Tunable Terahertz Pulses // *Opt. Express.* 2020. V. 28. P. 33921.
13. *Fülöp J.A., Tzortzakis S., Kampfrath T.* Laser-Driven Strong-Field Terahertz Sources // *Adv. Opt. Mater.* 2020. V. 8. P. 1900681.
14. *Kampfrath T., Tanaka K., Nelson K.A.* Resonant and Nonresonant Control Over Matter and Light by Intense THz Transients // *Nat. Photonics.* 2013. V. 7. P. 680.
15. *Tanaka K., Hirori H., Nagai M.* THz Nonlinear Spectroscopy of Solids // *IEEE Trans. Sci. Technol.* 2011. V. 1. P. 301.
16. *Hebling J., Yeh K.-L., Hoffmann M.C., Nelson K.A.* High-power THz Generation, THz Nonlinear Optics, and THz Nonlinear Spectroscopy // *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 2008. V. 14. P. 345.
17. *Romashevskiy S.A., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B.* Subpicosecond Terahertz Radiation with an Electric Field above 1 MV/cm: Interaction with Condensed Matter and its Applications // *High Temp.* 2017. V. 55. № 6. P. 859.
18. *Овчинников А.В., Чефонов О.В., Агранат М.Б.* Разрушение тонких пленок свинца под воздействием сверхкоротких импульсов терагерцевого излучения // *ТВТ.* 2020. Т. 58. № 4. С. 641.
19. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Evlashin S.A., Agranat M.B.* Damage Threshold of Ni Thin Film by Terahertz Pulses Journal of Infrared // *Millimeter, and Terahertz Waves.* 2018. V. 39. Iss. 11. P. 1047.
20. *Agranat M.B., Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Kondratenko P.S., Ashitkov S.I., Fortov V.E.* Damage in a Thin Metal Film by High-Power Terahertz Radiation // *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 120. P. 085704.
21. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Evlashin S.A., Agranat M.B.* Degradation and Destruction of Thin Steel Films under Repeated Exposure to Ultrashort Pulses of THz Radiation // *Tech. Phys. Lett.* 2019. V. 45. № 6. P. 570.
22. *Chai X., Ropagnol X., Ovchinnikov A., Chefonov O., Ushakov A., Garcia-Rosas C.M., Isgandarov E., Agranat M., Ozaki T., Savel'ev A.* Observation of Cross-over from Intraband to Interband Nonlinear Terahertz Optics // *Opt. Lett.* 2018. V. 43. P. 5463.
23. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Romashevskiy S.A., Chai X., Ozaki T., Savel'ev A.B., Agranat M.B., Fortov V.E.* Giant Self-induced Transparency of Intense Few-cycle Terahertz Pulses in n-doped Silicon // *Opt. Lett.* 2017. V. 42. P. 4889.
24. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Agranat M.B., Fortov V.E., Efimenko E.S., Stepanov A.N., Savel'ev A.B.* Nonlinear Transfer of an Intense Few-cycle Terahertz Pulse Through Opaque n-doped Si // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 98. P. 165206.
25. *Hirori H., Shinokita K., Shirai M., Tani S., Kadoya Y., Tanaka K.* Extraordinary Carrier Multiplication Gated by a Picosecond Electric Field Pulse // *Nat. Commun.* 2011. V. 2. P. 594.
26. *Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Mishina E.D., Agranat M.B.* Second Harmonic Generation in the Bulk of Silicon Induced by an Electric Field of a High Power Terahertz Pulse // *Sci. Rep.* 2019. V. 9. P. 9753.
27. *Savel'ev A., Chefonov O., Ovchinnikov A., Rubtsov A., Shkurinov A., Zhu Y., Agranat M., Fortov V.* Transient Optical Non-linearity in p-Si Induced by a Few Cycle Extreme THz Field // *Opt. Express.* 2021. V. 29. P. 5730.
28. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Agranat M.B., Stepanov A.N.* Terahertz Beam Spot Size Measurements by a CCD Camera // *Opt. Lett.* 2019. V. 44. P. 4099.
29. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Sitnikov D.S., Agranat M.B.* Focal Spot Imaging of Terahertz Subpicosecond Pulse by THz-field-induced Optical Second Harmonic Generation // *High Temp.* 2019. V. 57. № 1. P. 137.
30. *Kampfrath T., Sell A., Klatt G., Pashkin A., Mahrlein S., Dekorsy T., Wolf M., Fiebig M., Leitenstorfer A., Huber R.*

- Coherent Terahertz Control of Antiferromagnetic Spin Waves // Nat. Photonics. 2011. V. 5. P. 31.
31. *Baierl S., Mentink J.H., Hohenleutner M., Braun L., Do T.-M., Lange C., Sell A., Fiebig M., Woltersdorf G., Kampfrath T., Huber R.* Terahertz-Driven Nonlinear Spin Response of Antiferromagnetic Nickel Oxide // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 117. P. 197201.
 32. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Hauri C.P., Agranat M.B.* Broadband and Narrowband Laser-based Terahertz Source and its Application for Resonant and Non-resonant Excitation of Antiferromagnetic Modes in NiO // Opt. Express. 2019. V. 27. P. 27273.
 33. *Hoffmann M.C., Brandt N.C., Hwang H.Y., Yeh K., Nelson K.A.* Terahertz Kerr Effect // Appl. Phys. Lett. 2009. V. 95. P. 231105.
 34. *Zalkovskij M., Strikwerda A.C., Iwaszczuk K., Popescu A., Savastru D., Malureanu R., Lavrinenko A.V., Jepsen P.U.* Terahertz-induced Kerr Effect in Amorphous Chalcogenide Glasses // App. Phys. Lett. 2013. V. 103. P. 221102.
 35. *Cornet M., Degert J., Abraham E., Freysz E.* Terahertz Kerr Effect in Gallium Phosphide Crystal // J. Opt. Soc. Am. B. 2014. V. 31. P. 1648.
 36. *Sajadi M., Wolf M., Kampfrath T.* Terahertz-field-induced Optical Birefringence in Common Window and Substrate Materials // Opt. Express. 2015. V. 23. P. 28985.
 37. *Vicario C., Shalaby M., Hauri C.P.* Subcycle Extreme Nonlinearities in GaP Induced by an Ultrastrong Terahertz Field // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 118. P. 083901.
 38. *Shalaby M., Vicario C., Hauri C.P.* Extreme Nonlinear Terahertz Electro-optics in Diamond for Ultrafast Pulse Switching // APL Photonics. 2017. V. 2. P. 036106.
 39. *Tan Y., Zhao H., Zhang R., Zhang C., Zhao Y., Zhang L.* Ultrafast Optical Pulse Polarization Modulation Based on the Terahertz-induced Kerr Effect in Low-density Polyethylene // Opt. Express. 2020. V. 28. P. 35330.
 40. *Lin H., Ogbuu O., Liu J., Zhang L., Michel J., Hu J.* Breaking the Energy-Bandwidth Limit of Electrooptic Modulators: Theory and a Device Proposal // J. Lightwave Technol. 2013. V. 31. P. 4029.
 41. *Агранат М.Б., Ашитков С.И., Иванов А.А., Конященко А.В., Овчинников А.В., Фортвов В.Е.* Тераваттная фемтосекундная лазерная система на хромфорстерите // Квантовая электроника. 2004. Т. 34. № 6. С. 506.
 42. *Sitnikov D.S., Romashevskiy S.A., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Savel'ev A.B., Agranat M.B.* Estimation of THz Field Strength by an Electro-optic Sampling Technique Using Arbitrary Long Gating Pulses // Laser Phys. Lett. 2019. V. 16. P. 115302.
 43. *Casalbuoni S., Schlarb H., Schmidt B., Schmäser P., Steffen B., Winter A.* Numerical Studies on the Electro-optic Detection of Femtosecond Electron Bunches // Phys. Rev. ST Accel. Beams. 2008. V. 11. P. 072802.
 44. *Adachi S.* Optical Dispersion Relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, $Al_xGa_{1-x}As$, and $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ // J. Appl. Phys. 1989. V. 66. P. 6030.
 45. *Schinke C., Peest P.C., Schmidt J., Brendel R., Bothe K., Vogt M.R., Kröger I., Winter S., Schirmacher A., Lim S., Nguyen H.T., MacDonald D.* Uncertainty Analysis for the Coefficient of Band-to-band Absorption of Crystalline Silicon // AIP Adv. 2015. V. 5. P. 067168.
 46. *Boyd R.W.* Nonlinear Optics. 3rd ed. Acad. Press, 2008. 640 p.

УДК 536.7

УНИВЕРСАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ КРИТИЧЕСКОЙ И СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ОБЛАСТЕЙ

© 2021 г. Е. М. Апфельбаум¹, В. С. Воробьев¹, *¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: vrbv@mail.ru

Поступила в редакцию 26.03.2021 г.

После доработки 30.05.2021 г.

Принята к публикации 28.09.2021 г.

Построено универсальное уравнение состояния в околокритической и в закритической областях. Для этого модифицирован вириальный ряд путем разложения давления в ряд по степеням плотности вдоль прямой единичного фактора сжимаемости, лежащей в закритической области. Старшие коэффициенты этого модифицированного разложения удается выразить через второй коэффициент и получить универсальное уравнение состояния, которое включает в себя величины, определяемые видом потенциала (второй вириальный коэффициент, бойлевские и критические параметры), и не содержит эмпирических констант. Критические параметры, полученные с помощью этого уравнения состояния, для трех модельных систем и вещества (метан) хорошо согласуются с данными численного моделирования и экспериментом.

DOI: 10.31857/S0040364421060016

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию поведения веществ в около- или закритических состояниях (сверхкритические флюиды – СКФ), представляющих нечто среднее между жидкостью и газом, вызван их специфическими свойствами. Среди них важно отметить лишь то, что они могут сжиматься как газы (обычные жидкости практически несжимаемы) и в то же время способны растворять твердые вещества, что газам не свойственно [1]. Сама критическая точка (КТ), определяющая границу СКФ, является фундаментальным физическим параметром вещества, не менее важным, чем точки плавления или кипения [2]. Поэтому измерения и расчеты как термодинамических свойств вещества в СКФ, так и критических параметров являются одной из основных задач теплофизики с конца 19-го века, начиная со знаменитого уравнения Ван-дер-Ваальса [3]. И к настоящему времени для многих газов и жидкостей на основе этих исследований были созданы базы данных и построены так называемые референтные уравнения состояния (РУРС), например, [4]. Очевидно, что закритическое состояние и КТ находились в сфере интересов В.Е. Фортова на протяжении практически всей его научной деятельности. Свидетельством этому является обзор по координатам КТ, написанный им с его коллегами более 40 лет назад [5], а также многочисленные монографии и обзоры по уравнениям состояния самых различных систем в широком диапазоне парамет-

ров, которые создавались ими до самого недавнего времени (см., например, [6–9]). Несмотря на прогресс в этой области, стоит отметить, что даже РУРС носят сугубо эмпирический характер. Поэтому область их применения по плотностям, температурам, давлениям и т.д. ограничена только тем диапазоном, где имеются надежные измерения, данные которых и используются при расчете эмпирических констант. Для расчетов вне этого диапазона необходимо экстраполировать данные, полученные по этим эмпирическим уравнениям, а такие экстраполяции могут приводить к серьезным ошибкам, если уравнение состояния не имеет теоретической основы. Кроме этого, можно использовать различные соотношения подобия [10, 11]. Такой подход имел место в обзоре [5]. Соотношения подобия очень удобны, но при построении уравнения состояния (УРС) их тоже желательно объединять с более строгими теоретическими методами. Именно в этом и состоит цель настоящей работы.

Одним из строго обоснованных и общих теоретических методов для построения УРС является вириальное разложение. Оно абсолютно точно в области сходимости этого разложения [2]. Более того, возможно построить и аналитическое продолжение вириального ряда за пределы этой области [12]. Но на пути этого подхода встают серьезные трудности, связанные с вычислением старших вириальных коэффициентов, их нерегулярным поведением, а также плохой сходимостью вириального ряда. Тем не менее за последнее время наметился определен-

ный прогресс при вычислении вириальных коэффициентов высокого порядка. Так, например, для системы частиц, описываемых потенциалом Леннарда–Джонса (ЛД), в настоящее время вычислено 16 коэффициентов [13]. Но погрешность старших (начиная с 10-го) все еще высока. Обычно стандартный вириальный ряд для давления строится в виде разложения по степеням стремящейся к нулю плотности и первый его член дает давление идеального газа. Однако при повышении плотности для описания СКФ такое разложение малоэффективно. Поэтому представляется более целесообразным построить разложение для другой линии, вдоль которой давление также равно давлению идеального газа (ЛИГ). Это линия для единичного фактора сжимаемости, представляющая собой в координатах плотность–температура прямую (для подавляющего числа веществ и модельных систем), проходящую в закритической области. Описание такого модифицированного вириального разложения приведено в [14]. В настоящей работе на основе этого подхода строится уравнение состояния для околокритической и сверхкритической областей. Это уравнение является единообразным для модельных систем и реальных веществ и определяется видом второго вириального коэффициента, критическими и бойлевскими параметрами.

Следует уточнить, что далее рассматриваются только так называемые простые жидкости. К таковым относятся однокомпонентные системы, в которых частицы взаимодействуют в соответствии с парно-аддитивными центрально-симметричными потенциалами [1, 2]. Примеры таких потенциалов даны ниже. Многокомпонентные системы с кулоновским взаимодействием и системы с активными химическими реакциями требуют отдельного рассмотрения, которое находится за рамками настоящего исследования. В первую очередь предметом рассмотрения данной работы являются околокритические и закритические области фазовой диаграммы (по температуре), где, как и ожидается, предлагаемый подход будет наиболее точен.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ВИРИАЛЬНОГО РЯДА

Рассмотрим систему частиц, взаимодействующих по известному парному потенциалу с характерными энергией ϵ и длиной r_0 . Тогда плотность, температура, давление и s -й вириальный коэффициент (ВК) обезразмериваются с помощью соотношений $n \rightarrow nr_0^3$, $T \rightarrow T/\epsilon$, $P \rightarrow Pr_0^3/\epsilon$, $B_s \rightarrow B_s/r_0^{3s-3}$. Использование размерных единиц оговаривается отдельно.

Вириальное разложение, представляющее бесконечный ряд по степеням плотности, имеет вид [2]

$$P/(nT) = 1 + B_2(T)n + B_3(T)n^2 + \dots + B_s(T)n^{s-1} + \dots, \quad s \geq 4. \quad (1)$$

Здесь P , n , T , $B_s(T)$ — давление, плотность, температура и s -й вириальный коэффициент. Ряд (1) имеет плохую сходимость. Чтобы получить достаточно точное уравнение состояния, нужно учесть порядка десяти или даже более ВК. Для заданного потенциала взаимодействия ВК могут быть рассчитаны методом кластерных интегралов [2]. Однако этим методом относительно просто рассчитать второй и третий ВК. Коэффициенты более высокого порядка требуют существенно больших затрат компьютерного времени. Так, система частиц, взаимодействующих по потенциалу ЛД, используется для моделирования реальных веществ и для нее четвертый и пятый вириальные коэффициенты были вычислены более пятидесяти лет назад. Более старшие ВК появились совсем недавно [13]. В настоящее время вычислено 16 ВК для этой системы. Затем для коэффициентов, начиная с четвертого по девятый, была разработана аналитическая аппроксимация этих данных, справедливая в широком диапазоне температур [12, 13]. Для остальных ВК имеется только ряд температурных точек. Для других модельных систем ситуация во многом сходная. Методом кластерных интегралов рассчитано примерно 10 первых ВК, причем число доступных температурных точек уменьшается с увеличением номера коэффициента, а ошибка увеличивается. Результаты вычислений ВК для потенциала прямоугольной ямы представлены в [15, 16], для потенциала Морзе — в [17], а для притягивательного потенциала Юкавы с твердым ядром — в [18].

Результаты расчетов в вышеуказанных статьях показали, что ВК обнаруживают крайне нерегулярное поведение с изменением их номера. Это не позволяет установить какой-либо закономерности для прогнозирования их поведения при больших номерах s . Поэтому использование разложения (1), построенного при стремящейся к нулю плотности, малоэффективно для закритического флюида при увеличении плотности. Представляется более целесообразным использовать прямую линию для единичного фактора сжимаемости, лежащую в закритической области, вдоль которой давление равно давлению идеального газа [19]. Для многих веществ она обладает весьма интересным свойством, а именно для жидкостей, газов и сверхкритического состояния линия является абсолютно прямой на плоскости плотность–температура во всем диапазоне плотностей вплоть до линии кристаллизации. Более подробно о ее свойствах изложено в [10]. Здесь потребуются тот факт, что уравнение такой прямой линии можно записать в виде

$$n/n_B + T/T_B = 1, \tag{2}$$

где T_B и n_B – температура и плотность в точке пересечения с осью координат. Применение вириального разложения [10] показывает, что T_B – это не что иное, как температура Бойля, т.е. $B_2(T_B) = 0$. Плотность n_B (далее бойлевская плотность) также выражается через второй и третий вириальные коэффициенты:

$$n_B = \frac{T_B \left(\frac{dB_2}{dT} \right) \Big|_{T=T_B}}{B_3(T_B)}. \tag{3}$$

Значения n_B обычно близки к твердотельным [10], т.е. в этой области вириальный ряд уже может расходиться. Тем не менее ЛИГ продолжает выражаться уравнением (2) с бойлевскими параметрами, определяемыми вириальными коэффициентами.

Для дальнейшего удобно ввести эффективную температуру – аргумент ВК, в которой выделен комплекс $(T/T_B + n/n_B)$, характеризующий ЛИГ. Эта температура определяется как

$$T^* = T_B(T/T_B + n/n_B) = T + an, \quad a = T_B/n_B.$$

Для ЛД величины $T_B = 3.418$ и $n_B = 1.14$, а их отношение равно почти 3. Вдоль ЛИГ, когда справедливо уравнение (2), эффективная температура $T^* = T_B$.

Для построения УРС с учетом ЛИГ используется тождество

$$B_s(T^* - x)_{x=an} = B_s(T + an - x)_{x=an} \equiv B_s(T). \tag{4}$$

Теперь правая часть уравнения (4) раскладывается в ряд по степеням x , а затем x полагается равным an . В результате для любого ВК получается ряд

$$B_s(T) = B_s(T^*) - \frac{dB_s(T^*)}{dT^*} na + \frac{1}{2} \frac{d^2 B_s(T^*)}{dT^{*2}} (na)^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3 B_s(T^*)}{dT^{*3}} (na)^3 + \dots$$

Аналогичным образом раскладываются в ряды все вириальные коэффициенты, и получившиеся выражения подставляются в уравнение (1). Затем группируются слагаемые с одинаковыми степенями n . В результате получается обобщенный вириальный ряд вида

$$P/nT = 1 + D_2(T^*) + nD_3(T^*) + n^2 D_4(T^*) + n^3 D_5(T^*) + \dots, \tag{5}$$

где модифицированные вириальные коэффициенты (МВК) D_2, D_3, D_4, \dots связаны с обычными B_2, B_3, B_4, \dots соотношениями

$$\begin{aligned} D_2(T^*) &= B_2(T^*), \\ D_3(T^*) &= B_3(T^*) - a \frac{dB_2(T^*)}{dT^*}, \\ D_4(T^*) &= B_4(T^*) - a \frac{dB_3(T^*)}{dT^*} + \frac{a^2}{2} \frac{d^2 B_2(T^*)}{dT^{*2}}, \\ D_5(T^*) &= B_5(T^*) - a \frac{dB_4(T^*)}{dT^*} + \frac{a^2}{2} \frac{d^2 B_3(T^*)}{dT^{*2}} - \frac{a^3}{6} \frac{d^3 B_2(T^*)}{dT^{*3}}, \\ &\dots \dots \dots \\ D_s(T^*) &= \sum_{k=0}^{s-2} (-1)^k \frac{a^k}{k!} \frac{d^k B_{s-k}(T^*)}{dT^{*k}}. \end{aligned} \tag{6}$$

Ряд, состоящий из крайних правых членов в строках уравнений (6), содержащих B_2 и производные от B_2 , суммируется

$$B_2(T^*) - a \frac{dB_2(T^*)}{dT^*} + \frac{a^2}{2} \frac{d^2 B_2(T^*)}{dT^{*2}} - \frac{a^3}{6} \frac{d^3 B_2(T^*)}{dT^{*3}} + \dots = B_2(T^* - a) = B_2(T).$$

Аналогично суммируются слагаемые с B_3 и его производными. Продолжая эту процедуру для последующих ВК, можно убедиться, что ряды (1) и (5) эквивалентны. Следует отметить, что перестроенный ряд (5) по структуре является более сложным, чем простой степенной ряд, поскольку коэффициенты этого перестроенного ряда зависят и от температуры, и от плотности.

ВК для ЛД были получены в [13]. Для первых восьми из них построена надежная аналитическая аппроксимация, которая позволяет найти по уравнению (6) МВК для $s = 2, 3, \dots, 8$. Хотя МВК зависят и от плотности, и от температуры, что делает их сложнее, чем ВК, их поведение оказывается более регулярным. Чтобы проиллюстрировать это, на рис. 1 представлена зависимость МВК как функция от $B_2(T^*)$.

Первое, на что следует обратить внимание, – МВК, в отличие от ВК, представляют гладкие функции. (Далее звездочка у температуры опускается там, где это не приводит к путанице.) Второе – при температуре Бойля, когда $B_2(T_B) = 0$, их значения становятся очень малыми. В масштабе рис. 1 при $B_2(T_B) = 0$ все кривые практически проходят через нулевую точку.

Коэффициент $D_2(T_B) = B_2(T_B) = 0$ по определению температуры Бойля. Равенство коэффициента $D_3(T_B) = 0$ вытекает из второй формулы уравнений (6) и уравнения (3). Действительно, после подстановки (3) в выражение для $D_3(T_B)$ получается равенство

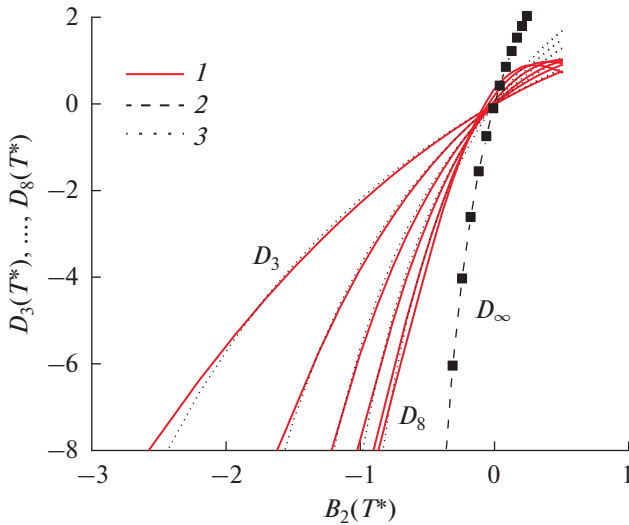


Рис. 1. Зависимости модифицированных вириальных коэффициентов от второго вириального коэффициента: 1 – D_3, D_4, \dots, D_8 , рассчитанные по (6); 2 – D_∞ ; 3 – расчет по уравнению (9).

$$D_3(T_B) = B_3(T_B) - \frac{T_B}{n_B} \left(\frac{dB_2}{dT} \right)_{T=T_B} = 0.$$

Значения ВК более высокого порядка в точке Бойля равны соответственно $D_4 = -6.7 \times 10^{-4}$, $D_5 = -1.6 \times 10^{-2}$, $D_6 = 5.3 \times 10^{-2}$, $D_7 = 5.3 \times 10^{-3}$, $D_8 = 0.033$.

При $B_2(T) < B_2(T_B)$ с увеличением номера коэффициента соответствующие кривые сгущаются и стремятся к некоторой предельной кривой $D_\infty(T)$. Она была найдена в работе [14] и приведена на рис. 1 штриховой линией с символами.

При $B_2(T) > B_2(T_B)$ МВК достигают максимума и затем начинают уменьшаться, стремясь к нулю. Для ВК с малыми номерами этот максимум лежит за рамками рис. 1. Однако с увеличением номера ВК максимум смещается в область малых температур, и он становится заметным, например, для D_7 и D_8 .

По форме кривые на рис. 1 достаточно схожи с B_2 . Более того, их можно совместить, смещая вверх и вправо на соответствующее расстояние. Это означает, что

$$D_2(T) = B_2(T), \quad D_3 \approx B_2(T - T_3) + a_3, \\ D_4 \approx B_2(T - T_4) + a_4, \dots, \quad D_s \approx B_2(T - T_s) + a_s,$$

где a_3, a_4, \dots, a_s и T_3, T_4, \dots, T_s – некоторые постоянные. Значения a_3, a_4, \dots, a_s находились из условия обращения в нуль МВК вдоль ЛИГ. Это дает

$$a_s = -B_2(T_B - T_s), \\ D_s \approx B_2(T - T_s) - B_2(T_B - T_s). \tag{7}$$

Далее величина смещения T_s находилась графически из условия наилучшего совпадения функций (6) и (7). Найденные таким образом значения T_s приведены в табл. 1.

Пунктиром на рис. 1 показаны коэффициенты $D_s(T)$, рассчитанные по приближенным формулам (7). Как видно, аппроксимация (7) адекватно соответствует поведению первых восьми МВК. Однако ее можно экстраполировать на МВК более высокого порядка, если построить зависимость $T_s = f(1/s)$. Такая зависимость представлена на рис. 2.

Зависимость T_s от s аппроксимируется прямой, уравнение которой имеет вид

$$T_s = A(1 - 2/s), \quad A = 2.25.$$

Подставляя это уравнение в (7), получаем аппроксимацию МВК в виде

$$D_s(T) \approx B_2(T - A(1 - 2/s)) - \\ - B_2(T_B - A(1 - 2/s)), \quad s = 2, 3, \dots$$

Отсюда легко найти значение МВК при $s \rightarrow \infty$:

$$D_\infty(T) = B_2(T - A) - B_2(T_B - A).$$

Данная зависимость показана на рис. 1 штриховой кривой с символами и соответствует линии $D_\infty(T)$, ранее полученной в работе [14].

Окончательно МВК принимает вид

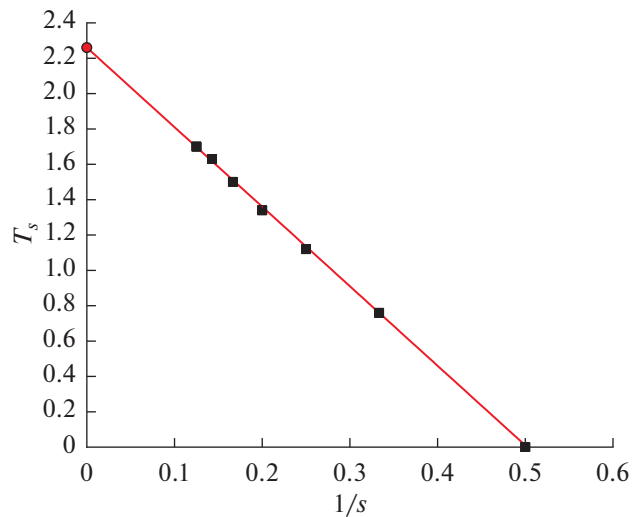


Рис. 2. Зависимость параметра T_s в (7) от обратного номера коэффициента $1/s$; красный кружок – значение T_s при $s \rightarrow \infty$.

Таблица 1. Зависимость параметра T_s в (7) от номера коэффициента s

s	2	3	4	5	6	7	8	∞
T_s	0	0.76	1.12	1.34	1.5	1.65	1.7	2.25

$$D_s(T, n) = B_2 \left(T_B \left(\frac{T}{T_B} + \frac{n}{n_B} - \frac{s-2}{s} \frac{A}{T_B} \right) \right) - B_2 \left(T_B \left(1 - \frac{s-2}{s} \frac{A}{T_B} \right) \right). \quad (8)$$

Величина $\frac{A}{T_B} = \frac{2.25}{3.418} = 0.658$ в точности соответствует известному критическому инварианту [10] для ЛД, который равен

$$I_c = \frac{T_c}{T_B} + \frac{n_c}{n_B} = \frac{1.32}{3.418} + \frac{0.31}{1.14} = 0.658. \quad (9)$$

Как показано в работах [10, 11], для многих модельных систем и подавляющего числа реальных веществ величина $I_c \approx 0.6-0.8$. Это дает основание переписать уравнение (8) в виде

$$D_s(T, n) = B_2 \left(T_B \left(I(T, n) - \frac{s-2}{s} I_c \right) \right) - B_2 \left(T_B \left(1 - \frac{s-2}{s} I_c \right) \right), \quad (10)$$

где $I(T, n) = \frac{T}{T_B} + \frac{n}{n_B}$, $I_c = \frac{T_c}{T_B} + \frac{n_c}{n_B}$.

Из (10) следует, что вдоль ЛИГ, когда $I(T, n) = 1$, давление равно давлению идеального газа.

Уравнение (10) справедливо, если аргументы у B_2 положительны, т.е.

$$I \geq \frac{s-2}{s} I_c = 0.658 \frac{s-2}{s}. \quad (11)$$

На плоскости $n-T$ это неравенство описывает семейство прямых, параллельных линии $I(T, n) = 1$ (ЛИГ) и смещенных в область меньших значений температуры и плотности. Величина смещения меняется от нуля для $s = 2$ до 0.658 при $s \rightarrow \infty$. Тем самым возникает ограничение применимости настоящего подхода для малых плотностей и температур. Однако это ограничение возникает вне области критических и сверхкритических флюидов и поэтому не представляет интереса для данной работы.

После всех преобразований давление имеет вид

$$P(n, T) = nT \left\{ 1 + \sum_{s=2}^{\infty} n^{s-1} \left[B_2 \left(T_B \left(I - I_c \frac{s-2}{s} \right) \right) - B_2 \left(T_B \left(1 - I_c \frac{s-2}{s} \right) \right) \right] \right\}. \quad (12)$$

Вдоль ЛИГ $I(T, n) = 1$, поэтому каждое слагаемое в сумме обращается в нуль. Давление становится равным давлению идеального газа. В критической точке МВК принимают вид

$$D_s(T_c, n_c) = B_2 \left(T_B \left(\frac{2I_c}{s} \right) \right) - B_2 \left(T_B \left(1 - I_c \frac{s-2}{s} \right) \right). \quad (13)$$

Учитывая (9), правую часть (13) можно переписать как $B_2(2T_B 0.658/s) - B_2(2T_B(0.171 + 0.658/s))$.

Нужно заметить, что в (12) из дополнительных параметров входит только функциональная форма $B_2(T)$. Она же определяет значение T_B . Сам же коэффициент $B_2(T)$ легко вычисляется для любой системы с заданным парным потенциалом взаимодействия как интеграл от функции Майера [2]. Поэтому сначала следует проверить (12) именно для таких систем.

СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ РАСЧЕТОВ ДЛЯ СИСТЕМЫ ЛЕННАРДА–ДЖОНСА

Система ЛД является основной тестовой системой для численных расчетов в статистической физике классических систем уже более полувека [2]. Поэтому для ЛД также построены референтные уравнения состояния аналогично тому, как это было сделано для реальных веществ [4]. Одно из наиболее точных и недавних таких РУРС, полностью описывающее численные данные по термодинамике ЛД, было построено в [20]. Оно использовалось в настоящей работе для проверки уравнения (12). Критические параметры для ЛД указаны в табл. 2. На рис. 3 представлены изотермы давления, полученные в данной работе согласно уравнению (12), и изотермы из работы [20] в приведенных к критическим координатах.

Как видно, сверхкритические изотермы с $T = 1.5$ и 2.5 хорошо согласуются с данными [20]. Критическая изотерма данной работы несколько расходится с численными данными в области высоких плотностей. При низких плотностях она обрывается в силу нарушения неравенства (11).

СРАВНЕНИЕ С ДРУГИМИ МОДЕЛЬНЫМИ СИСТЕМАМИ

Рассмотрим теперь как уравнение (12) работает для систем с потенциалами, отличными от ЛД. В качестве таковых рассмотрим упомянутые выше потенциалы прямоугольной ямы и Юкавы с твердым ядром.

Потенциал прямоугольной ямы имеет вид

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma, \\ -\varepsilon, & \sigma < r < \lambda\sigma, \\ 0, & r \geq \lambda\sigma, \end{cases} \quad (14)$$

где σ – диаметр твердой сердцевины; λ – параметр, характеризующий протяженность потенциальной ямы; ε – глубина ямы притяжения. Второй и третий вириальные коэффициенты вычисляются аналитически и приведены, например, в [21]. Все они зависят от параметра λ . В [22] было отмечено, что при слишком малых или слишком больших λ линия единичного фактора сжимаемости искривляется. Здесь выбрано значение $\lambda = 1.75$, при котором эта линия является прямой.

Рассматриваемый потенциал Юкавы имеет вид

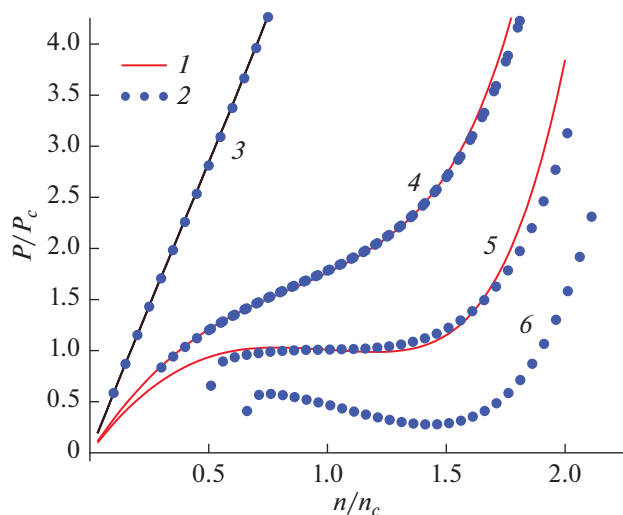


Рис. 3. Изотермы для ЛД-системы: 1 – численные данные [20], 2 – результаты расчетов по (11) при различных значениях T : 3 – $T = 2.5$, 4 – 1.5, 5 – T_c , 6 – 1.17.

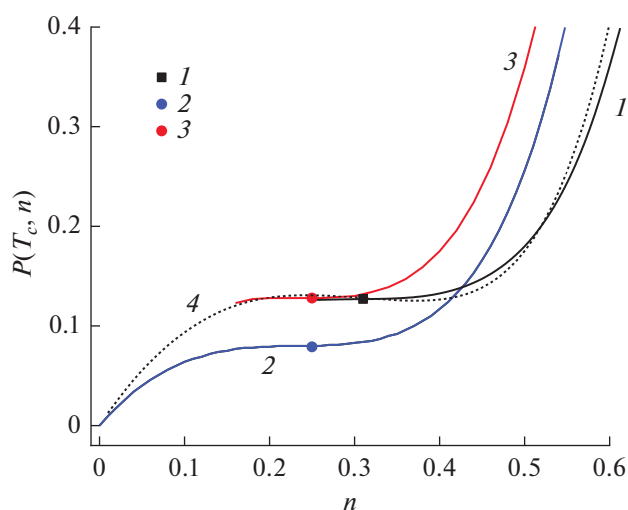


Рис. 4. Критические изотермы, полученные в данной работе: 1 – ЛД, $T_c = 1.308$; 2 – притягивательный потенциал Юкавы с твердым ядром, $T_c = 1.0$; 3 – потенциал прямоугольной ямы, $T_c = 1.808$; 4 – критическая изотерма по данным [20], $T_c = 1.32$; символы – критические точки.

$$\Phi(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma, \\ -(\epsilon\sigma/r)\exp[-k(r-\sigma)], & r \geq \sigma \end{cases} \quad (15)$$

При $k = 1.8$ ЛИГ остается прямой, как показали расчеты в [22]. Там же были рассчитаны и приведены бойлевские параметры для целого ряда модельных потенциалов, включая (14), (15). Координаты критической точки для потенциала прямоугольной ямы были численно рассчитаны в [23], а для потенциала Юкавы – в [24]. Эти параметры представлены в табл. 2.

Результаты расчета критических изотерм и критических точек приведены на рис. 4 и в табл. 2. Как видно, положение критических точек по результатам численного моделирования находится в хорошем соответствии с рассчитанными в данной работе критическими изотермами. Кроме того, в табл. 2 представлены значения ΔH – безразмерная энтальпия парообразования в тройной точке, деленная на число частиц, Z_c – фактор сжимаемости в критической точке, а также ряд безразмерных парамет-

ров, характеризующих асимметрию бинодали и используемых в различных законах подобия, (см., например, [25]). Для ЛД ΔH рассчитывается прямо по РУРС [20]. Для других двух систем ΔH не представлена в явном виде, но в [23, 24] есть зависимости давления P и разности удельных объемов фаз Δv от температуры T на бинодали. Это позволило получить ΔH по уравнению Клапейрона–Клаузиуса [2], как $\Delta H = TP'\Delta v$, где $P' = dP/dT$ вдоль бинодали. Значения температур в тройной точке T_{tr} для этих систем: $T_{tr} = 0.661$ – ЛД [20], $T_{tr} = 0.9$ – потенциал Юкавы [24], $T_{tr} = 1.0$ – прямоугольная яма [23].

СРАВНЕНИЕ С КРИТИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ МЕТАНА

Рассмотрим теперь, как работает уравнение (12) для реальной системы. В отличие от модельных си-

Таблица 2. Критические и бойлевские параметры для рассмотренных модельных систем, фактор сжимаемости в критической точке Z_c , энтальпия парообразования в тройной точке ΔH и безразмерные параметры, характеризующие асимметрию бинодали

Система		T_c	n_c	P_c	T_B	n_B	Z_c	ΔH	n_c/n_B	$T_c/\Delta H$	$T_B/\Delta H$
ЛД	МВК	1.308	0.31	0.127	3.418	1.14	0.313		0.272		
	[20]	1.32	0.31	0.13			0.318	6.983	0.272	0.189	0.490
Потенциал Юкавы, $k = 1.8$	МВК	1.0	0.25	0.079	2.77	1.2	0.316		0.208		
	[24]	1.177	0.265	0.112			0.359	7.642	0.221	0.154	0.362
Прямоугольной ямы, $\lambda = 1.75$	МВК	1.808	0.25	0.128	4.842	1.0	0.283		0.25		
	[23]	1.81	0.26	0.112			0.238	18.47	0.26	0.098	0.262

стем здесь нет явно заданного потенциала взаимодействия, однако для многих веществ второй вириальный коэффициент может быть определен из экспериментальных данных при низких плотностях [2]. Благородные газы в рассматриваемой области неплохо описываются потенциалом ЛД. И для них можно ожидать, что уравнение (1) будет вести себя, как и для ЛД. Поэтому интересно рассмотреть вещество, не описываемое потенциалом ЛД, но для которого есть достаточно точные данные измерений и ЛИГ – прямая. Таковым был выбран метан CH_4 . Для метана $B_2(T)$ в температурном диапазоне 115–670 К приведен в [26], где для него построена аппроксимирующая формула. Эти данные позволяют найти температуру Бойля $T_B = 509.4$, что практически совпадает со значением 510 К, которое было получено экстраполяцией ЛИГ к нулевой температуре [11]. Значения критических параметров для CH_4 таковы $T_c = 190.6$ К, $n_c = 0.163$ г/см³, $P_c = 46$ атм [4]. Полагая в (9) $I_c = 0.67$, как и для многих других веществ, получаем $n_B = 0.55$ г/см³, что тоже очень мало отличается от значения 0.57 г/см³, полученного экстраполяцией ЛИГ к нулевым плотностям [11]. Уравнение (12) в абсолютных единицах принимает вид

$$P(T, n) = \frac{nkT}{M} Z(n, T, b), \quad (16)$$

где k – постоянная Больцмана, M – масса атома (для метана $M = 6.64 \times 10^{-24}$ г).

Фактор сжимаемости

$$I(T, n, b) = 1 + \sum_{s=2}^{\infty} \left(\frac{n}{b}\right)^{s-1} \times \left[B_2 \left(T_B \left(1 - I_c \frac{s-2}{s} \right) \right) - B_2 \left(T_B \left(1 - I_c \frac{s-2}{s} \right) \right) \right]. \quad (17)$$

В (17) введена плотность b , связанная с исключенным объемом атома. В ЛД эта область определяется расстоянием, на котором отталкивательная ветвь потенциала пересекает ось абсцисс. Для реальных веществ она зависит от размера атома и по порядку величины равна $b \sim M/R^3$, где R – размер атома. Ниже используется значение $b = 0.87$ г/см³, чему соответствует $R \sim 2$ Å. Эта величина несколько больше длины углерод-водородной связи в молекуле метана, равной 1.54 Å.

На рис. 5 по формуле (16) построена критическая изотерма 2 для метана с вышеперечисленными параметрами и значением $b = 0.87$ г/см³. Соответствующие критические параметры, полученные в подходе данной работы: $T_c = 208.9$ К, $n_c = 0.143$ г/см³, $P_c = 40$ атм. Здесь же нанесена соответствующая экспериментальная изотерма 1, построенная по данным [4]. Символами отмечены положения критических точек. Как видно, имеет место согласие между кривыми 1 и 2. Расхождение

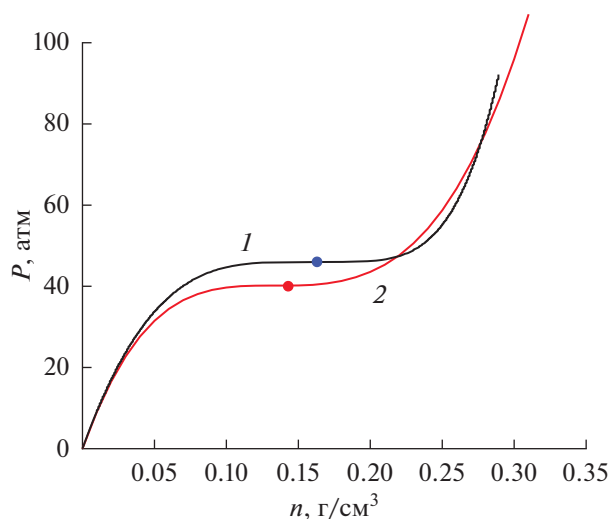


Рис. 5. Критические изотермы для метана: 1 – данные [4], $T_c = 190.6$ К; 2 – результаты расчета настоящей работы, $T_c = 208.9$; символы – критические точки.

лежит, по-видимому, в пределах точности методов, которые использовались при расчете этих кривых.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построено единообразное уравнение состояния в околкритической или в закритической области. Оно было использовано для реального вещества (метана) и трех модельных систем. Это уравнение включает в себя физически обоснованные и определяемые видом потенциала величины (второй вириальный коэффициент, бойлевские и критические параметры) и не содержит каких-либо других эмпирических констант. Формально применимость рассматриваемого уравнения ограничена со стороны области с низкой плотностью, неудовлетворяющей условию (11). Однако эта область по свойствам близка к идеальному газу и не представляет особого интереса для критических или сверхкритических флюидов. Критические параметры, рассчитанные с помощью рассматриваемого уравнения, находятся в согласии с литературными данными. Заметим также, что интегрирование уравнения (12) по плотности позволяет получить выражение для свободной энергии, а дифференцирование последней по температуре – выражения для внутренней энергии и энтропии [2]. Обычные вириальные коэффициенты зависят только от температуры, поэтому для обычного вириального ряда такое интегрирование осуществляется аналитически. Но МВК зависят как от температуры, так и от плотности, поэтому для (12) данная процедура не приведет к простому аналитическому выражению. Тем не менее подобное исследование можно провести в дальнейшем. Кроме того, планируется рассмотреть, как предложенное уравнение ведет себя и для других модельных систем. Это могут быть те же си-

стемы, но в двухмерном пространстве, для которых линия $Z = 1$ тоже прямая [27], или модифицированная однокомпонентная модель плазмы классических ионов на однородно-сжимаемом фоне идеального газа электронов, рассмотренная в [28].

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бражкин В.В., Ляпин А.Г., Рыжов В.Н., Траченко К., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н. Где находится область сверхкритического флюида на фазовой диаграмме? // УФН. 2012. Т. 182. № 11. С. 1137.
2. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978.
3. Van der Waals J.D. The Law of Corresponding States for Different Substances // KNAW Proc. 1913. V. 15. P. 971.
4. Lemmon E.W., McLinden M.O., Friend D.G. NIST Standard Reference Database #69. In NIST Chemistry WebBook / Eds. Linstrom P.J., Mallard W.G. Gaithersburg, MD: NIST, 2004. <http://webbook.nist.gov>
5. Фортвов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А. Оценка параметров критической точки // ТВТ. 1975. Т. 13. № 5. С. 984.
6. Фортвов В.Е., Иосилевский И.Л., Старостин А.Н. Термодинамика низкотемпературной плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. I / Под ред. Фортвова В.Е. М.: Наука, 2000. С. 267.
7. Фортвов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2004.
8. Фортвов В.Е., Ломоносов И.В. Я.Б. Зельдович и проблемы уравнений состояния в экстремальных условиях // УФН. 2013. Т. 184. № 3. С. 231.
9. Фортвов В.Е. Термодинамика динамических воздействий на вещество. М.: Физматлит, 2019.
10. Воробьев В.С., Апфельбаум Е.М. Обобщенные законы подобия на основе некоторых следствий уравнения Ван-дер-Ваальса // ТВТ. 2016. Т. 54. № 2. С. 186.
11. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Systematization of the Critical Parameters of Substances due to Their Connection with Heat of Evaporation and Boyle Temperature // Int. J. Thermophys. 2020. V. 41. № 1. P. 8.
12. Barlow N.S., Schultz A.J., Weinstein S.J., Kofke D.A. Communication: Analytic Continuation of the Virial Series Through the Critical Point Using Parametric Approximants // J. Chem. Phys. 2015. V. 143. Iss. 7. 071103.
13. Feng C., Schultz A.J., Chaudhary V., Kofke D.A. Eighth to Sixteenth Virial Coefficients of the Lennard-Jones Model // J. Chem. Phys. 2015. V. 143. Iss. 4. 044504.
14. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Modified Virial Expansion and Equation of State // Russ. J. Math. Phys. 2021. V. 28. № 2. P. 146.
15. Naresh J., Singh J.K. Virial Coefficients and Inversion Curve of Simple and Associating Fluids // Fluid Phase Equilibria. 2009. V. 279. Iss. 1. P. 47.
16. Elliott J.R., Schultz A.J., Kofke D.A. Combined Temperature and Density Series for Fluid-phase Properties. I. Square-well Spheres // J. Chem. Phys. 2015. V. 143. Iss. 11. 114110.
17. Ushcats M.V., Ushcats S.J., Mochalov A.A. Virial Coefficients of Morse Potential // Ukr. J. Phys. 2016. V. 61. № 2. P. 160.
18. Naresh J., Singh J.K. Virial Coefficients of Hard-core Attractive Yukawa Fluids // Fluid Phase Equilibria. 2009. V. 285. Iss. 1–2. P. 36.
19. Martynov G.A. Fundamental Theory of Liquids. Bristol: Adam Hilger, 1992.
20. Thol M., Rutkai G., Köster A., Lustig R., Span R., Vrabec J. Equation of State for the Lennard-Jones Fluid // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2016. V. 45. Iss. 2. 023101.
21. Kiselev S.B., Ely J.F., Lueb L., Elliott Jr. J.R. Computer Simulations and Crossover Equation of State of Square-well Fluids // Fluid Phase Equilibria. 2002. V. 200. Iss. 1. P. 121.
22. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. The Confirmation of the Critical Point-Zero-line Similarity Set from the Numerical Modeling Data for Different Interatomic Potentials // J. Chem. Phys. 2009. V. 130. Iss. 21. 214111.
23. Singh J.K., Kofke D.A., Errington J.R. Surface Tension and Vapor-Liquid Phase Coexistence of the Square-well Fluid // J. Chem. Phys. 2003. V. 119. Iss. 6. P. 3405.
24. Orea P., Duda Y. On the Corresponding States Law of the Yukawa Fluid // J. Chem. Phys. 2008. V. 128. Iss. 13. 134508.
25. Iosilevskiy I., Gryaznov V. Uranium Critical Point Problem // J. Nucl. Mater. 2005. V. 344. Iss. 1–3. P. 30.
26. Dymond J.H., Marsh K.N., Wilhoit R.C., Wong K.C. C1 Organic Compounds, Second Virial Coefficients: Datasheet from Landolt-Börnstein – Group IV Physical Chemistry. V. 21A. 'Virial Coefficients of Pure Gases // Springer Materials / Eds. Frenkel M., Marsh K.N. Berlin Heidelberg: Springer, 2002.
27. Apfelbaum E.M. Ideal Lines on the Phase Diagrams of Liquids in 2D Space // J. Mol. Liq. 2021. V. 334. 116088.
28. Иосилевский И.Л. Фазовый переход в простейшей модели плазмы // ТВТ. 1985. Т. 23. № 6. С. 807.

УДК 533.9.01, 533.951

УДАРНАЯ СЖИМАЕМОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ В ДИАПАЗОНЕ ДАВЛЕНИЙ 280–510 ГПа

© 2021 г. Д. Н. Николаев¹ *, М. И. Кулиш¹, С. В. Дудин¹,
В. Б. Минцев¹, И. В. Ломоносов¹, **В. Е. Фортов¹**

¹Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

*E-mail: nik@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 09.04.2021 г.

После доработки 22.10.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

Экспериментально исследована ударная сжимаемость монокристаллического кремния в диапазоне давлений 280–510 ГПа. Ударные волны создавались при помощи маховских взрывных кумулятивных генераторов. Параметры ударных волн определялись по методу отражения, в качестве вещества-эталоны применялся монокристаллический кварц. Результаты хорошо согласуются с первопринципными расчетами и с данными, полученными при помощи лазерных ударных волн.

DOI: 10.31857/S0040364421060168

ВВЕДЕНИЕ

Ударная адиабата является одной из важнейших зависимостей, характеризующих поведение вещества в области высоких давлений [1, 2]. При всем современном разнообразии теоретических методов расчета ударных адиабат экспериментальные данные важны для построения или верификации уравнений состояния вещества (УРС). Фазовая диаграмма кремния сложна: в настоящее время известно 11 его кристаллических модификаций [3], существующих при температуре от комнатной до 400 К. Ударная адиабата кремния экспериментально была детально исследована в области твердой фазы в работах [4–9] с применением как взрывных методик, так и газовых пушек. В качестве диагностики использовались электромагнитный метод, электроконтактные датчики и фоторегистрация с наклонной призмой, в [8, 9] проведено прямое определение кристаллической структуры рентгеновской дифракцией. Было выявлено [4–9], что ударные волны (УВ) в кремнии до давлений 78 ГПа расщепляются на упругий предвестник и несколько пластических волн; скорость предвестника зависит от ориентации кристаллической решетки. Момент начала плавления кремния при ударном сжатии был определен при помощи рентгеновской дифракции [9] и составил 31–33 ГПа. Еще раньше (при 10–15 ГПа) происходит переход кремния в металлическое состояние, что было определено по отражению лазерного излучения [10] и прямым измерением электрического сопротивления [11, 12]. Весь экспериментальный массив ударной сжимаемости при невысоких давлениях хорошо описы-

вается первопринципными расчетами по методу функционала плотности [13]. В настоящей работе для кремния построено многофазное полумпирическое УРС, аналогичное [14, 15] и включающее в себя кривую плавления, кривую кипения и критическую точку. Также известны двухтемпературное УРС QEOS [16] и табличное УРС SESAME [17].

До настоящего времени точки в мегабарном диапазоне (давление до 200 ГПа) были получены в единственной работе [4] 1967 г., и только в марте 2021 г. появились данные [18] по измерению ударной сжимаемости кремния и скорости звука при помощи лазерных ударных волн до давления 2100 ГПа. При этом сжатие кремния лазерными ударными волнами исследовалось еще в 1990-х гг. [19–21], но давление и прочие параметры рассчитывались по QEOS [16] по измеренной скорости УВ. Первопринципное моделирование ударной адиабаты кремния в области до 1400 ТПа [22] и от 6 до 6000 ТПа [23] было выполнено группой Милицера. Интересно отметить, что в [22] был предсказан более “мягкий” ход ударной адиабаты по сравнению с “жесткой” экстраполяцией точек [4]; данные [18] и данные настоящей работы это подтверждают.

В середине 2010-х гг. в ИПХФ РАН был разработан ряд маховских взрывных кумулятивных генераторов ударных волн [24] и появилась возможность значительно, по сравнению с традиционным взрывным плоским ускорением ударников [25], повысить уровень достижимых давлений. Цель настоящей работы – получение прецизионных данных по ударной сжимаемости монокристаллического кремния при мегабарном уровне давлений.

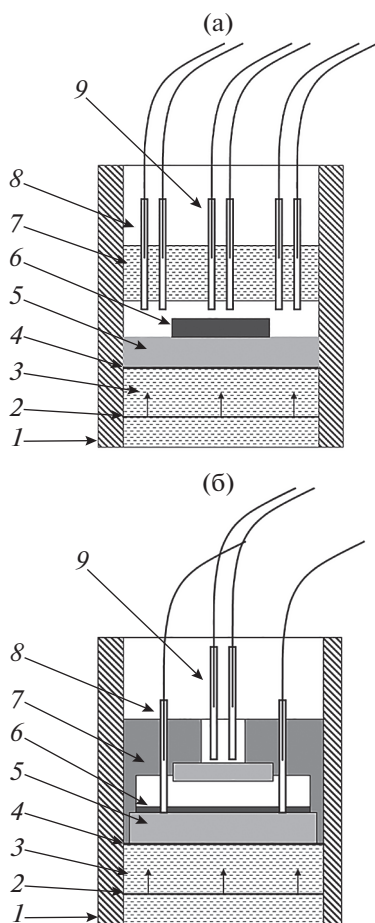


Рис. 1. Экспериментальная сборка типа А (а) и Б (б).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МЕТОДИКА

Использование традиционной методики плоского разгона ударников продуктами детонации конденсированного взрывчатого вещества (КВВ) позволяет получить скорости до 7.5 км/с в двухступенчатом устройстве, что эквивалентно давлению ударной волны в кремнии 130 ГПа. В [4] применение конденсированного взрывчатого вещества позволило достигнуть максимального давления 195 ГПа. В настоящей работе использовались кумулятивные взрывные генераторы ударных волн. Впервые в открытой литературе генератор давления с нерегулярным маховским отражением УВ был представлен в [26] и позже развит в [27]. Прототип использовавшихся здесь генераторов, его устройство и принцип работы описаны в [24]. Основным преимуществом предложенной конструкции являются использование только цилиндрических деталей вместо конических (как в [26, 27]) и возможность варьировать параметры изменением геометрии детонационной разводки. Заряд КВВ имеет форму цилиндра с осевым каналом, выстланным цилиндрическим медным лайнером, по центру которого помещен стержень из мягкого (полиме-

тилметакрилат – ПММА или магний) материала. Детонация заряда инициируется при помощи многоточечной детонационной разводки вдоль наружной поверхности со скоростью скользящей точки инициирования, превышающей скорость детонации КВВ. При этом образуется сходящаяся коническая детонационная волна, которая ускоряет лайнер к центру генератора, одновременно превращая его в конус. При соударении лайнера с центральным стержнем в последнем возникает сходящаяся к центру коническая УВ, впоследствии эволюционирующая в плоский маховский диск. Длина стержня, на которой маховский диск полностью заполняет диаметр стержня и имеет максимальные параметры, определяется в расчете и/или экспериментально. Скорость диска может достигать 10–19 км/с и определяется скоростью скользящей точки инициирования.

Для группы точек с низкими параметрами использовалось модифицированное устройство [24] с медным лайнером и увеличенным диаметром стержня из ПММА, масса КВВ – 4 кг. Для группы точек с высокими параметрами применялся вновь разработанный “большой заряд” – генератор с массой КВВ 13 кг.

Измерительный узел для регистрации параметров ударных волн размещался на торце центрального стержня. Применялось два типа экспериментальных сборок (рис. 1). Центральный стержень состоял из медной оболочки 1, окружающей цилиндр 3 из ПММА, в котором формировалась ударная волна 2. На торец стержня 3 наклеивались пластина-эталон 5 (α -кварц, z -срез) и образец кремния 6; тонкая алюминиевая фольга 4 (7 мкм) препятствовала засветке оптических детекторов ярким излучением ударной волны 2 в ПММА. Образец Si в сборке типа А (рис. 1а) имел размеры 13×13 мм² и толщину 1.4–2 мм. В держателе волокон были смонтированы три группы коллимированных оптических волокон, соединяющих сборку и фотодетекторы: боковые 8 и центральная 9. Сборка была заполнена воздухом. В сборке типа Б (рис. 1б) образец 6 представляет собой диск из кремния толщиной 0.35 мм (пластина для производства микроэлектроники). Он покрывал всю поверхность пластины-эталона 5, а боковые волокна 8 проходили сквозь отверстия в образце 6, чтобы зарегистрировать излучение ударной волны в эталоне. Корпус 7 изготовлен из алюминия и образует герметичный вакуумированный объем над поверхностью образца. Все склейки пластин из кварца и кремния, алюминиевой фольги и стержня из ПММА были выполнены при помощи маловязкого клея с УФ-отверждением, что позволило получить толщины клея около 1 мкм, это оказалось меньше, чем клиновидность пластин (около 4–5 мкм на диаметре 20 мм).

Для регистрации излучения ударных волн в кварце и кремнии использовались три типа оптических детекторов, соединенных со сборкой оптическими волокнами диаметром 200 или 400 мкм, отрезками одинаковой длины: I – быстрый фотоприемник на основе кремниевого PIN-фотодиода видимого диапазона без усилителя, подключенный непосредственно к 50-омной нагрузке осциллографа по схеме с напряжением смещения, обеспечивал разрешение 250 пс; II – фотоприемник с двухкаскадным усилением на основе инфракрасного InGaAs PIN-фотодиода с разрешением 10 нс, оснащенный интерференционным фильтром; III – быстрый детектор, идентичный I, но оснащенный быстрым InGaAs PIN-фотодиодом с разрешением 150 пс.

Для получения данных об ударной сжимаемости кремния использовался метод отражения [1]. Волновые скорости в пластине-этalone из кварца и в образце из кремния определялись по времени прохождения ударной волны известной дистанции; предполагалось, что ударные волны стационарны (не ускоряются и не тормозятся). Это хорошо видно по практически стационарной интенсивности излучения фронта ударной волны как в кварце, так и в кремнии (рис. 2).

Времена в каждом эксперименте определялись двумя различными методами. Первый метод предполагал, что кремний непрозрачен. Использовался набор сигналов с видимых детекторов типа I (рис. 2а). Боковые детекторы I регистрируют излучение фронта УВ в кварце. Временной интервал I дает скорость ударной волны в кварце, а разница во времени между противоположными детекторами характеризует перекося фронта ударной волны. Момент входа УВ в кремний определяется как среднее арифметическое, если детекторов два, или по линейной интерполяции координата–время, если их несколько. Сигналы от центральных детекторов II указывают на выход ударной волны из образца кремния в воздух. Временной интервал 2 (при условии одинаковой длины отрезков световодов) дает скорость ударной волны в образце.

Второй метод основан на том, что кремний прозрачен в некотором (примерно 1,2–8 мкм) диапазоне длин волн. Это значит, что одним фотодетектором можно зарегистрировать свечение УВ в кварце и кремнии в одной точке сборки одновременно. Типичный сигнал инфракрасных детекторов типа II, применявшихся со сборкой А, представлен на рис. 2б; набор длин волн: 1310, 1500, 1600, 1800 нм. Временной интервал 3 дает скорость УВ в кварце, интервал 4 в образце из кремния. Нарастание сигнала 5 обусловлено неидеальной блокировкой излучения от ударной волны в ПММА.

Скоростной ИК-детектор типа III использовался в экспериментах со сборкой Б с образцом кремния толщиной 0,35 мм. Его экспериментальные за-

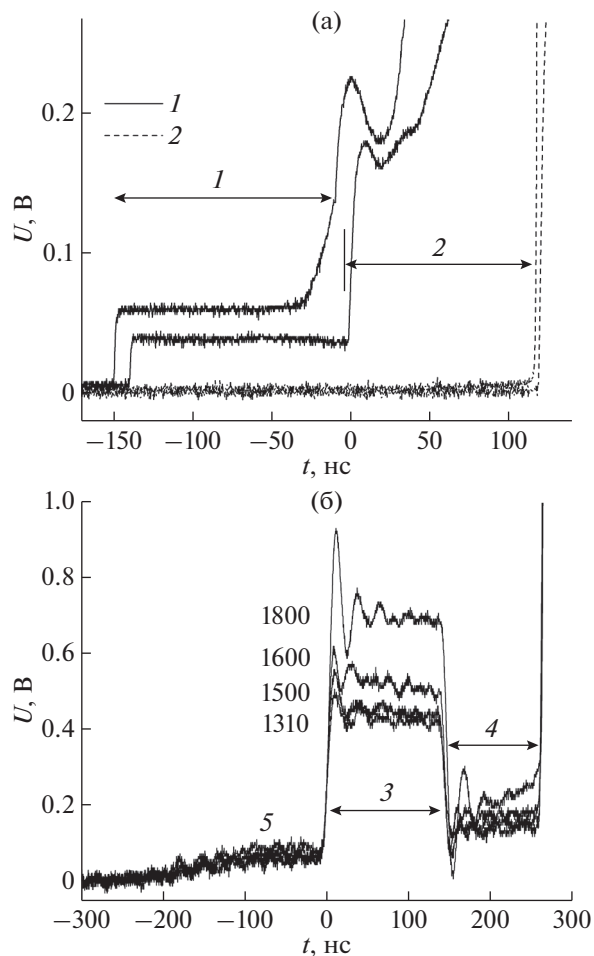


Рис. 2. Типичные регистрации фотодетекторов: (а) – для детекторов типа I, (б) – II.

писи похожи на регистрацию медленных ИК-детекторов (рис. 2б). Несмотря на более короткое время регистрации, он имел лучшие временные характеристики и обеспечивал примерно одинаковую точность с постановкой А.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для решения задачи о распаде разрыва в рамках метода отражения требовались как ударная адиабата кварца, так и возможность рассчитывать его адиабату двукратного ударного сжатия. В данной работе применяется УРС кварца в форме [28], при этом УРС было модифицировано с учетом нового массива данных по ударной сжимаемости кварца [29]. Данные по ударной сжимаемости кремния сведены в таблице (также приводится скорость УВ в эталоне, в скобках – погрешности определения величин) и представлены на рис. 3 в координатах $D-U$ (скорость УВ–массовая скорость).

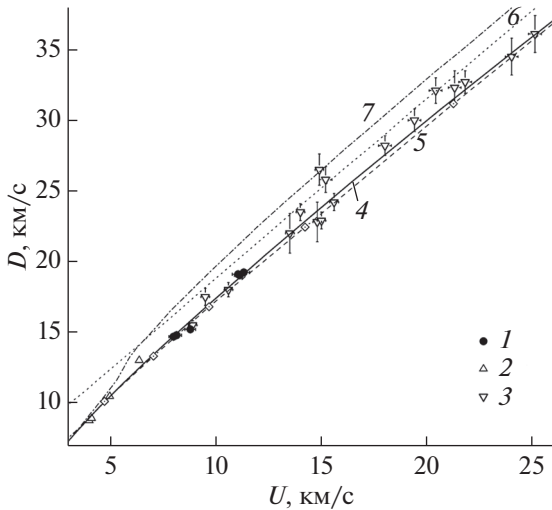


Рис. 3. Ударная адиабата кремния в координатах $D-U$: эксперименты: 1 – настоящая работа, 2 – [4], 3 – [18]; расчеты: 4 – [14, 15], 5 – [22]; 6 – [16], 7 – [17].

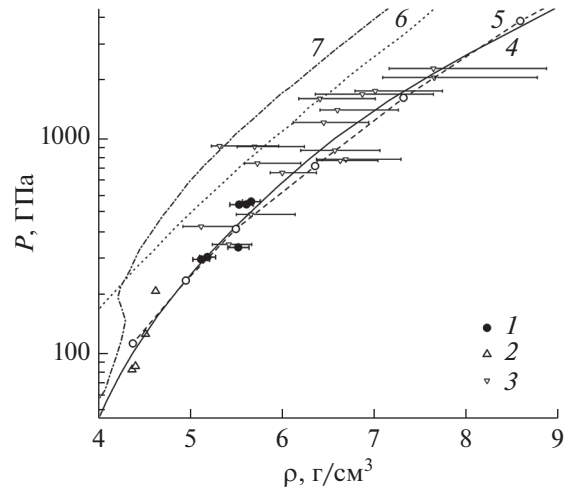


Рис. 4. Ударная адиабата кремния в координатах $P-\rho$: 1–7 – см. рис. 3.

Экспериментальные данные по ударной сжимаемости кремния

Эксперимент	$D_{\text{кварц}}$, км/с	D_{Si} , км/с	U_{Si} , км/с	P_{Si} , ГПа	ρ , г/см ³
06	14.365	14.68 (0.17)	8.0 (0.21)	273.6 (10)	5.118 (0.22)
11	14.55	14.79 (0.16)	8.15 (0.2)	280.8 (10)	5.188 (0.21)
14	15.33	15.2 (0.2)	8.79 (0.25)	311.0 (13)	5.523 (0.29)
173	18.5	19.1 (0.16)	11.06 (0.23)	491.9 (14)	5.531 (0.2)
17*	18.56	19.03 (0.2)	11.13 (0.22)	493.3 (15)	5.610 (0.22)
18*	18.8	19.23 (0.16)	11.31 (0.23)	507.3 (14)	5.662 (0.22)

*Эксперименты, выполненные со сборкой типа Б, остальные – со сборкой типа А.

Полученные точки аппроксимируются линейной зависимостью $D = 3.278 + 1.417U$. Точки хорошо соответствуют первопринципному расчету [22], а также точкам, полученным в лазерном эксперименте [18]. Наклон зависимости $D-U$ заметно меньше, чем в аппроксимации точек [4] $D = 1.405 + 1.817U$. В [18] была предложена билинейная аппроксимация $D = 1.39 + 1.8U$ и $D = 4.86 + 1.26U$ с изломом в точке с $U = 6.5$ км/с. Наклон правой ветви меньше, чем в настоящей работе. Это может объясняться тем, что в [18] диапазон достигнутого давления выше, при этом точки с наименьшими параметрами смещаются вниз. Похоже ведет себя и УРС [14, 15]. Интересно отметить, что данные [18] получены с использованием нестационарной ударной волны с непрерывно спадающим давлением и в эксперименте определялась только средняя скорость УВ в непрозрачном кремнии. Авторы создали методику, позволяющую восстановить скорость УВ в момент ее перехода из кварца в кремний, однако это все равно привело к ухудшению точности определения D в кремнии.

Полученные данные также приведены на рис. 4 в координатах давление–плотность. Погрешность по давлению для всех экспериментальных точек составила от 2.8 до 4.3%, по плотности – от 3.6 до 5.2%, абсолютные значения погрешностей приведены в таблице. Хорошо видно, что в настоящей работе достигнута лучшая точность определения плотности по сравнению с [18]. Хуже всего эксперименты описываются УРС QEOS [16] и SESAME [17], лучше всего – QMD-расчетом [22] и многофазным УРС [14, 15]. Последнее практически совпадает с [22].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены эксперименты по измерению сжимаемости кремния при помощи маховских кумулятивных генераторов. Экспериментальные точки близки к точкам работы [18], полученным на лазерной установке, и подтверждают результаты QMD-расчетов, свидетельствующих о “мягком” ходе ударной адиабаты кремния. Построено многофазное уравнение состояния кремния, удовлетворительно описывающее весь массив экспе-

риментальных данных. Достигнуто рекордное для взрывных генераторов давление ~ 500 ГПа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785). Все эксперименты проведены с использованием приборной базы Московского регионального взрывного центра коллективного пользования ИПХФ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 688 с.
2. *Фортвов В.Е.* Мощные ударные волны на Земле и в космосе. М.: Физматлит, 2019. 416 с.
3. *Mujica A., Rubio A., Munoz A., Needs R.* High-pressure Phases of Group-IV, III–V, and II–VI Compounds // *Rev. Mod. Phys.* 2003. V. 75. P. 863.
4. *Павловский М.Н.* Образование металлических модификаций германия и кремния в условиях ударного сжатия // *Физика твердого тела.* 1967. Т. 9. № 11. С. 3192.
5. *Gust W.H., Royce E.B.* Axial Yield Strengths and Two Successive Phase Transition Stresses for Crystalline Silicon // *J. Appl. Phys.* 1971. V. 42. P. 1897.
6. *Goto T., Sato T., Syono Y.* Reduction of Shear Strength and Phase-transition in Shock-loaded Silicon // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1982. V. 21. P. 369.
7. *Turneure S.J., Gupta Y.M.* Inelastic Deformation and Phase Transformation of Shock Compressed Silicon Single Crystals // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 91. P. 201913.
8. *Turneure S.J., Gupta Y.M.* X-ray Diffraction and Continuum Measurements in Silicon Crystals Shocked Below the Elastic Limit // *Appl. Phys. Lett.* V. 90. P. 051905.
9. *Turneure S.J., Sharma S.M., Gupta Y.M.* Nanosecond Melting and Recrystallization in Shock-compressed Silicon // *Phys. Rev. Lett.* 2018. V. 121. P. 135701.
10. *Mintsev V.B., Zaporoghets Yu.B.* Reflectivity of Dense Plasma // *Contrib. Plasma Phys.* 1989. V. 29. № 4/5. P. 493.
11. *Rosenberg G.* Resistivity Measurements in Silicon Compressed by Shock-waves // *J. Phys. Chem.* 1980. V. 41. № 6. P. 561.
12. *Gilev S., Trubachev A.* Metallization of Monocrystalline Silicon Under Shock Compression // *Phys. Stat. Sol. B.* 1999. V. 211. P. 379.
13. *Strickson O., Artacho E.* Ab Initio Calculation of the Shock Hugoniot of Bulk Silicon // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 93. P. 094107.
14. *Fortov V.E., Lomonosov I.V.* Thermodynamics of Extreme States of Matter // *Pure Appl. Chem.* 1997. V. 69. № 4. P. 893.
15. *Lomonosov I.V.* Multi-phase Equation of State for Aluminum // *Laser Part. Beams.* 2007. V. 25. P. 567.
16. *More R.M., Warren K.H., Young D.A., Zimmerman G.B.* A New Quotidian Equation of State (QEOS) for Hot Dense Matter // *Phys. Fluids.* 1988. V. 31. P. 3059.
17. *Bennett B.I., Johnson J.D., Kerley G.I., Rood G.T.* Recent Developments in the SESAME Equation-of-state Library. Report LA-7130. Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory, 1978.
18. *Henderson B.J., Marshall M.C., Boehly T.R., Paul R., McCoy C.A., Hu S.X., Polsin D.N., Crandall L.E., Huff M.F., Chin D.A., Ruby J.J., Gong X., Fratanduno D.E., Eggert J.H., Rygg J.R., Collins G.W.* Shock-compressed Silicon: Hugoniot and Sound Speed up to 2100 GPa // *Phys. Rev. B.* 2021. V. 103. № 9. P. 094115.
19. *Ng A., Celliers P., Xu G.* Electron-ion Equilibration in a Strongly Coupled Plasma // *Phys. Rev. E.* 1995. V. 52. P. 4299.
20. *Basko M., Lower Th., Kondrashov V.N., Kendl A., Sigel R., Meyer-ter-Vehn J.* Optical Probing of Laser-induced Indirectly Driven Shock Waves in Aluminum // *Phys. Rev. E.* 1997. V. 56. P. 1019.
21. *Lower T., Kondrashov V., Basko M., Kendl A., Meyer-ter-Vehn J., Sigel R., Ng A.* Reflectivity and Optical Brightness of Laser-induced Shocks in Silicon // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. P. 18.
22. *Hu S.X., Militzer B., Collins L.A., Driver K.P., Kress J.D.* First-principles Prediction of the Softening of the Silicon Shock Hugoniot Curve // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 94. 094109.
23. *Driver K., Soubiran F., Zhang S., Militzer B.* Comparison of Path Integral Monte Carlo Simulations of Helium, Carbon, Nitrogen, Oxygen, Water, Neon, and Silicon Plasmas // *High Energy Density Physics.* 2017. V. 23. P. 81.
24. *Nikolaev D.N., Ternovoi V.Ya., Kim V.V., Shutov A.V.* Plane Shock Compression Generators, Utilizing Convergence of Conical Shock Waves // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2014. V. 500. № 14. P. 1.
25. *Альтшулер Л.В., Трунин Р.Ф., Урлин В.Д., Фортвов В.Е., Фунтиков А.И.* Развитие в России динамических методов исследований высоких давлений // *УФН.* 1999. Т. 169. № 3. С. 323.
26. *Дерентович Г.* Сильное сжатие вещества при помощи кумуляции энергии взрывчатых веществ // *ПМТФ.* 1989. Т. 30. № 1. С. 23.
27. *Глушак Б.Л., Жарков А.П., Жерноклетов М.В., Терновой В.Я., Филинов А.С., Фортвов В.Е.* Экспериментальное изучение термодинамики плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии // *ЖЭТФ.* 1989. Т. 96. № 4. С. 1301.
28. *Lomonosov I.V., Bushman A.V., Fortov V.E., Khishenko K.V.* Caloric Equations of State of Structural Materials // *High Press. Sci. Technol. N.Y.: AIP Press,* 1994. Part 1. P. 117.
29. *Knudson M.D., Desjarlais M.P.* Adiabatic Release Measurements in α -Quartz between 300 and 1200 GPa: Characterization of α -Quartz as a Shock Standard in the Multimegabar Regime // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 88. P. 184107.

УДК 535.3

ИЗЛУЧЕНИЕ КРЕМНИЯ ПРИ ДАВЛЕНИИ УДАРНОГО СЖАТИЯ 68 ГПа И В ПРОЦЕССЕ РАЗГРУЗКИ В ВАКУУМ

© 2021 г. М. И. Кулиш¹*, В. Б. Минцев¹, С. В. Дудин¹,
Д. Н. Николаев¹, И. В. Ломоносов¹, В. Е. Фортгов¹

¹Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

*E-mail: kulishm@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 09.04.2021 г.

После доработки 24.10.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

В работе проведены измерения яркостных температур кремния, ударно-сжатого до давления $P=68$ ГПа, и эволюции его температуры в процессе разгрузки. Измерения проводились в инфракрасном диапазоне $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм, в котором кремний оптически прозрачен, и в видимом диапазоне $\Delta\lambda_2 = 0.32\text{--}1.06$ мкм. Изэнтропическая разгрузка ударно-сжатого кремния в вакуум сопровождалась аномальным ростом наблюдаемой температуры.

DOI: 10.31857/S0040364421060119

ВВЕДЕНИЕ

Прямые измерения излучения с фронта ударной волны позволяют получить важную информацию о температуре ударно-сжатого вещества и, следовательно, в совокупности с измерениями кинематических параметров ее распространения определить термодинамически полное уравнение состояния вещества в условиях высоких динамических давлений [1]. Вместе с тем эксперименты такого рода оказываются возможными только в оптически прозрачных материалах [2]. В настоящей работе проведены исследования теплового излучения кремния в процессе ударного сжатия в диапазоне его оптической прозрачности в нормальных условиях $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм и разгрузки в диапазонах $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм и $\Delta\lambda_2 = 0.32\text{--}1.06$ мкм. Интерес к исследованию кремния вызван широкой областью его использования в различных современных технологиях [3], в связи с чем необходимо понимание его физических свойств в широком диапазоне параметров, включая высокие давления гигапаскального уровня, где кремний претерпевает ряд фазовых превращений [4, 5], наиболее интересным из которых представляется его металлизация при $P \sim 10\text{--}15$ ГПа. При прохождении по кремнию ударной волны при давлении до 78 ГПа наблюдается многоволновая конфигурация [6–9]. В настоящей работе параметры взрывного генератора обеспечивали формирование в кремнии двухволновой конфигурации при скорости ударного фронта $D_{sh} = 8.0$ км/с и давлении $P = 68$ ГПа.

ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Схема эксперимента представлена на рис. 1. Экспериментальная сборка состоит из ударно-сжимаемой медной мишени 1 толщиной 1 мм, ударная волна в которой создается стальным ударником толщиной 1 мм. Массовая скорость разлета медной мишени в вакуум $U_s = 5 \pm 0.15$ км/с. На поверхности медной мишени с помощью цианоакрилатного клея закреплен диск из монокристаллического кремния 2 толщиной 350 ± 20 мкм. Ориентация кристалла — $\langle 111 \rangle$. Для экспериментов в видимой области спектра $\Delta\lambda_2 = 0.32\text{--}1.06$ мкм устанавливался цилиндрический экран 3 из зачерненного дюралюминия. Далее через

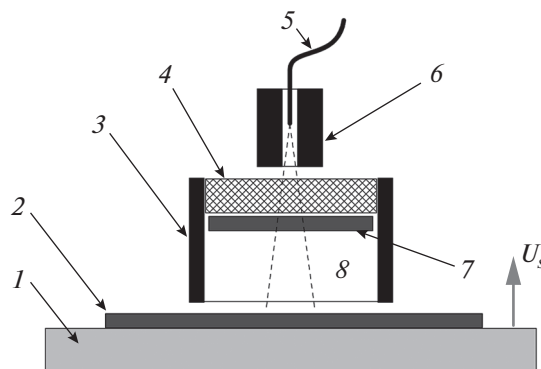


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 — медная мишень, 2 — первая пластина из кремния, 3 — цилиндрический экран, 4 — стеклянное окно, 5 — кварцевый световод, 6 — цилиндрический канал, 7 — вторая пластина из кремния, 8 — вакуумный объем.

вакуумный промежуток δ на расстоянии ~ 5 мм располагалось стеклянное окно 4 толщиной 1.55 мм. Объем между мишенью 1 и окном 4 вакуумировался с откачкой до давления, не превышающего 0.0005 бар. За стеклянным окном 4 располагался цилиндрический канал из эбонита 6, ограничивающий поле зрения световода 5 на поверхности кремниевой пластины 2 диаметром менее 5 мм. Угол зрения световода на рис. 1 условно показан пунктиром. Для экспериментов в инфракрасной области спектра $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм устанавливалась вторая кремниевая пластина 7 толщиной 350 мкм.

Разгрузка медной мишени 1 в пластину кремния 2 приводит к формированию ударно-волновой конфигурации в кремнии. При измерениях в полосе $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм в качестве фотоприемника использовался InGaAs PIN-фотодиод ДФД500ТО, нагруженный на сопротивление 50 Ом, с характерной полосой чувствительности $\Delta\lambda_1 = 0.95\text{--}1.7$ мкм. Временное разрешение фотоприемника и осциллографа — не хуже 10 нс (паспортное значение). При регистрации три канала осциллографа с разными чувствительностями включались параллельно для обеспечения записи сигнала, меняющегося в широком динамическом диапазоне. Вторая кремниевая пластина 7 применена в качестве оптического фильтра, через который наблюдалось излучение кремния при прохождении волн по пластине 2 и при ее разгрузке в вакуум δ .

Для видимого диапазона $\lambda = 0.32\text{--}1.06$ мкм применялся фотоприемник S7836-01 (Hamamatsu Si PIN-фотодиод) с характерной полосой чувствительности $\lambda_2 = 0.32\text{--}1.06$ мкм, ограниченной снизу пропусканием кварцевого световода. Фотодиод, нагруженный на сопротивление 50 Ом, обеспечивал полосу пропускания не уже 150 МГц (по паспорту). Дополнительно был установлен зачерненный цилиндрический экран 3 из дюралюминия. Экран применялся после проведения предварительных экспериментов, в которых было обнаружено возникновение засветки от периферийной части сборки, где возможен прорыв мишени при ее разгрузке. По данным работы [10], коэффициент поглощения молекулярных компонент воздушной плазмы, которая может попадать в сборку по периметру мишени, заметно растет в коротковолновой части диапазона $\lambda_2 = 0.32\text{--}1.06$ мкм. Расстояние между нижним краем цилиндрического экрана 3 и поверхностью кремниевой пластины 2 составляло $d = 0.8 \pm 0.2$ мм. В сборке для измерений в видимом диапазоне устанавливалась только одна кремниевая пластина 2.

Фотоприемник калибровался по излучению ленточной вольфрамовой лампы с температурой $T = 2700$ К с использованием кремниевой пластины и стекла, аналогичных примененным в сборке. При расчетах температуры учитывалась степень черноты вольфрама в ленточной лампе,

которая меняется в широком диапазоне чувствительности фотоприемника. Учтены также френелевское отражение от поверхностей кремния и от поверхностей стекла и коэффициент поглощения кремния в зависимости от длины волны. Показатель преломления и коэффициент экстинкции кремния в широком диапазоне длин волн взяты из работ [11, 12].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результат обработки экспериментальных данных для диапазонов $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм и $\Delta\lambda_2 = 0.32\text{--}1.06$ мкм приведен на рис. 2.

В начале записи для ИК-диапазона до момента $t = 0$ мкс наблюдается шумовая полоса, величина которой $T_{N1} < 1000$ К. Когда температура превышает уровень шумовой полосы, отношение сигнал/шум становится достаточным для уверенной регистрации температуры, так как зависимость интенсивности от температуры нелинейна. В момент времени a (рис. 2) ударная волна выходит в объем первой кремниевой пластины, а в момент времени b возникает разгрузка кремния в вакуум. Возмущения и форма сигнала на границах a и b связаны со слоями окисленного кремния на поверхности пластины и со слоем цианоакрилатного клея со стороны медной мишени. Узкие пики a и b несколько уширены из-за перекоса ударной волны на наблюдаемом размере пластины (~ 5 мм). При прохождении ударной волны по кремнию регистрируется яркостная температура $T_{sh} = 1250 \pm 200$ К. По-

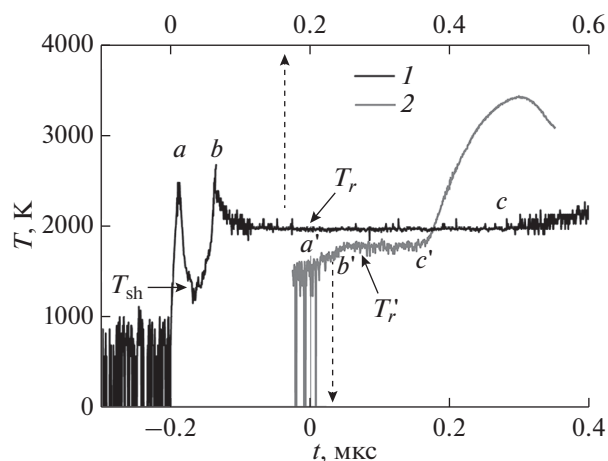


Рис. 2. Экспериментальные записи: 1 — яркостная температура в эксперименте в ИК-диапазоне; 2 — яркостная температура в эксперименте в видимом диапазоне; указатели со штрихом относятся к эксперименту в видимом диапазоне; a, a' — выход волны в кремний; b, b' — начало разгрузки кремния; c, c' — возникновение засветок от периметра сборки; показаны уровни температур ударной волны в кремнии T_{sh} и в разгрузке T_r, T'_r .

сле момента b при формировании волны разгрузки температура T_r должна падать относительно T_{sh} , так как при разгрузке вещество охлаждается. Однако наблюдается противоположное: температура разгруженного вещества $T_r = 2000 \pm 200$ К, т.е. $T_r > T_{sh}$. Интенсивность излучения при формировании волны разгрузки возрастает больше чем на порядок (в зависимости от длины волны). Рост температуры мог бы быть объяснен расширением излучаемого спектра в коротковолновую область после выхода волны из кремния. Но этот эффект подавляется установкой второй пластины кремния, которая ограничивает расширение спектра в коротковолновую область. Температура разгруженного кремния остается практически постоянной до момента c , после которого осциллограмма возмущена засветками от боковых поверхностей сборки.

Для видимого диапазона (обозначения со штрихом на рис. 2) до момента a' наблюдается шумовая полоса $T_{N2} < 1600$ К. На участке $a'-b'$ сигнал растет по мере прохождения волны по кремнию, так как невозмущенный кремний заметно поглощает свет в видимой области. От момента b' до момента c' наблюдается температура разгруженного кремния, которая составляет $T_r' = 1780 \pm 200$ К. От момента c' и далее излучение возмущено засветками от столкновения кремния с цилиндрическим экраном.

Наблюдаемый эффект роста яркостной температуры в разгрузке может быть объяснен наличием многоволновой структуры ударной волны в кремнии при исследованных параметрах. Дело в том, что кремний имеет сложную фазовую диаграмму. В настоящее время известно 11 стабильных и метастабильных кристаллических модификаций кремния, существующих при температурах от комнатной до 2000 К и давлениях до 80 ГПа [4, 5]. Экспериментально было выявлено [6–9], что ударные волны в кремнии до давлений 78 ГПа расщепляются на упругий предвестник и несколько пластических волн. Весь экспериментальный массив ударной сжимаемости при невысоких давлениях хорошо описывается первопринципными расчетами по методу функционала плотности [13]. В условиях настоящего эксперимента реализуется двухволновая конфигурация. Впереди движется упругая волна со скоростью ~ 8.5 км/с. Вторая пластическая ударная волна, обладающая скоростью 8.0 км/с, переводит кремний в жидкое состояние с давлением $P_{sh} = 68 \pm 3$ ГПа, вычисленным по ударной адиабате [6].

Полученные экспериментальные данные по температуре ударно-сжатого и разгруженного кремния приведены на рис. 3 в зависимости от его относительного удельного объема. Простые оценки температуры кремния по значениям тепловой составляющей удельной энергии на ударной

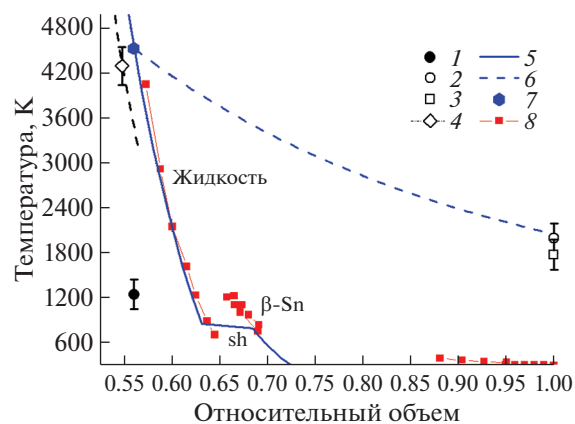


Рис. 3. Температура ударно-сжатого и разгруженного кремния в зависимости от относительного удельного объема: эксперимент, настоящая работа: 1 — яркостная температура ударно-сжатого кремния, 2 — яркостная температура кремния при разгрузке в вакуум в ИК-диапазоне спектра, 3 — в видимом диапазоне спектра; расчет, настоящая работа: 4 — по данным [6], 5 — температура на ударной адиабате кремния по многофазному УРС, 6 — в волне разгрузки, 7 — точка с давлением ударного сжатия 68 ГПа; 8 — расчет температуры ударно-сжатого кремния методом функционала плотности [13].

адиабате [6, 14, 15] и теплоемкости [16] дают значения $T_{sh} \sim c_p \sim 4300$ К. Расчетные величины температуры кремния на ударной адиабате, полученные на основе первопринципного моделирования кремния, претерпевающего последовательный ряд фазовых превращений до сжимающих давлений ~ 70 ГПа, обозначены на рисунке кривой 8 [13]. Также в настоящей работе использовалось построенное для кремния по аналогии с [17] многофазное полуэмпирическое уравнение состояния (УРС), включающее в себя кривую плавления, кривую кипения и критическую точку. Подробное сравнение рассчитанных по нему ударных адиабат приведено в работах [18, 19]. Значения температуры ударно-сжатого и расширяющегося кремния, полученные с использованием такого УРС, приведены на рис. 3 — кривые 5 и 6 соответственно. Видно, что экспериментально измеренная яркостная температура ударно-сжатого кремния оказывается значительно меньше расчетной. Такое расхождение можно объяснить наличием в условиях эксперимента двухволновой конфигурации. В распространяющейся со скоростью $D_1 = 8.5$ км/с упругой волне коэффициент поглощения достаточно велик $\sim 10^4$ см $^{-1}$ [20], так что интенсивность излучения с фронта пластической волны значительно ослабевает в $I/I_0 = \exp(-d) \sim 3.5$ раза за счет увеличения толщины поглощающего слоя $d = d(t)$, нарастая при выходе упругой волны на свободную поверхность. Значения измеренной яркостной температуры в волне разгрузки

составили $T_r = 2000 \pm 200$ К в ИК-диапазоне и $T_r' = 1780 \pm 200$ К в видимом диапазоне. Данные результаты хорошо согласуются с расчетом по многофазному УРС. Занижение температуры фронта в кремнии наблюдалось и в экспериментах с одноволновой структурой фронта в работах [19, 21] при больших давлениях — до 600 ГПа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Регистрируемая яркостная температура кремния $T_{sh} = 1250$ К при давлении ударного сжатия $P_{sh} = 68$ ГПа в диапазоне прозрачности кремния $\Delta\lambda_1 = 1.1\text{--}1.7$ мкм значительно ниже расчетных значений температуры кремния. Занижение температуры может быть вызвано поглощающим слоем перед фронтом второй ударной волны. Яркостная температура разгруженного кремния оказывается выше наблюдаемой температуры в ударной волне. Зарегистрированные температуры разгруженного кремния составили $T_r = 2000 \pm 200$ К в инфракрасной области и $T_r' = 1780 \pm 200$ К в видимой области спектра.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785). Все эксперименты проведены с использованием приборной базы Московского регионального взрывного центра коллективного пользования ИПХФ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фортвов В.Е.* Мощные ударные волны на Земле и в космосе. М.: Физматлит, 2019. 416 с.
2. *Кормер С.Б.* Оптические исследования свойств ударно сжатых конденсированных диэлектриков // УФН. 1968. Т. 94. № 4. С. 641.
3. *Cheng G.J., Cai M., Pirzada D., Guinel J.F., Norton M.G.* Plastic Deformation in Silicon Crystal Induced by Heat-Assisted Laser Shock Peening // J. Manuf. Sci. Eng. 2008. V. 130. № 1. P. 011008.
4. *Mujica A., Rubio A., Munoz A., Needs R.* High-pressure Phases of Group-IV, III–V, and II–VI Compounds // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. P. 863.
5. *Li C., Wang C., Han J., Yan L., Deng B., Liu X.* A Comprehensive Study of the High-pressure–Temperature Phase Diagram of Silicon // J. Mater. Sci. 2018. V. 53. № 10. P. 7475.
6. *Павловский М.Н.* Образование металлических модификаций германия и кремния в условиях ударного сжатия // Физика твердого тела. 1967. Т. 9. № 11. С. 3192.
7. *Gust W.H., Royce E.B.* Axial Yield Strengths and Two Successive Phase Transition Stresses for Crystalline Silicon // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. P. 1897.
8. *Goto T., Sato T., Syono Y.* Reduction of Shear Strength and Phase-Transition in Shock-Loaded Silicon // Jpn. J. Appl. Phys. 1982. V. 21. P. 369.
9. *Turneaure S.J., Sharma S.M., Gupta Y.M.* Nanosecond Melting and Recrystallization in Shock-Compressed Silicon // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121. P. 135701.
10. *Churchill D.R., Armstrong B.H., Johnston R.R., Müller K.G.* Absorption Coefficients of Heated Air: A Tabulation to 24000 K // JQSRT. 1966. V. 6. № 4. P. 371.
11. *Schinke C., Peest P.C., Schmidt J., Brendel R., Bothe K., Vogt M.R., Kroger I., Winter S., Schirmacher A., Lim S., Nguyen H.T., MacDonald D.* Uncertainty Analysis for the Coefficient of Band-to-band Absorption of Crystalline Silicon // Aip Adv. 2015. V. 5. № 6. P. 067168-1.
12. *Salzberg C.D., Villa J.J.* Infrared Refractive Indexes of Silicon, Germanium and Modified Selenium Glass // J. Opt. Soc. Am. 1957. V. 47. № 3. P. 244.
13. *Strickson O., Artacho E.* Ab Initio Calculation of the Shock Hugoniot of Bulk Silicon // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. P. 094107.
14. *Olijnyk H., Sikka S.K., Holzapfel W.B.* Structural Phase Transitions in Si and Ge Under Pressures up to 50 GPa // Phys. Lett. A. 1984. V. 103. № 3. P. 137.
15. *Duclos S.J., Vohra Y.K., Ruoff A.L.*hcp-to-fcc Transition in Silicon at 78 GPa and Studies to 100 GPa // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. № 8. P. 775.
16. *Шелудяк Ю.Е., Кашипов Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н.* Теплофизические свойства компонентов горючих систем: Спр. / Под ред. Силина Н.А. М., 1992. 184 с.
17. *Lomonosov I.V.* Multi-phase Equation of State for Aluminum // Laser Part. Beams. 2007. V. 25. P. 567.
18. *Николаев Д.Н., Кулиш М.И., Дудин С.В., Минцев В.Б., Ломоносов И.В., Фортвов В.Е.* Ударная сжимаемость монокристаллического кремния в диапазоне давления 280–510 ГПа // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С.
19. *Nikolaev D.N., Kulish M.I., Dudin S.V., Mintsev V.B., Lomonosov I.V., Fortov V.E.* Measurement of Dense Plasma Temperature of the Shock-compressed Silicon // Contrib. Plasma Phys. 2021. e202100113. <https://doi.org/10.1002/ctpp.202100113>
20. *Mintsev V.B., Zaporogets Y.B.* Reflectivity of Dense Plasma // Contrib. Plasma Phys. 1989. V. 29. № 4–5. P. 493.
21. *Lower T., Kondrashov V.N., Basko M., Kendl A., Meyerter-Vehn J., Sigel R., Ng A.* Reflectivity and Optical Brightness of Laser-induced Shocks in Silicon // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. № 18. P. 4000.

ТЕПЛОМАССОБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ
ГАЗОДИНАМИКА

УДК 533.9,537.5

КИНЕТИКА ДВУХФАЗНЫХ ГАЗОЖИДКОСТНЫХ
СРЕД В ПРОЦЕССАХ ЭЛЕКТРОЛИЗА

© 2021 г. Р. Н. Кашапов^{1, 2}, Л. Н. Кашапов^{1, 2, *}, Н. Ф. Кашапов^{1, 2}, В. Ю. Чебакова^{1, 2, **}

¹Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия

²Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

*E-mail: kashlenar@mail.ru

**E-mail: vchebakova@mail.ru

Поступила в редакцию 09.04.2021 г.

После доработки 09.04.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

В современных условиях при переходе к альтернативным источникам энергии актуальное значение придается водородной энергетике. Одним из наиболее распространенных способов получения водорода является электролиз. В данной работе предложен метод численной оптимизации задач химической кинетики. Данный численный алгоритм позволяет находить скорости констант в приэлектродных процессах в соответствии с заданными экспериментальными данными по выходу, а также рассчитывать концентрации веществ, участвующих в приэлектродных процессах, на конкретные моменты времени. Проведено численное моделирование приэлектродных процессов функционирующего электролизера. Дан сравнительный анализ расчета выхода водорода и кислорода в процессе электролиза раствора гидроксида калия при постоянной температуре со значениями, полученными в ходе натурального эксперимента. Результаты численных исследований хорошо согласуются с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0040364421060089

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время во всем мире происходит поиск технологий, позволяющих использовать альтернативные (возобновляемые) источники энергии, что связано как с ухудшением экологической обстановки, так и с возрастающими потребностями в электроэнергии. В работах Фортова В.Е. [1, 2] проанализировано изменение соотношения традиционных и нетрадиционных источников в мировом производстве электроэнергии, показаны темпы проникновения различных направлений развития альтернативной энергетики в производство, сделан анализ возможности модернизации российской экономики в сторону возобновляемых источников энергии.

Одним из направлений “зеленой” энергетики, наряду с ветровыми и солнечными установками, является использование биотоплива, однако его сжигание приводит к выбросам углекислого газа, в связи с чем биоэнергетика имеет достаточно сложную технологическую цепочку, альтернативой сжигания выступает пиролиз. Так, в работах [3–5] рассматриваются вопросы пиролиза биотоплива.

В работе [6] проведено моделирование электрохимического преобразования химической энергии биотоплива в электричество с использованием топливного элемента прямого окисления угле-

рода. Данная термодинамическая модель рассматривает два этапа преобразования химической энергии (при наличии и отсутствии свободного углерода).

Водородная энергетика является одним из видов альтернативной энергетики. Благодаря тому, что продуктом сгорания водорода является водяной пар, который конденсируется в окружающей среде, а также высокой теплоте сгорания, высокой скорости протекающих процессов и низким энергиям активации при сгорании в кислороде и в воздухе, водородная энергетика является одним из перспективных направлений использования альтернативной энергии. В работе [7] показана перспектива развития гибридной солнечно-водородной энергосистемы в условиях децентрализованного энергоснабжения дальнего востока России и Арктики для жизнеобеспечения островных или удаленных поселений. В [8] дан обзор основных типов и конструкций водородно-кислородных установок различного уровня мощности, рассмотрены основные области их использования в стационарной и автономной энергетике, обозначены главные проблемы, возникающие при разработке, создании и испытании таких установок. В работе [9] приведены результаты экспериментальных исследований и оптимизации процессов смесеобразования, горения и генерации пара в экспериментальном водород-

но-кислородном парогенераторе тепловой мощностью до 200 кВт. В [10] обобщены результаты исследований по разработке и изучению характеристик гетерогенных катализаторов разложения высококонцентрированного пероксида водорода, используемого в качестве монотоплива и окислителя в ракетных двигателях. Использование изобретения [11] (Фортов В.Е. и др.) позволяет полностью исключить выбросы углекислого газа в атмосферу при работе энергетической установки. Принцип работы основан на бескислородном разложении ацетилена на газообразный водород и углерод в виде наночастиц в детонационной камере, соединенной с сепаратором для отделения углерода. В [12] дан краткий обзор материалов разработок по перспективным направлениям водородной энергетики и водородным технологиям.

Существуют разные методы получения водорода, в [13] рассмотрен плазменный электролиз как новый метод производства водорода, который является достаточно быстрым и пригодным для включения в рентабельные системы на месте использования. В ходе исследования разряда между электролитом и не погруженными в него металлическими электродами показано, что ключевым элементом процесса является поверхностный ток, который в основном протекает вблизи границы раздела вода/плазма. В [14] дан обзор работ по получению водорода при плазменном электролизе, проведен его сравнительный анализ с другими методами получения водорода. В [15] рассмотрены мембранные реакторы и показано, что при электронно-пучковой активации в разряженном потоке метана инициируются реакции, приводящие к конверсии метана в молекулярный водород.

Однако до сих пор электролиз является актуальным способом получения водорода [16–19]. Наряду с экспериментальными исследованиями, численное моделирование позволяет исследовать и выявить взаимосвязь внутренних процессов и внешних характеристик для дальнейшей оптимизации работы установок. Существование большого количества работ, посвященных моделированию процессов электролиза, связано с тем, что он до сих пор сохраняет свою актуальность для нанесения высококачественных функциональных гальванических покрытий на основе металлов [20, 27], получения металлов [22–24] и других соединений, очистки загрязненных вод [25–27]. Так, в [28] дан обзор принципа действия и области применения водородных электрохимических систем на основе твердого полимерного электролита, а также описаны применяемые в них мембранные, электродные и каталитические материалы. В [29] представлено современное состояние методов технологического оформления электромембранных процессов разделения растворов для таких отраслей как: химиче-

ская, машиностроительная, биологическая, нефтехимическая и многие другие.

В работе [30] с использованием пакета ANSYS выполнено моделирование функционирующего электролизера для переработки отработанного ядерного топлива методом электролиза в расплавленной соли хлорида лития с добавлением оксида лития. Модель включает в себя: уравнение Навье–Стокса для случая зависимости плотности среды от температуры, уравнение несжимаемости для компоненты скорости жидкости, уравнение теплопроводности с учетом объемного источника тепла, связанного с распадом отработанного ядерного топлива, и джоулева тепловыделения, а также закон Стефана–Больцмана для реального тела и первый закон Кирхгофа (закон сохранения электрического заряда), уравнение Максвелла для напряженности электрического поля и закон Ома. Масса образующегося на электроде вещества рассчитывается исходя из первого закона электролиза Фарадея. Однако стоит заметить, что закон Фарадея выводится для идеального случая протекания единственной реакции, поэтому на практике зачастую количество образовавшегося вещества не совпадает с рассчитываемыми по закону Фарадея. Например, в работе [31] исследуются катодные реакции антрацена и его производных на оксиде кремния. В работе [32] за счет того, что на электроде происходит восстановление не только одновалентных ионов меди, но и двухвалентных, выход по току металлической меди составил 98–99%. Поэтому математические модели ограничиваются уравнениями Нернста–Планка на каждый компонент электролита, а для расчета электрического поля используются уравнение Пуассона или уравнение электронеutrальности [33].

Несмотря на большое количество работ, посвященных моделированию процессов электролиза, математические модели, существующие в настоящее время, нуждаются в адаптации под каждый конкретный электролит и состав электродов, так как процессы, проходящие в разных расплавах и растворах с разным водородным показателем различаются.

На примере водных растворов можно показать, что чистая вода является слабым электролитом и в результате реакции автопротолиза диссоциирует с образованием ионов гидратированного протона – гидрооксония и ионов гидроксида, в щелочных средах концентрация гидрооксония чрезвычайно мала и вода диссоциирует на ион водорода и гидрооксид. Также в зависимости от кислотности среды при общей суммарной записи реакции диссоциации воды будут различаться и стадийные электродные реакции [18]. В первом приближении при анализе эффективности электролизера может интересовать только выход вещества по току,

в этом случае представляется рациональным рассмотреть обратную задачу, возникающую при моделировании приэлектродных процессов.

В данной работе модифицированный метод Хука–Дживса применяется для прогнозирования выхода вещества по току и расчета скоростей приэлектродных реакций по имеющимся экспериментальным данным на примере получения водорода. В дальнейшем рассчитанные для электролизеров с заданными параметрами по данному методу скорости реакций можно использовать в более подробных моделях процессов электролиза для данных электролизеров [34]. Данный вид задач так же может возникать в разрядах с жидкими электродами [35, 36].

ПОСТАНОВКА И МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПО ВЫХОДУ ВОДОРОДА

Несмотря на общую запись суммарной реакции $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$, следует понимать, что она включает в себя как анодные, так и катодные реакции, разделенные между собой межэлектродным расстоянием. Например, на инертных металлах происходит адсорбция водорода за счет реакций $\text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{O}$ (кислые растворы) и $\text{H}_2\text{O} + 2e \rightarrow \text{O} + 2\text{H}^+$ (щелочные растворы). Данные реакции относятся к катодным, на аноде же в зависимости от кислотности среды могут протекать $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}^+ + \text{OH}^-$, $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}$, $2\text{OH}^- + 2e \rightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{O}_2$ в щелочной среде, также при изменении водородного показателя в сторону кислой среды возможны реакции $2\text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$, $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$, $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}^+ + \text{O}_2$.

В данной работе рассматривается электролиз раствора гидроксида калия (KOH), который является сильным основанием, при этом ионы K^+ на электродах не окисляются, они накапливаются в катодном пространстве, и их концентрация уменьшается в анодном с течением времени. При электролизе в щелочной среде раствора KOH на катоде протекают следующие стадийные электрохимические реакции $\text{H}_2\text{O} \xrightarrow{k_1} \text{H}^+ + \text{OH}^-$, $\text{H}^+ + \text{OH}^- \xrightarrow{k_2} \text{H}_2\text{O}$, $\text{H}^+ + e \xrightarrow{k_3} \text{H}$, $\text{H} + \text{H} \xrightarrow{k_4} \text{H}_2$, где k_1, k_2, k_3, k_4 – константы скоростей соответствующих процессов. Реакция диссоциации воды $\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^-$ является гетерогенной и, следовательно, зависит от поверхностной концентрации воды, определяемой площадью электрода.

Данные электрохимические процессы могут быть описаны следующей системой кинетических уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial t} = -k_1 C_{\text{H}_2\text{O}} + k_2 C_{\text{H}^+} C_{\text{OH}^-}, \\ \frac{\partial C_{\text{OH}^-}}{\partial t} = k_1 C_{\text{H}_2\text{O}} - k_2 C_{\text{H}^+} C_{\text{OH}^-}, \\ \frac{\partial C_{\text{H}^+}}{\partial t} = k_1 C_{\text{H}_2\text{O}} - k_2 C_{\text{H}^+} C_{\text{OH}^-} - k_3 C_{\text{H}^+}, \\ \frac{\partial C_{\text{H}}}{\partial t} = k_3 C_{\text{H}^+} - k_4 C_{\text{H}}^2, \\ \frac{\partial C_{\text{H}_2}}{\partial t} = k_4 C_{\text{H}}^2, \end{cases} \quad (1)$$

где $C_{\text{H}_2\text{O}}, C_{\text{H}^+}, C_{\text{OH}^-}, C_{\text{H}_2}$ – концентрации воды, ионов водорода, гидроксильной группы и молекул водорода соответственно.

На константы скоростей кинетических процессов и значений концентраций действуют следующие ограничения:

$$k_1 \geq 0, \quad k_2 \geq 0, \quad k_3 \geq 0, \quad k_4 \geq 0; \quad (2)$$

$$C_{\text{H}_2\text{O}} \geq 0, \quad C_{\text{H}^+} \geq 0, \quad C_{\text{OH}^-} \geq 0, \quad C_{\text{H}_2} \geq 0. \quad (3)$$

И начальные условия представимы в следующем виде:

$$\begin{cases} C_{\text{H}_2\text{O}}|_{t=0} = C_1; \quad C_{\text{H}^+}|_{t=0} = C_2; \\ C_{\text{OH}^-}|_{t=0} = C_3; \quad C_{\text{H}_2}|_{t=0} = C_4. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь C_1, C_2, C_3, C_4 – константы, отвечающие начальным данным моделируемого эксперимента и рассчитывающиеся исходя из процентной концентрации электролита, ионного произведения воды и коэффициента растворимости водорода.

При известных значениях констант скоростей катодных процессов k_1, k_2, k_3, k_4 задача прогнозирования водорода не представляет собой особой сложности и может быть численно решена методом Рунге–Кутты для решения систем, состоящих из задач Коши. Например, в работе [37] посредством явного метода типа Рунге–Кутты–Мерсона четвертого порядка точности проведено решение системы кинетических уравнений, описывающих пиролиза этана. В [38] методом Рунге–Кутты–Мерсона решена кинетическая модель реакторного блока каталитического риформинга, при этом сырье (бензиновая фракция) представляется состоящим из трех обобщенных углеводородов, имеющих одинаковое число углеродных атомов: нафтенового, парафинового и ароматического, которые могут подвергаться взаимным превращениям. Метод Рунге–Кутты в сочетании с другими методами может использоваться как составная часть численного алгоритма расчета более сложных задач. На это указывал и Фортов В.Е. В [39] наряду с другими методами использовался метод Рунге–Кутты третьего порядка точности для интегрирования по времени при реализации компьютерного моделирования поведения ней-

Таблица 1. Стехиометрические числа параллельных реакций при выделении водорода

Реакции	e_k	$\mu_\gamma(\text{I})$	$\mu_\gamma(\text{II})$
$\text{H}_2\text{O} \xrightarrow{k_1} \text{H}^+ + \text{OH}^-$	0	1	2
$\text{H}^+ + \text{OH}^- \xrightarrow{k_2} \text{H}_2\text{O}$	0	1	–
$\text{H}^+ + e \xrightarrow{k_3} \text{H}$	1	–	2
$\text{H} + \text{H} \xrightarrow{k_4} \text{H}_2$	0	–	1

Примечание. e_k – количество электронов участвующих в реакции, $\mu_\gamma(\text{I})$ – стехиометрическое число первой ветви параллельных реакций, $\mu_\gamma(\text{II})$ – стехиометрическое число второй ветви параллельных реакций.

трально устойчивых волн с использованием уравнений состояния.

В данном случае решается обратная задача, когда константы скоростей неизвестны и дана концентрация молекулярного водорода при выходе в определенные моменты времени. Для решения задачи минимизируется функционал $M(C_{\text{H}_{2,1}}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}) = \sum_{i=1}^n (C_{\text{H}_{2,\text{экс}},i} - C_{\text{H}_{2,i}})^2$, где $C_{\text{H}_{2,\text{экс}},i}$ – экспериментальные значения концентрации водорода в моменты времени t_i , $i = 1, \dots, n$; $C_{\text{H}_{2,i}}(k_1, k_2, k_3, k_4)$ – расчетная концентрация водорода в этот же момент, заданная как функция от скоростей реакций.

Алгоритмы решения таких задач зависят как от количества стадийных реакций, так и от их разветвленности. В [40] показано, что в обратных задачах химической кинетики для обработки кинетических данных наиболее важное значение имеют структурные особенности уравнений кинетики, среди которых нелинейный характер зависимости откликов от параметров и неявный вид связей зависимых переменных с параметрами и факторами. В работе [41] разработаны алгоритмы определения числа независимых нелинейных параметрических функций и их взаимосвязь со скоростями кинетических констант реакций пиролиза этана.

В данной работе поиск минимума функционала $M(C_{\text{H}_{2,1}}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}})$ осуществляется с помощью модифицированного метода Хука–Дживса с проверкой ограничений (2), (3). При этом расчет концентрации $C_{\text{H}_{2,i}}$ как функции, зависящей от скоростей констант стадийных реакций, производится решением системы (1) с начальными условиями (4) методом Рунге–Кутты для системы уравнений четвертого порядка.

Метод Хука–Дживса относится к методам прямого поиска, опирается непосредственно на значение функционала, от которого ищется минимум, происходит итерационно и включает в себя два этапа. Первый этап заключается в исследуемом

поиске вокруг базисной точки, на втором этапе происходит поиск по образцу.

Координаты k_1, k_2, k_3, k_4 первоначальной базисной точки b_1 задаются по экспериментальным данным согласно лимитирующей скорости реакций $k_{\text{лим}} = (1/(C_{\text{H}_2\text{O}} - C_{\text{H}_2}) - 1/C_{\text{H}_2\text{O}})/t$ и стехиометрическим числам, представленным в табл. 1, а также выбирается первоначальный вектор приращений h_1, h_2, h_3, h_4 , где h_l – шаг по координате k_l , $l = 1, \dots, 4$.

Исследующий поиск вокруг базисной точки происходит по каждой координате отдельно и включает в себя следующую последовательность шагов:

1) методом Рунге–Кутты производится расчет системы (1) с начальными условиями (2) в точках $b_1(k_1, k_2, k_3, k_4)$, $b_{1-h_1}(k_1 - h_1, k_2, k_3, k_4)$, $b_{1+h_1}(k_1 + h_1, k_2, k_3, k_4)$ для вычислений значений концентрации $C_{\text{H}_{2,1}}^b, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^b$; $C_{\text{H}_{2,1}}^{b-h_1}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^{b-h_1}$; $C_{\text{H}_{2,1}}^{b+h_1}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^{b+h_1}$. Здесь $C_{\text{H}_{2,i}}^q$ – концентрация $C_{\text{H}_{2,i}}$ в точке $q = b_{1-h_1}, b, b_{1+h_1}$. Соответственно, если уменьшение координаты k_1 на заданный для нее шаг h_1 приведет к тому, что нарушится ограничение (2), а именно $k_1 - h_1 < 0$, то в расчет берется только $C_{\text{H}_{2,1}}^b, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^b$ и $C_{\text{H}_{2,1}}^{b+h_1}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^{b+h_1}$, аналогично поступаем и в случае нарушения ограничения (3).

2) Находятся значения функционала $M(C_{\text{H}_{2,1}}^b, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^b)$, $M(C_{\text{H}_{2,1}}^{b+h_1}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^{b+h_1})$, $M(C_{\text{H}_{2,1}}^{b-h_1}, \dots, C_{\text{H}_{2,n}}^{b-h_1})$, и за новую координату k_1 принимается то из значений $k_1 - h_1$, k_1 , $k_1 + h_1$, при котором функционал M минимален; данные итерации проводятся до тех пор, пока координата k_1 не перестает меняться.

3) Затем осуществляется переход к поиску по следующей координате.

В результате первого этапа получаем новую точку b_1' , в которой был достигнут по координатный минимум. Если первоначальная базисная точка b_1 совпадает с вновь получившейся точкой b_1' , то поиск вокруг базисной точки повторяется с уменьшением компонент вектора по координатных приращений; в противном случае осуществляется поиск по образцу. В нем за новую базисную точку берутся значения $b_1', b_1 + 2(b_1 - b_1')$, при которых опять значение функционала M минимально. Условием выхода является ограничение на размер шага h_l .

Данный численный алгоритм позволяет прогнозировать выход водорода, находить константы скоростей приэлектродных процессов в соответствии с заданными экспериментальными данными по выходу, а также рассчитывать концентра-

ции веществ, участвующих в приэлектродных процессах.

РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ПО ВЫХОДУ ВОДОРОДА НА КАТОДЕ

Данный вычислительный алгоритм верифицирован на натурном эксперименте, описанном в [17]. При этом отличие математической модели данной работы от предложенной в работе [17], в том что она описывает стадийное протекание анодных и катодных реакций по отдельности, не объединяя их в общую реакцию, а предложенный алгоритм позволяет существенно уменьшить количество необходимых для построения прогноза экспериментальных данных.

По данным [17], электролизер имеет внутренний диаметр 50 мм, рабочая площадь электродов – 60 см², высота уровня электролита – 300 мм. Электролит является 30%-ным раствором КОН. Так как температура в электролизере поддерживалась постоянной с помощью регулирующего потен-

циометра, то температуру электролита считаем постоянной, согласно приведенным в [17] данным.

При выводе начальных условий на 100 а. е. м. воды (H₂O) приходится приблизительно 42.86 а. е. м. КОН. Так как КОН является сильным основанием и при растворении в воде распадается на ионы полностью, при этом один моль КОН дает один моль OH⁻ (KOH → K⁺ + OH⁻), то на 100 а. е. м. (т.е. на 5.6 моля H₂O) приходится 0.764 моля OH⁻. Исходя из ионного произведения воды, равно $C_{H^+}C_{OH^-} \approx 10^{-14}$, в качестве начального приближения имеем 13×10^{-15} моля H⁺. Начальную концентрацию водорода принимаем нулевой, не учитывая растворенный в воде водород.

В табл. 2 приведено сравнение экспериментальных данных по выходу водорода работы [17] с расчетными данными при силе тока 0.5 А и температуре 60°C. Звездочкой отмечены данные, соответствующие моментам времени, в которые проводится минимизация по экспериментальной концентрации. В табл. 3 приведено сравне-

Таблица 2. Сравнение экспериментальных данных по выходу водорода с расчетами при 0.5 А и 60°C

t, ч	Эксперименты	Расчеты		Расчеты		Расчеты	
	C _{H₂} , %	C _{H₂} , %	относительное отклонение, %	C _{H₂} , %	относительное отклонение, %	C _{H₂} , %	относительное отклонение, %
0.07	0.00874	0.0079	9.6	0.0079	9.6	0.0083	5
0.14	0.01672	0.0158*	5.5	0.0159	4.9	0.0167*	0.1
0.21	0.0292	0.0238	18	0.0239	18	0.0251	14
0.28	0.0348	0.0317*	8.9	0.0319	8.3	0.0336	3.4
0.35	0.04	0.0397*	0.7	0.0400*	0	0.0421	5.2
0.42	0.0484	0.0476	1.6	0.0481	0.6	0.0507	4.7

Таблица 3. Сравнение экспериментальных данных по выходу водорода с расчетами при 1 А и 80°C

t, ч	Эксперименты	Расчеты	
	C _{H₂} , %	C _{H₂} , %	относительное отклонение, %
0.07	0.0172	0.0162	5.5
0.14	0.0352	0.0325	7.7
0.21	0.052	0.0489	5.9
0.28*	0.0654	0.0654	0
0.35	0.08	0.0820	2.5
0.42	0.0892	0.0988	10.7

Таблица 4. Стехиометрические числа параллельных реакций при выделении кислорода

Электрохимические реакции	e_k	$\mu_\gamma(\text{I})$	$\mu_\gamma(\text{II})$
$\text{H}_2\text{O} \xrightarrow{k_1} \text{H}^+ + \text{OH}^-$	0	1	2
$\text{H}^+ + \text{OH}^- \xrightarrow{k_2} \text{H}_2\text{O}$	0	1	–
$2\text{OH}^- + 2e \xrightarrow{k_3} \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	2	–	2
$\text{O} + \text{O} \xrightarrow{k_4} \text{O}_2$	0	–	1

ние экспериментальных данных по выходу водорода работы [17] с расчетными данными при силе тока 1 А и температуре 80°C. Звездочка – момент времени, в который проводится минимизация по экспериментальной концентрации. В целом расчеты показали хорошее согласие с экспериментальными данными, относительное отклонение составило не более 11%, за исключением случая в 0.21 ч при 0.5 А и 80°C.

РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ПО ВЫХОДУ КИСЛОРОДА НА АНОДЕ

По данной методике для предложенного натурального эксперимента также был спрогнозирован выход кислорода на аноде по следующей схеме электрохимических реакций: $\text{H}_2\text{O} \xrightarrow{k_{a1}} \text{H}^+ + \text{OH}^-$; $\text{H}^+ + \text{OH}^- \xrightarrow{k_{a2}} \text{H}_2\text{O}$; $2\text{OH}^- + 2e \xrightarrow{k_{a3}} \text{O} + \text{H}_2\text{O}$; $\text{O} + \text{O} \xrightarrow{k_{a4}} \text{O}_2$.

В этом случае математическая модель содержит систему кинетических уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial t} = -k_{a1}C_{\text{H}_2\text{O}} + k_{a2}C_{\text{H}^+}C_{\text{OH}^-} + k_{a3}C_{\text{OH}^-}^2, \\ \frac{\partial C_{\text{OH}^-}}{\partial t} = k_{a1}C_{\text{H}_2\text{O}} - k_{a2}C_{\text{H}^+}C_{\text{OH}^-} - k_{a3}C_{\text{OH}^-}^2, \\ \frac{\partial C_{\text{O}}}{\partial t} = k_{a3}C_{\text{OH}^-}^2 - k_{a4}C_{\text{O}}^2, \\ \frac{\partial C_{\text{O}_2}}{\partial t} = k_{a4}C_{\text{O}}^2, \\ \frac{\partial C_{\text{H}^+}}{\partial t} = k_{a1}C_{\text{H}_2\text{O}} - k_{a2}C_{\text{H}^+}C_{\text{OH}^-}. \end{cases} \quad (5)$$

Начальные условия (4) дополнены условиями на концентрацию атомарного и молекулярного кислорода $C_{\text{O}^+}|_{t=0} = 0$, $C_{\text{O}_2}|_{t=0} = C_5$; ограничения (2), (3) дополнены неравенством $C_{\text{O}} \geq 0$.

Начальные значения концентрации такие же, как и для водорода, так как до начала электролиза распределение компонент электролита в межэлектродном пространстве можно считать равномерным. Концентрацию растворенного кислорода в начальный момент времени считаем нулевой. За лимитирующую стадию взято соединение атомов кислорода в молекулу. Стехиометрические числа, соответствующие данным электрохимическим реакциям выхода кислорода, представлены в табл. 4.

Численный алгоритм решения аналогичен изложенному выше, за исключением реализации метода Рунге–Кутты, где были внесены изменения относительно расчета правых частей уравнений системы (5).

В табл. 5 приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных по выходу кислорода. Экспериментальные значения, по которым прове-

Таблица 5. Сравнение экспериментальных данных по кислороду из работы [17] с расчетами данной работы

$t, \text{ч}$	Концентрация кислорода								
	0.5 А, $T = 60^\circ\text{C}$			0.75 А, $T = 70^\circ\text{C}$			1 А, $T = 80^\circ\text{C}$		
	эксперименты	расчеты		эксперименты	расчеты		эксперименты	расчеты	
		$C_{\text{O}_2}, \%$	$C_{\text{O}_2}, \%$ относительное отклонение, %		$C_{\text{O}_2}, \%$	$C_{\text{O}_2}, \%$ относительное отклонение, %		$C_{\text{O}_2}, \%$	$C_{\text{O}_2}, \%$ относительное отклонение, %
0.07	0.0760	0.0722	5	0.1507	0.1173	22	0.1472	0.1405	4.5
0.14	0.1363	0.1439	5.5	0.2445	0.2374	2.9	0.2816	0.2803	0.4
0.21	0.2336	0.2157	7.6	0.3616	0.3452	4.5	0.4046	0.4049	0.07
0.28	0.2912	0.2874	1.3	0.4480	0.4476	0.08	0.525	0.5246	0.07
0.35	0.352	0.3592	1.9	0.5440	0.5485	0.8	0.64	0.6432	0.5
0.42	0.3872	0.4310	11.5	0.6400	0.649	1.4	0.7040	0.7615	8.1

дена минимизация, соответствуют $t_1 = 0.14$ ч, $t_2 = 0.28$ ч.

В целом численные расчеты хорошо согласуются с экспериментальными данными по выходу кислорода, кроме случая в 0.07 ч при 0.75 А, $T = 70^\circ\text{C}$, где относительное отклонение расчетов от экспериментальных данных в целом составило 22%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе реализован метод численной оптимизации задач химической кинетики. Данный численный алгоритм позволяет находить скорости констант в приэлектродных процессах в соответствии с заданными экспериментальными данными по выходу, а также рассчитывать концентрации веществ, участвующих в приэлектродных процессах, на конкретные моменты времени. Проведено численное моделирование приэлектродных процессов функционирующего электролизера. Выполнен сравнительный анализ результатов расчета выхода водорода и кислорода в процессе электролиза раствора гидроксида калия при постоянной температуре и данных, полученных в ходе натурального эксперимента [13]. Результаты численных исследований хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Также данный метод может быть применен в задачах гальванотехники для определения выхода вещества.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-79-30062).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фортон В.Е., Попель О.С.* Возобновляемые источники энергии в мире и в России // Энерг. вестн. 2016. № 16. С. 20.
2. *Фортон В.Е., Попель О.С.* Состояние развития возобновляемых источников энергии в мире и в России // Теплоэнергетика. 2014. № 6. С. 4.
3. *Promdee K., Vitidsant T.* Пиролиз биотоплива императы цилиндрической в реакторе с двухшнековым питателем // Теплоэнергетика. 2014. № 8. С. 74.
4. *Чирков В.Г.* МИНИ-ТЭС На пиролизном топливе // Теплоэнергетика. 2007. № 8. С. 35.
5. *Лавренов А.В., Богданец Е.Н., Чумаченко Ю.А., Лихолобов В.А.* Каталитические процессы получения углеводородных биотоплив с использованием масложирового сырья. Современные подходы // Катализ в промышленности. 2011. № 3. С. 41.
6. *Жук А.З., Иванов П.П., Киселева Е.А.* Моделирование электрохимического преобразования химической энергии биотоплива в электричество // ТВТ. 2020. Т. 58. № 2. С. 300.
7. *Тимофеев Д.И.* Водородный переход в локальной энергетике: зарубежный опыт и российские перспективы // Энергетическая политика. 2019. № 4(142). С. 86.
8. *Счастливец А.И., Дуников Д.О., Борзенко В.И., Шматов Д.П.* Водородно-кислородные установки для энергетики // ТВТ. 2020. Т. 58. № 5. С. 809.
9. *Борзенко В.И., Счастливец А.И.* Эффективность генерации пара в водородно-кислородном парогенераторе киловаттного класса мощности // ТВТ. 2018. Т. 56. № 6. С. 946.
10. *Гусейнов Ш.Л., Федоров С.Г., Косых В.А., Стороженко П.А.* Катализаторы разложения пероксида водорода, используемые в ракетных двигателях (обзор) // Журн. прикл. химии. 2020. Т. 93. Вып. 4. С. 459.
11. *Голуб В.В., Гуренцов Е.В., Емельянов А.В. и др.* Экологически чистая энергетическая установка на основе камеры детонационного горения. Патент РФ № 2564658. 2015.
12. *Chaffin J.H., Bobbio S.M., Inyang H.I., Kaanagbara L.* Hydrogen Production by Plasma Electrolysis // J. Energy Eng. 2006. V. 132(3). С. 104.
13. *Bespalko S.* Recent Advances in Hydrogen Generation by Contact Glow Discharge Electrolysis: Review // J. Int. Sci. Publ.: Mater., Methods Technol. 2014. V. 8. P. 355.
14. *Шарафутдинов Р.Г., Зарвин А.Е., Мадирбаев В.Ж., Гагачев В.В., Гартвич Г.Г.* Получение водорода из метана в электронно-пучковой плазме // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. № 15. С. 23.
15. *Gatard V., De Masi D., Chattot R. et al.* FeNi₃ and Ni-Based Nanoparticles as Electrocatalysts for Magnetically Enhanced Alkaline Water Electrolysis // Electro-catalysis. 2020. V. 11. P. 567.
16. *Бабаев Р.К.* Исследование кинетических закономерностей получения водорода электролизом воды // Проблемы науки. 2018. № 4(28). С. 31.
17. *Бабаев Р.К., Алиев С.А.* Исследование кинетических закономерностей получения водорода электролизом воды // Проблемы науки. 2018. № 4(28). С. 31.
18. *Скуратник Я.Б., Покровский А.К.* Электролиз и водородная энергетика на транспорте // Вестник транспорта. 2003. № 8. С. 32.
19. *Григорьев С.А., Бессарабов Д.Г.* Твердополимерный электролиз с деполяризацией анода для производства водорода // Транспорт на альтернативном топливе. 2012. № 6 (30). С. 69.
20. *Данильчук В.В., Шульман А.И., Готеляк А.В., Ющенко С.П., Коваленко К.В., Дикусар А.И.* Электроосаждение FE-W-покрытий из цитратной ванны с использованием разделенных анодного и катодного пространств // Журн. прикл. химии. 2020. Т. 93. № 3. С. 372.
21. *Ченцова Е.В., Соловьева Н.Д., Почкина С.Ю., Терин Д.В.* Влияние параметров реверсивного режима электролиза на состав и свойства сплава цинк-никель-кобальт // Журн. прикл. химии. 2020. Т. 93. № 3. С. 365.
22. *Николаев А.Ю., Ясинский А.С., Суздальцев А.В., Поляков П.В., Зайков Ю.П.* Электролиз алюминия в расплавах и суспензиях KF-ALF₃-AL₂O₃ // Расплавы. 2017. № 3. С. 205.
23. *Смирнова Н.В., Куриганова А.Б., Леонтьева Д.В., Новикова К.С., Ерошенко В.Д., Кубанова М.С., Бринк И.Ю.* Нестационарный электролиз: перспективы получения высокодисперсных материала-

- лов // Совр. пробл. науки и образования. 2012. № 6. С. 714.
24. *Варенцов В.К., Варенцова В.И.* Электролиз с углеродными волокнистыми электродами в процессах извлечения платиновых металлов из минерального и техногенного сырья // Журн. прикл. химии. 2020. Т. 93. № 7. С. 1033.
25. *Ryan D.R., Maher E.K., Heffron J., Mayer B.K., McNamara P.J.* Electrocoagulation-electrooxidation for Mitigating Trace Organic Compounds in Model Drinking Water Sources // Chemosphere. 2021. V. 273. 129377.
26. *Annam Renita A., Harsha Vardhan Kilaru, Senthil Kumar P., Ngueagni P. Tsopbou, Abilarasu A., Nath Subi, Kumari Pallavi, Saravanan R.* Effective Removal of Malachite Green Dye from Aqueous Solution in Hybrid System Utilizing Agricultural Waste as Particle Electrodes // Chemosphere. 2021. V. 273. 129634.
27. *Кулаков А.В., Ранцев-Картинов В.А., Мельников В.П., Паповяц А.К.* Объемный электролиз воды систем охлаждения промышленных предприятий и реакторов АЭС и его влияние на безопасность // Изв. вузов. Ядерная энергетика. 2017. № 2. С. 5.
28. *Григорьев С.А.* Электрохимические системы с твердым полимерным электролитом (научный обзор) // Международный научный журнал Альтернативная энергетика и экология. 2014. № 10(150). С. 8.
29. *Ковалева О.А., Чичеров Д.О., Коновалов Д.Н., Ковалев С.В.* Анализ аппаратурного и технологического оформления процессов электромембранного разделения растворов и факторы их сопровождающие // Вестник Технологического университета. 2021. Т. 24. № 7. С. 36.
30. *Галашев А.Е., Стаханов В.В., Зайков Ю.П.* Моделирование процессов электролизера для переработки отработанного ядерного топлива // ТВТ. 2020. Т. 58. № 3. С. 454.
31. *Samuel J. Shin, Sangmee Park, Jin-Young Lee, Jae Gyeong Lee, Jeongse Yun, Dae-Woong Hwang, Taek Dong Chung.* Cathodic Electroorganic Reaction on Silicon Oxide Dielectric Electrode // Proc. NASA. 2021. V. 117(52). P. 32939.
32. *Савельева Е.А., Дикун М.П.* Эффективность очистки медьсодержащих растворов импульсным электролизом // Вестн. Тамбовск. гос. техн. ун-та. 2017. Т. 23. № 4. С. 672.
33. *Кашапов Л.Н., Фахретдинова Э.И., Чебакова В.Ю.* О математических моделях процессов электролиза воды // Тенденции развития науки и образования. 2020. № 58-4. С. 74.
34. *Askhatov R.M., Kashapov N.F., Kashapov R.N., Chebakova V.Y.* Numerical Modelling of Spatial Distributions of the pH Value and Electric Field in a Liquid Electrode // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2020. V. 971(5). 052031.
35. *Kashapov R.N., Kashapov L.N., Kashapov N.F.* Investigation of Parameters of Low-temperature Gas Discharge Plasma with Liquid Electrodes upon Receipt of Metal Powder // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1328(1). 012104.
36. *Kashapov R.N., Kashapov L.N., Kashapov N.F.* Investigation of CoCr Micropowder Obtaining Process in Gas Discharge with Liquid Electrodes // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1328(1). 012105.
37. *Новиков Е.А.* Численное моделирование пиролиза этана модифицированным методом Мерсона // Вестн. Ижевск. гос. техн. ун-та. 2010. № 4. С. 166.
38. *Кузичкин А.А.* Разработка математической модели процесса каталитического риформинга // Вестн. НГИЭИ. 2017. № 9(76). С. 23.
39. *Конюхов А.В., Лихачев А.П., Фортон В.Е. и др.* О нейтральной устойчивости ударной волны в реальных средах // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90. № 1. С. 21.
40. *Зейналов М.З., Гаджибалаева З.М., Швецова-Шиловская Т.Н., Магомедбеков У.Г.* Анализ априорной идентифицируемости параметров математических моделей химической кинетики // Вестн. Даг. гос. ун-та. Сер. 1: Естественные науки. 2014. № 6. С. 136.
41. *Спивак С.И., Исмаилова А.С.* Информативность кинетических измерений при идентификации механизмов сложных реакций // ХВЭ. 2014. Т. 48. № 6. С. 431.

УДК 537.8

ИЗЛУЧАТЕЛЬНО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОХОЖДЕНИЯ СВЕРХШИРОКОПОЛОСНЫХ СИГНАЛОВ В АТМОСФЕРЕ И ИОНОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

© 2021 г. М. В. Ефанов¹, Е. Ф. Лебедев¹, *, А. В. Ульянов¹, В. М. Федоров¹, М. А. Шурупов¹

¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: lebedev@ihed.ras.ru

Поступила в редакцию 08.09.2021 г.

После доработки 04.10.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

Создан и отработан в предварительных экспериментах излучательный и измерительный комплексы для исследования деформации сверхширокополосных импульсов в атмосфере и ионосфере Земли. Сверхширокополосные модули, объединенные в синхронизированные активные антенные решетки, совместно с разработанной квазирупорной антенной повышенной чувствительности позволяют проводить исследования на расстояниях более десятков километров и получать новые данные для различных практических применений.

DOI: 10.31857/S0040364421060028

ВВЕДЕНИЕ

Сверхширокополосные (СШП) электромагнитные импульсы радиочастотного диапазона привлекают в последнее время внимание разработчиков новой электронной техники из-за преимуществ, связанных с шириной спектра, достигающей единиц гигагерц. Именно это свойство обеспечивает, в частности, возможность визуализации объектов при СШП-локации, зондирования поверхности Земли, а также многоканального и многочастотного проникновения наведенных СШП-сигналов помехи внутрь экранированных корпусов, содержащих электронные системы управления.

В ряде работ, например [1–7], рассмотрены общие вопросы прохождения электромагнитных импульсов радиочастотного диапазона в неоднородных и нелинейных средах. Опубликованные работы выявили искажения импульсов из-за поглощения и дисперсии при распространении в свободной атмосфере вследствие резонансного воздействия на молекулы и в загрязненной атмосфере из-за дождя и примесей [8–12], а также в ионосфере из-за взаимодействия с электронами, в том числе в замагниченной плазме [2, 13–20]. Рассмотрены также проблемы искажения импульсов при распространении вдоль земной поверхности, в том числе с растительностью [21–30].

Однако экспериментальное подтверждение этих результатов проведено в малой части публикаций [21, 23, 27, 29, 30], причем некоторые из них посвящены узкополосным СВЧ-сигналам, что оказа-

лось необходимым для понимания процессов резонансного поглощения и рассеяния в различных средах. Малое число и фрагментарность выполненных опытов с СШП-сигналами препятствует надежному их использованию при новых технических разработках.

Наименее изученными являются вопросы прохождения СШП-сигналов в атмосфере. Две расчетные работы [9, 12], основанные на учете изменения амплитуды спектральных линий СШП-сигналов при резонансном поглощении молекулами воздуха, показывают, что заметное искажение зависимости импульсов от времени начинается с длительностей менее 50 пс и дальностей 10 км и более. Как раз такие длительности имеют значение для практических применений из-за малых размеров апертур излучающих антенн и пригодности для зондирования поверхностного покрова Земли с больших высот. Однако прямые эксперименты с использованием СШП-импульсов в атмосфере отсутствуют, а могли бы существенно расширить представления о реальной деформации сигналов.

Неизвестны также какие-либо эксперименты по прохождению СШП-сигналов в ионосфере, хотя в теоретических работах [13–20] прогнозируются заметные воздействия из-за неоднородностей вдоль трасс длиной в десятки и сотни километров.

Поэтому комплексные исследования прохождения СШП-сигналов в атмосфере и ионосфере Земли могут способствовать принятию обоснованных решений по применению СШП-сигналов в новых технологиях.

Постановка и реализация таких экспериментов в реальных условиях в атмосфере (и особенно в ионосфере) являются сложной и дорогостоящей задачей. Поэтому разработка оптимального излучательного (достаточной мощности) и измерительного (необходимой чувствительности) комплексов (с учетом заметного уменьшения амплитуд сигналов на больших дальностях и влияния наземных условий на распространение волны по трассе излучатель—измеритель) требует тщательной последовательности в подготовке и организации экспериментов.

Описываемые в статье разработки и проведенные начальные эксперименты в свободной атмосфере на практически интересных расстояниях (до 10 км) предусматривают поэтапное системное исследование с наращиванием числа синхронизированных СШП-модулей и, соответственно, увеличением расстояний просвечивания для преодоления потери амплитуды измеряемых сигналов и превышением ее над уровнем отраженных от земной поверхности шумов.

ОСНОВНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ К ПОСТАНОВКЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В АТМОСФЕРЕ

В связи со стратификацией параметров атмосферы Земли с высотой первоначальные исследования целесообразно проводить вдоль земной поверхности по траектории с параметрами, близкими к однородным. Одновременный подъем излучателя и измерителя на заметные высоты, на которых влияние земной поверхности было бы исключено, фактически удваивает затраты и вносит дополнительные трудности юстировки диаграмм направленности. Еще одним ограничением является предельный подъем самого доступного из воздушных носителей (привязного аэростата) на высоты 100–300 м при полезной нагрузке (оборудование, пилот и один-два оператора) массой 250 кг. В связи с этим масса разработанных в данной работе СШП-излучателей составляет менее 100 кг, масса измерителя — 80 кг.

Возможны два варианта размещения в таких опытах с аэростатом системы излучатель—измеритель.

В одном варианте излучатель размещается в корзине воздушного шара, измеритель — на доступной для обслуживания высоте над поверхностью земли (например, 3–10 м). Ограничение по санитарным нормам на присутствие операторов и пилота в непосредственной близости от СШП-излучателя лимитирует время включения единицами секунд, что снижает вероятность надежной юстировки и регистрации на земле сигнала приемником измерителя. Более важное ограничение связано с большим размером площади, занимаемой отраженным от земной поверхности сигналом, — до сотни

метров при расстоянии 10 км (при ширине диаграммы направленности излучателя 5° и более).

Предпочтительным является размещение измерителя в корзине воздушного шара, а излучателя — на доступной для обслуживания высоте 3–10 м над поверхностью земли. В этом случае измеритель виден с места установки излучателя под углом 3° – 5° , сравнимом с шириной диаграммы направленности разработанного излучателя $3 \times 3 (\pm 5^\circ)$, и влияние земной поверхности будет уменьшено. Расположенные в корзине измерительная полосковая линия ИППЛ (диаграмма шириной более $\pm 90^\circ$) и более чувствительный измерительный СШП-раскрыв (диаграмма шириной $\pm 30^\circ$) получают отраженный от земной поверхности помеховый сигнал малой амплитуды. Санитарные нормы при расположении оператора на земле выполняются удалением на необходимое расстояние от излучателя с помощью применения оптронных развязок в системе управления.

ОСНОВНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ К ПОСТАНОВКЕ ЭКСПЕРИМЕНТА В ИОНОСФЕРЕ

Эксперименты по прохождению СШП-сигналов в ионосфере требуют специальной подготовки и организации в связи с необходимостью применения спутниковых или ракетных носителей и значительной дороговизны. Наиболее доступным вариантом является использование метеорологических ракет типа МР-300, рассчитанных на полезную нагрузку до 150 кг при максимальной высоте подъема 300 км. Кроме того, имеется практический опыт запусков аналогичных ракет прежнего поколения МР-12 на высоты около 140 км [31, 32]. Эксперименты в ионосфере требуют их подготовки кооперацией организаций нескольких ведомств (обслуживание запусков, траекторные измерения в полете, модернизация ракеты под конкретную нагрузку). Стоимость работ может достигать несколько сотен миллионов рублей по сравнению с относительно недорогими опытами в атмосфере (менее десяти миллионов).

Реализация ракетного эксперимента в ионосфере может быть аналогичной эксперименту “Флак-сус” [31] с активным плазменным воздействием на ионосферу. В опытах с СШП-излучателем он размещается в головной части ракеты с ориентацией антенны на Землю. При достижении ракетой апогея головная часть отстреливается и удаляется от ракеты на километровое расстояние для полета по отдельной траектории падения. Предпринимаются меры для ориентации СШП-антенны на полигон, на котором размещается измерительный комплекс на основе сборок ИППЛ-1, квазирупорного раскрыва и осциллографа. Идет регистрация сигнала на всем пути снижения излучателя. На высоте около 60 км выбрасывается тормозной парашют, обеспечивающий дополнительную стабили-

зацию на Землю. Вблизи поверхности Земли выдвигаются штанги порохового торможения, что может способствовать сохранению излучателя для подготовки к следующему пуску. Квазирупорная антенна приемника обеспечивает чувствительность к СШП-сигналу на уровне 40 В на его входе на каждый киловольт на метр падающей напряженности электрического поля, поэтому приемник способен регистрировать сигналы на всей траектории длиной 300 км (при запуске излучателя 3×3 с параметром $U_{rad} = ER = 100$ кВ). ИППЛ с чувствительностью 0.3 В на каждый киловольт на метр напряженности электрического поля начинает регистрацию с высоты около 5 км.

Для получения надежных данных целесообразно иметь возможность проведения, по крайней мере, двух запусков. В отличие от экспериментов в атмосфере ракетные пуски требуют специальной подготовки СШП-аппаратуры, рассчитанной на вибрации, и ускорений до 20g.

РЕАЛИЗАЦИЯ ИЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ СШП-СИСТЕМЫ

СШП-излучатели, в том числе с полупроводниковыми генераторами импульсных токов, достаточно широко используются для исследований и разработок в отечественной и зарубежной практике. Научно-производственная компания “ФИД-техника” (Санкт-Петербург) разработала и выпускает [33] тиражом в десятки экземпляров в год практически весь необходимый для исследований набор генераторов тока. Генераторы сделаны в модульном исполнении с разной номенклатурой импульсов: длительность от 50 пс до 1 нс, с частотой следования от 1000 до 100000 импульс/с. Частота следования импульсов ограничена средней мощностью около 200 Вт полупроводникового коммутирующего прибора. Масса таких генераторных модулей тока составляет всего около 3 кг при импульсной электрической мощности от 2 до 200 МВт (зависит от амплитуды выходного напряжения от 2 до 100 кВ и частоты следования импульсов).

Вес аппаратуры излучающего СШП-модуля, построенного на этих генераторах тока (вместе с апертурной антенной, аккумулятором на 20 мин автономной работы и блоком управления), составляет около 10 кг. Такие энергетические удельно-весовые параметры СШП-излучателей на порядок превышают характеристики электромагнитных излучателей, использующих искровые разрядники, что позволяет размещать их на носителях для проведения экспериментов не только в атмосфере, но и в ионосфере. Основные сведения о созданных и проектируемых СШП-излучателях, в том числе объединенных в синхронизированные активные антенные решетки, изложены в публикациях [34–42].

В основу созданной СШП-излучательной системы для исследования деформации импульсов в атмосфере положен модуль (рис. 1), имеющий длительность импульсов около 50 пс, которая не-

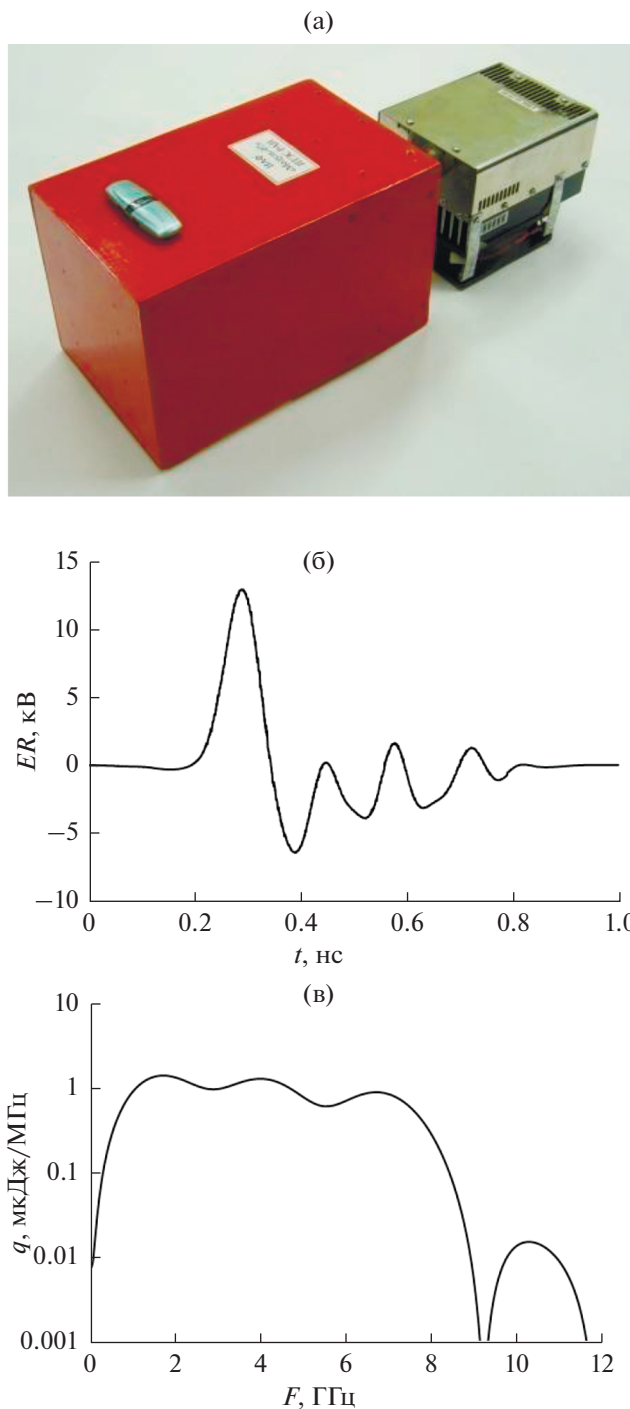


Рис. 1. Фотография опорного модуля (а), используемого в экспериментах (электродинамический потенциал $U_{rad} = ER = 13$ кВ, масса – 10 кг, размер излучающей апертуры – 16×16 см²), осциллограмма напряженности электрического поля (б) и спектральная плотность энергии излученного импульса (в).

обходима для проверки основного расчетного результата работы [12].

Объединение таких модулей в синхронизированные антенные решетки позволяет проводить эксперименты в атмосфере на дистанциях до 10 км, когда обеспечивается еще возможность визуальной юстировки диаграмм направленности и структура импульса может регистрироваться разработанным измерительным комплексом. Кроме того, на этом расстоянии может быть преодолено влияние на диаграмму направленности кривизны Земли при подъеме приборов на доступную высоту 100–300 м.

Для экспериментов в полевых условиях созданы три СШП-излучателя:

- одиночный модуль с диаграммой направленности около $\pm 15^\circ$ с электродинамическим потенциалом $U_{\text{rad}} = ER = 13$ кВ для проведения предварительных настроечных экспериментов;

- сборка 2×2 модулей с апертурой 45×40 см² массой 50 кг с электродинамическим потенциалом около 50 кВ с ручной подстройкой синхронизации и диаграммой направленности $\pm 10^\circ$ для предварительных экспериментов по влиянию земной поверхности и прохождению СШП-сигналов;

- сборка 3×3 модулей с апертурой 55×55 см² и массой 100 кг с электродинамическим потенциалом около 100 кВ с автоподстройкой синхронизации с диаграммой направленности $\pm 5^\circ$ для зачетных экспериментов на дальностях до 10 км и более с подъемом оборудования на высоты до 100–300 м.

Многоканальная система запуска и синхронизации разработана научно-производственной компанией “ФИД-Техника”. Система автоподстройки синхронизации выполнена с применением аналоговых формирователей задержек и блока контроля и подстройки в составе блока запуска и синхронизации системы. Возможность высокоточной синхронизации излучения отдельных модулей достигается за счет использования обратной связи с выходов генераторов высоковольтных импульсов. Точность установки задержек отдельных каналов составляет 10 пс, среднеквадратичная нестабильность задержек каналов – менее 8 пс.

РЕАЛИЗАЦИЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

В основу измерительной системы положены сертифицированная измерительная линия ИППЛ-1 [41], сверхширокополосный раскрыв и осциллограф реального времени с полосой около 10 ГГц.

Оценка чувствительности сборки ИППЛ–осциллограф проводилась с учетом следующих измеренных при выполнении работы данных: 10 мВ размаха сигнала на экране требуют на входе осциллографа амплитуды 10 мВ, коэффициент преобразования ИППЛ равен около 0.4 В на выходе на 1 кВ/м падающего на него электромагнитного

поля. Следовательно, для получения размаха сигнала, равного 10 мВ на экране, достаточно для обработки с точностью порядка 10%, необходимо иметь в проходящей электромагнитной волне на входе ИППЛ электрическое поле с амплитудой $(10 \text{ мВ/м}) / [(400 \text{ мВ/м}) / (1 \text{ кВ/м})] = 25 \text{ В/м}$. Сборка 3×3 с $U_{\text{rad}} = ER = 100$ кВ создаст такую напряженность 25 В/м электрического поля на расстоянии 4 км.

В связи с этим для экспериментов на расстояниях 10 км и более, проводимых с излучателем 3×3 , для решения поставленной задачи разработан сверхширокополосный измерительный рупор с апертурой 16×16 см², имеющий на два порядка большую чувствительность, чем ИППЛ-1.

Для реализации такой антенны-сенсора с большой чувствительностью была разработана и изготовлена импульсная квазирупорная сверхширокополосная антенна (КР-СШП-антенна). Разработке антенны предшествовали лабораторные эксперименты с моделями антенны и расчетно-аналитические исследования с использованием численного трехмерного полностью электромагнитного кода КАРАТ [43], применяемого в практических задачах релятивистской СВЧ-электроники и прикладной электродинамики. Пример расчета кодом КАРАТ на компьютере (CPU 4.0 GHz, DRAM 64GB) распространения импульса электромагнитной волны в приемной антенне типа экранированный полурупор дан в работе [42]. Элемент антенны в виде экранированного полурупора представляет одну восьмую часть четырехрупорной КР-СШП-антенны. Данный тип антенны, разработанный в различных модификациях, применяется достаточно успешно для излучения мощных электромагнитных импульсов короткой длительностью менее одной наносекунды. Согласно известному в теории антенн [44] принципу взаимности, квазирупорная антенна может использоваться также как приемная СШП-антенна. Эффективная высота (или чувствительность) такой антенны в режиме приема равна нескольким сантиметрам, что на два порядка больше эффективной высоты полосковой антенны-сенсора типа ИППЛ. На рис. 2 представлены фотография и схема устройства сенсора КР-СШП-антенна, а на рис. 3 – ИППЛ-1 и схема его устройства.

Как видно из рис. 2, квазирупорная измерительная (приемная) антенна представляет собой четырехрупорную синхронную антенную решетку. Похожее устройство имеют используемые в экспериментах и импульсные излучающие четырехрупорные антенные решетки, каждая из которых возбуждается своим генератором импульсных напряжений. Более подробно устройство антенн описано в [42].

Определение коэффициента чувствительности измерительного приемного СШП-квазирупора. Ко-

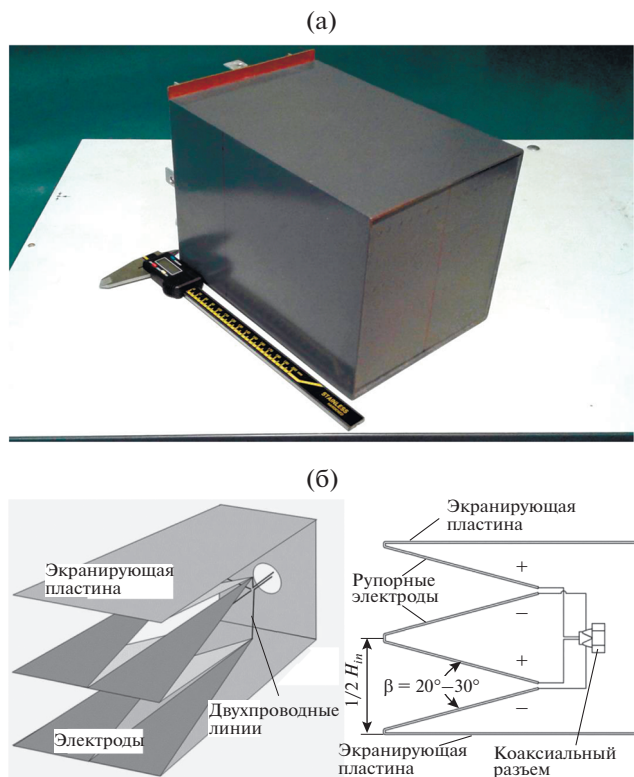


Рис. 2. Измерительная КР-СШП-антенна (а) в составе канала регистрации напряженности электромагнитного поля и схема ее устройства (б).

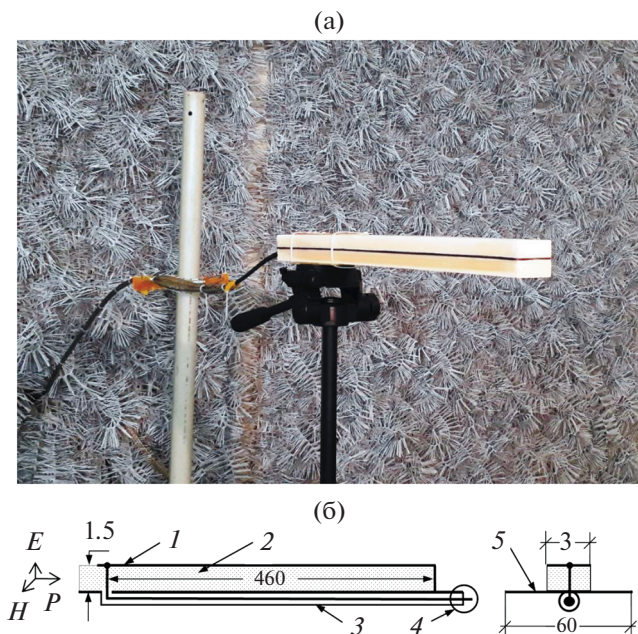


Рис. 3. Измерительная полосковая линия ИППЛ-1 (а) и схема ее устройства: (б) – вид сбоку, (в) – вид спереди; 1 – сигнальный электрод, 2 – разделительный диэлектрик, 3 – высокочастотный кабель к цифровому регистратору, 4 – коаксиальный разъем, 5 – опорная пластина.

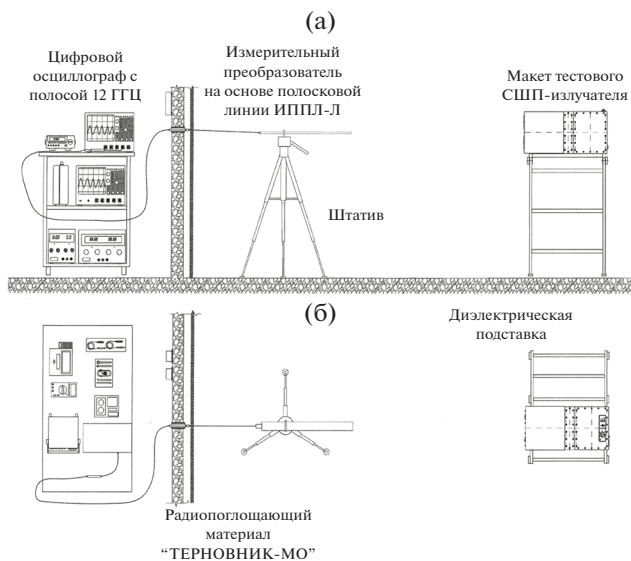


Рис. 4. Схема размещения тестового СШП-излучателя (с правой стороны) и регистрирующей аппаратуры (на штативе показан ИППЛ-1): (а) – вид сбоку, (б) – вид сверху.

эффицент чувствительности такого измерительного приемного квазирупора для СШП-сигналов длительностью порядка 50 пс удобнее всего определить методом прямого сравнения при регистрации одних и тех же СШП-сигналов с помощью, например, измерительного преобразователя на основе полосковой линии ИППЛ-1, который прошел сертификацию и его чувствительность уже определена. Была использована измерительная композиция, показанная на рис. 4 (виды сбоку и сверху).

Расстояние между излучающей и приемной апертурами составляло $R = 8.1$ м в случае ИППЛ-1. Электродинамический потенциал $U_{rad} = ER$ для тестового СШП-излучателя был равен 11.4 кВ. Чувствительность вертикальной развертки осциллографа установлена на уровне 100 мВ на деление, коэффициент чувствительности ИППЛ-1 равен 0.38 В/(кВ/м). Зарегистрированная осциллограмма напряженности импульсного электрического поля вертикальной поляризации приведена на рис. 5.

Затем вместо ИППЛ-1 на штатив помещался сенсор КР-СШП-антенна, тестовый излучатель и приемный рупор соосно выравнивались и регистрировался сигнал излучения. Параметры измерительной системы были следующие:

- расстояние между излучающей и приемной апертурами $R = 8.54$ м;
- тестовый СШП-излучатель имел $U_{rad} = ER = 11.4$ кВ;
- чувствительность вертикальной развертки осциллографа 100 мВ на деление;

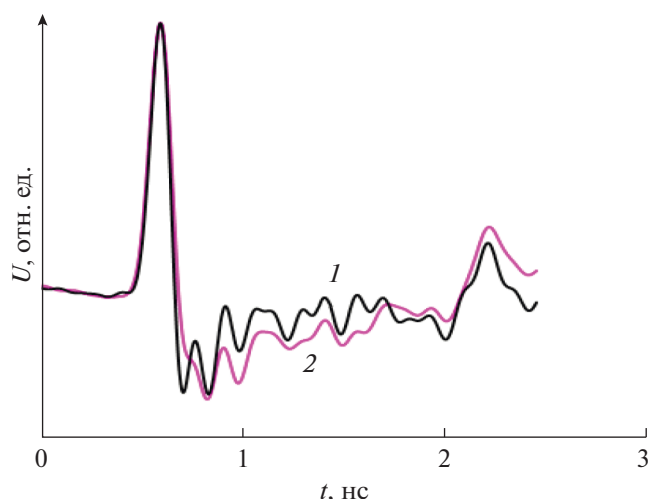


Рис. 5. Осциллограммы напряженности электрического поля, измеренные ИППЛ-1 (1) и КР-СШП-антенной (2, сигнал ослаблен в 90.5 раз).

— коэффициент ослабления аттенуаторов $k_{\text{ослаб2}} = 100$ (40 дБ).

Зарегистрированная осциллограмма напряженности поля с сенсором КР-СШП-антенна помещена (для удобства сравнения с ранее полученной осциллограммой для ИППЛ-1) на рис. 5 с дополнительным ослаблением в 90.5 раз. Коэффициент чувствительности КР-СШП-антенны-сенсора равен 34.4 В/(кВ/м).

Как видно из рис. 5, чувствительность нового сенсора КР-СШП-антенна превышает чувствительность ИППЛ-1 в 90.5 раз.

Таким образом, разработанная диагностическая система с ИППЛ и измерительным сенсором КР-СШП-антенна позволяет проводить измерения деформации сверхкоротких СШП-сигналов длительностью около 50 пс во всех запланированных в данной работе постановках.

ПОСТАНОВКА И РЕЗУЛЬТАТЫ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА НА ДИСТАНЦИИ 7 КМ

Предварительный эксперимент на дистанцию 7 км проведен с целью отработки методических вопросов постановки опытов в реальных полевых условиях и получения практического опыта использования подъемного шара с размещением на нем СШП-излучателя.

Технически возможным оказалось размещение СШП-излучателя сборки 2×2 с запиткой от бензоэлектрогенератора и двух операторов на борту воздушного шара (рис. 6).

В связи с ненадежностью ручной подстройки синхронизации в сборке 2×2 в опытах использовался режим включения только одного моду-

ля с $ER = 13$ кВ. Ориентация на антенну измерительной системы (расположена на высоте 4 м над уровнем земли) проводилась операторами визуально. Сначала проведен эксперимент на дистанции 4 км с подъемом на высоту 50 м с визуальной ориентацией антенн излучателя и измерителя друг на друга (рис. 7).

В следующей серии опытов подъем на высоту 100 м проводился на расстоянии воздушного шара от регистратора 7 км.

В качестве регистрирующей системы в первых экспериментах использовался несертифицированный узкополосный приемник на частоту 10 ГГц, соответствующий самой высокочастотной части спектра СШП-модуля с длительностью импульса 50 пс. Полоса пропускания от входного волновод-



Рис. 6. Размещение СШП-сборки 2×2 в корзине воздушного шара.



Рис. 7. Фотография привязного воздушного шара в эксперименте на расстоянии 4 км.

ного тракта до лампового диодного смесителя составляла около 100 МГц, полная чувствительность около 0.1–1 мкВ (двойное преобразование на частотах 70 и 10 МГц).

Амплитудный детектор приемника фиксировал приходящие от излучателя импульсы как с расстояния 4 км, так и с расстояния 7 км (в этом опыте напряженность электрического поля в районе размещения антенны на высоте 4 м от поверхности земли составляла 1.4 В/м).

Таким образом, в предварительных экспериментах подтверждено наличие регистрируемой составляющей спектра в районе 10 ГГц от излучателя с апертурным антенным раскрытием, возбуждаемым сверхкоротким импульсом напряжения с фронтом нарастания длительностью 50 пс. Получен необходимый экспериментальный опыт в постановке исследований в реальной атмосфере на требуемых для решения задачи дальностях. Показана возможность регистрации сигналов на расстояниях около 10 км в случае применения аэростата с подъемом на высоту 100 м.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные разработки и начальные эксперименты по прохождению СШП-импульсов в атмосфере Земли на расстояниях в единицы–десятки километров демонстрируют следующее:

– возможность проведения дальнейших исследований с полным числом синхронизированных модулей 3×3 , размещенных на земле;

– подъем измерительной системы с измерительной линией ИППЛ и квазирупорным СШП-раскрытием на привязном аэростате на высоту сотни метров;

– возможность получения зачетных экспериментальных результатов по деформации импульсов длительностью 50 пс при прохождении их в однородной атмосфере.

Полученные данные могут являться опорными при дальнейших исследованиях в атмосфере и ионосфере Земли.

Авторы считают своим долгом отметить, что академик Фортон Владимир Евгеньевич (1946–2020) в последние годы жизни уделял большое внимание электрофизическим процессам в атмосфере и ионосфере Земли, в том числе инициированию молний и другим активным воздействиям на состояние этих сред [45]. Данная работа выполнена благодаря его стимулирующему влиянию.

Работе оказана финансовая поддержка грантом Министерства науки и высшего образования РФ № 075-15-2020-790.

Авторы статьи пользуются случаем выразить благодарность заведующему лабораторией ОИВТ РАН Осташеву В.Е. за плодотворные научно-технические консультации, а также ведущему инже-

неру ОИВТ РАН Воробьеву В.Н. и аэронавту, слесарю механосборочных работ высшей категории ОИВТ РАН Мореву А.М. за практическую помощь в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гинзбург В.Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. М.: Наука, 1967. 685 с.
2. Гуревич А.В. Нелинейные явления в ионосфере // УФН. 2007. Т. 177. № 11. С. 1145.
3. Грудзинская Г.П. Распространение радиоволн. М.: Высшая школа, 1975. 280 с.
4. Розенберг В.И. Рассеяние и ослабление электромагнитного излучения атмосферными частицами. М.: Росгидромет, 1972. 348 с.
5. Кузелев М.В., Рухадзе А.А. К вопросу о расплывании импульсов в диссипативных и неравновесных средах // Изв. вузов. Радиофизика. 1999. Т. 22. № 10. С. 1223.
6. Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухоруков А.П. Теория волн. М.: Наука, 1990. 452 с.
7. Зеркаль А.Д. Вопросы практического использования системы ближней радиолокации на основе сверхкоротких импульсов с малым энергопотреблением // Журн. радиоэлектроники. 2012. № 1. <http://jre.cplire.ru/jre/jan12/3/text.html>
8. Наумов Н.Д., Никольский В.А. Влияние дождя на искажение радиоимпульса // Успехи прикл. физики. 2017. Т. 5. № 1. С. 41.
9. Вечерук Г.В., Кондранин Т.В., Журавлев А.В. Исследование взаимодействия сверхширокополосных электромагнитных импульсов с вертикально стратифицированной атмосферой // Исследовано в России. Электр. журн. 2002. С. 1489.
10. Кравицов Ю.А., Фейзулин З.И., Виноградов А.Г. Прохождение радиоволн через атмосферу Земли. М.: Радио и связь, 1983. 223 с.
11. Иванченко В.А., Николаев В.В. Особенности распространения сверхкоротких импульсов в среде загрязнитель–атмосфера // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. № 19. С. 66.
12. Стадник А.М., Ермаков Г.В. Искажения сверхширокополосных электромагнитных импульсов в атмосфере Земли // Радиотехника и электроника. 1995. Т. 40. № 7. С. 1009.
13. Наумов Н.Д. Дифракция радиоимпульсов в ионосфере // Прикл. физика. 2017. № 1. С. 5.
14. Гуляев Ю.В., Стрелков Г.М. Распространение сверхширокополосного радиоимпульса в холодной плазме // Докл. РАН. 2006. Т. 408. № 6. С. 754.
15. Касперович М.М., Кондратенко В.А. Влияния концентрации электронов в ионосфере на сверхширокополосные сигналы // Информационные технологии в образовании, науке и производстве: II Междун. науч.-техн. конф. 4 дек. 2014. <https://rep.bntu.by/handle/data/12438>
16. Касперович М.М., Кондратенко В.А., Горшков С.А. и др. Коррекция искажений, возникающих при прохождении сверхширокополосных сигналов через ионосферу // Информационные технологии в образовании, науке и производстве: III Междун. науч.-техн. интернет-конф. 20–21 нояб. 2015. <https://rep.bntu.by/handle/data/21953>

17. *Строев А.К.* Разработка и исследование методов и алгоритмов обработки сверхширокополосных радиолокационных сигналов, позволяющих компенсировать их искажения при прохождении через неоднородную ионосферу. Дис. ...канд. физ.-мат. наук. М.: МФТИ, 2019. 119 с.
18. *Солдатов А.В., Терехин В.А.* Распространение сверхширокополосного электромагнитного сигнала в ионосферной плазме // *Физика плазмы.* 2016. Т. 42. № 10. С. 927.
19. *Пятаков Н.П., Солдатов А.В.* Аналитические решения некоторых задач дифракции сверхширокополосного электромагнитного излучения в высокочастотном приближении для уравнений Максвелла // *ВАНТ. Сер. Теор. и прикл. физика.* 2018. № 5. С. 41.
20. *Петренко П.Б., Бонч-Бруевич А.М.* Моделирование и оценка ионосферных искажений широкополосных радиосигналов в локации и связи // *Вопросы защиты информации.* 2007. № 3. С. 24.
21. *Болтинцев В.Б., Ильяхин В.Н., Безродный К.П.* Метод электромагнитного импульсного сверхширокополосного зондирования подстилающей среды // *Журн. радиоэлектроники. Электр. журн.* 2012. № 1. <http://jre.cplire.ru/jre/jan12/14/text.html>
22. *Жиганов С.Н.* Модель отраженного от подстилающей поверхности сигнала // *Проектирование и технология электронных средств.* 2011. № 1. С. 52.
23. *Курангышев А.В., Дедушкин А.В., Казначеев А.В.* Оценка ослабления радиосигнала по методу идеальной радиопередачи с учетом влияния земной поверхности // *Молодой ученый.* 2016. № 3. С. 131.
24. *Жарко В.О., Барталев С.А.* Оценка распознаваемости древесных пород леса на основе спутниковых данных о сезонных изменениях их спектрально-отражательных характеристик // *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса.* 2014. Т. 11. № 3. С. 159.
25. *Лузян Е.А., Мазуров А.А., Ершов Д.В. и др.* Спутниковый мониторинг лесов России // *Оптика атмосферы и океана.* 2007. Т. 20. № 5. С. 443.
26. *Якубов В.П., Тельпуховский Е.Д., Миронов В.Л. и др.* Векторное радиопросвечивание лесного полога // *Журн. радиоэлектроники. Электр. журн.* 2002. № 1. <http://jre.cplire.ru/win/jan02/1/text.html>
27. *Ветлужский А.Ю., Калашников В.П.* Экспериментальное исследование влияния растительности на распространение широкополосных сигналов // *Современные проблемы науки и образования.* 2015. № 6. С. 1699.
28. *Ветлужский А.Ю.* Аппаратно-программный комплекс электромагнитного импульсного сверхширокополосного зондирования подстилающей среды. Автореф. дис. ...докт. физ.-мат. наук. Томск: Томск. политех. ун-т, 2015. 22 с.
29. *Гранков А.Г., Мильшин А.А., Чухланцев А.А., Шелобанова Н.К.* Спектральные измерения ослабления радиоволн кронами деревьев в природных условиях. Препринт ИРЭ РАН. М., 2004. 22 с.
30. *Подосенов С.А., Сахаров К.Ю., Соколов А.А.* Влияние поверхности земли на распространение сверхкоротких импульсов электромагнитного поля // *Технологии электромагнитной совместимости.* 2006. № 2. С. 50.
31. *Гаврилов Б.Г., Зецер Ю.И., Подгорный И.М. и др.* Взаимодействие плазменной струи с геомагнитным полем в геофизических ракетных экспериментах “Флаккус-1” и “Флаккус-2” // *Космические исследования.* 2000. Т. 38. № 3. С. 244.
32. *Гаврилов Б.Г., Зецер Ю.И., Подгорный И.М. и др.* Движение плазменной струи поперек геомагнитного поля в активном геофизическом эксперименте “North Star” // *Космические исследования.* 2003. Т. 41. № 1. С. 33.
33. <http://www.fidtechnology.com>
34. *Остаев В.Е., Ульянов А.В.* Сверхширокополосное излучение и угроза его воздействия на электронные технические средства. Препринт ОИВТ РАН. М., 2018. 119 с.
35. *Efanov V.M.* Gigawatt All Solid State Nano- and Picosecond Pulse Generators for Radar Applications // *Proc. 14th IEEE Int. Pulsed Power Conf. Dallas, TX,* 2003. P. 100.
36. *Efanov V.M., Fedorov V.M., Grekhov I.V. et al.* Multiunit UWB Radiator of Electro-Magnetic Waves with Controlled Directional Pattern // *Proc. 13th Int. Symp. on High Current Electronics. Tomsk, Russia. 25–29 July.* 2004. P. 262.
37. *Prather W.D., Baum C.E., Torres R.J. et al.* Survey of Worldwide High-Power Wideband Capabilities // *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility.* 2004. V. 46. № 3. P. 335.
38. *Mesyats G.A., Rukin S.N., Shpak V.G., Yalandin M.I.* Generation of High-Power Sub-Nanosecond Pulses // *Ultra-Wideband, Short-Pulse Electromagnetics 4 / Ed. Heyman E., Mandelbaum B., Shiloh J. N.Y.: Plenum,* 1999. P. 1.
39. *Yalandin M.I., Luybutin S.K., Rukin S.N. et al.* Formation of Nano- and Subnanosecond Width High-PRF Powerful Voltage Pulses by Using a Hybrid Modulator Schemes // *Proc. 13th Int. Symp. on High Current Electronics. Tomsk, Russia. 25–29 July.* 2004. P. 153.
40. *Koshelev V.I., Gubanov V.P., Efremov A.M. et al.* High-Power Ultrawideband Radiation Source with Multielement Array Antenna // *Proc. 13th Int. Symp. on High Current Electronics. Tomsk, Russia. 25–29 July.* 2004. P. 258.
41. *Сахаров К.Ю.* Излучатели сверхкоротких электромагнитных импульсов и методы измерений их параметров. М.: Моск. гос. ин-т электр. и мат., 2006. 159 с.
42. *Fedorov V.M., Efanov M.V., Ostashev V.Ye., Tarakanov V.P., Ul'yanov A.V.* Antenna Array with TEM-Horn for Radiation of High-Power Ultra Short Electromagnetic Pulses // *Electronics.* 2021. V. 10. № 9. P. 1011.
43. *Тараканов В.П.* Универсальный электромагнитный код КАРАТ // *Математическое моделирование: Проблемы и результаты / Под ред. Макарова И.М., Белоцерковского О.М. и др. М.: Наука,* 2003. С. 456.
44. *Марков Г.Т., Сазонов Д.М.* Антенны. 2-е изд. М.: Энергия, 1975. 528 с.
45. *Фортв В.Е.* Мощные ударные волны на Земле и в космосе. М.: Физматлит, 2019. 412 с.

УДК 533.9

ДИНАМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ФИЗИКЕ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ. НАЧАЛО

© 2021 г. В. Б. Минцев*

*Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия***E-mail: minvb@icp.ac.ru*

Поступил в редакцию 06.09.2021 г.

После доработки 06.09.2021 г.

Принят к публикации 28.09.2021 г.

Настоящий обзор посвящен истории проведения академиком В.Е. Фортовым научных исследований в Институте проблем химической физики РАН в г. Черноголовка, где в 1971 г. он начинает свою работу после защиты кандидатской диссертации. Здесь В.Е. Фортовым проводятся исследования генерации, изучение физических свойств и газодинамики неидеальной низкотемпературной плазмы. Интенсивные экспериментальные и теоретические исследования сжимаемости, электропроводности, оптических свойств такой среды публикуются в ряде центральных журналов, таких как “Успехи физических наук”, “Журнал экспериментальной и теоретической физики”, “Доклады Академии наук”, “Теплофизика высоких температур” и др. В 1977 г. В.Е. Фортов защищает докторскую диссертацию “Исследование неидеальной плазмы динамическими методами”. После защиты фронт работ по исследованию неидеальной плазмы и процессов при воздействии мощных ударных волн сильно расширяется. Проводятся эксперименты по взрывной генерации нейтронов, отражательным свойствам мощных ударных волн, изучаются процессы преобразования энергии взрыва в электромагнитную. Особое внимание уделяется процессам “металлизации” водорода и инертных газов, обнаружен плазменный фазовый переход в дейтерии. В обзоре сделана попытка кратко обобщить исследования В.Е. Фортова по неидеальной плазме, генерируемой взрывом, показать логику их возникновения.

DOI: 10.31857/S0040364421060156

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение

1. Начало. Черноголовка
2. Первые эксперименты
3. Дальнейшее развитие динамических методов
4. Неидеальная плазма в Германии

Заключение

Список литературы

ВВЕДЕНИЕ

Трудно писать о великом человеке, ученом с большой буквы, с которым автор проработал почти 50 лет. Эти годы отмечены вспышками ярких научных идей, большой радостью при их реализации, многодневными спорами при постановке научных задач, вдохновенным тяжелым круглосуточным трудом без сна для осуществления возникающих идей и воплощения их в жизнь, совместными переживаниями при неудачах, которые в свою очередь рождали новые идеи. В настоящем обзоре хочется вспомнить, как все начиналось, рассказать историю появления работ по неидеальной плазме, показать логику возникновения новых научных идей, вспомнить людей, с которыми эти работы на-

чинались. Конечно, такое представление будет несколько субъективным, поскольку будут описаны работы, в которых я принимал непосредственное участие.

1. НАЧАЛО. ЧЕРНОГОЛОВКА

Я познакомился с В.Е. Фортовым в 1972 г., когда мне — студенту четвертого курса МФТИ кафедры горения и взрыва (зав.кафедрой член-корреспондент РАН Ф.И. Дубовицкий) — определили научного руководителя — молодого активного “свежеиспеченного” кандидата наук Владимира Фортова. Нелегкая запутанная история попадания В.Е. Фортова в Черноголовку хорошо описана в его книге [1] “Траектория. Владимир Фортов”, бережно подготовленной его дочерью Светланой и изданной в 2015 г. к 70-летию Владимира Евгеньевича. Его судьбу решило яркое выступление на симпозиуме по горению и взрыву в Ленинграде в 1971 г., где его талант заметил выдающийся физик академик Я.Б. Зельдович и рекомендовал его нобелевскому лауреату академику Н.Н. Семёнову, который в свою очередь определил его в Отделение института химической физики в Черноголовке, а его директор член-корреспондент АН Ф.И. Дубовицкий зачислил Владимира Форто-



Рис. 1. Фортов В.Е. и его учителя в Черногловке (по часовой стрелке): Фортов В.Е. и Зельдович Я.Б., Фортов В.Е. и Дубовицкий Ф.И., Семенов Н.Н., Дремин А.Н. [1].

ва младшим научным сотрудником в ОИХФ АН, в лабораторию одного из первых зав.лабораторией “Черногловки” А.Н. Дремина, который занимался проблемами детонации и взрыва (рис. 1).

Так, В.Е. Фортов начал свою работу в Черногловке. Черногловка начала 1970-х гг. была удивительным местом. Работа здесь велась в режиме “7 на 24”, т.е. семь дней в неделю по 24 часа в сутки. Были созданы такие условия, при которых ученый семь дней в неделю мог заниматься только своим делом, только наукой. Работалось легко, поскольку рядом были Институт физики твердого тела, Институт теоретической физики им. Ландау и другие. Можно было получить научную консультацию, придя в любой институт, или встретившись с нужным ученым на озере или на прогулке в лесу. В ОИХФ тогда интенсивно развивались работы по исследованию мощных взрывчатых веществ, твердых ракетных топлив и процессов детонации и горения.

Первые работы В.Е. Фортов в Черногловке были посвящены уравнениям состояния конденсированных сред при высоких динамических давлениях, оценкам параметров критической точки, кинетике испарения и конденсации при изэнтропическом расширении металлов [2–8]. Однако сюда он принес и свою любовь к неидеальной плазме, любовь, которая привела потом к созданию нового направления в науке — физика экстремальных состояний вещества и динами-

ческих процессов при высоких плотностях энергии. Его статья “Гидродинамические эффекты в неидеальной плазме” [9], опубликованная в журнале “Теплофизика высоких температур” в 1972 г., как раз была посвящена проблемам изучения поведения неидеальной плазмы при быстропротекающих процессах.

Физикой неидеальной плазмы В.Е. Фортов начал заниматься еще студентом и аспирантом МФТИ в Центре им. Кельдыша под руководством члена-корреспондента РАН В.М. Иевлева. Был проведен цикл работ по исследованию свойств неидеальной плазмы цезия на подогреваемой ударной трубе [10, 11], которые были обобщены в 1980 г. в книге “Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора” под редакцией В.М. Иевлева [12]. Уже в Черногловке Владимир Евгеньевич понял, что техника ударных волн, генерируемых с помощью энергии конденсированных взрывчатых материалов, является уникальным инструментом для генерации плотной плазмы с сильным межчастичным взаимодействием. Были проведены расчеты состояния вещества за фронтом мощных ударных волн и показано, что ударно-сжатая плазма инертных газов с высокими параметрами неидеальности реализуется в них при повышенном начальном давлении и скоростях ударной волны ~ 5 км/с, что легко реализуется при использовании взрывных ударных труб [13].

Хотя Владимир был ярко выраженным теоретиком, было понятно, что для исследований неидеальной плазмы, где нет строгой теории ввиду отсутствия малого параметра, необходимо организовать экспериментальные работы и уже на их основе строить теоретические модели, проводить первопринципные расчеты. Также для правильной интерпретации экспериментов необходимо понимать гидродинамику взрывных течений, уметь проводить сложное трехмерное их моделирование с реальными параметрами вещества при высоких давлениях и температурах.

Первую поддержку в организации взрывного эксперимента по неидеальной плазме в Черноголовке оказала группа В.В. Якушева. Воспитанник этой группы механик Н.А. Афанасьев стал первым сотрудником группы Владимира Фортова. Работа “Об “аномальных” эффектах при выходе детонационной волны на свободную поверхность” [14] показала возможность генерирования плотной плазмы воздуха за фронтом ударных волн, образующихся при детонации конденсированных взрывчатых веществ. Большую техническую поддержку в организации экспериментальных работ оказала группа Е.Ф. Лебедева из ИВТ АН, которая проводила в Черноголовке эксперименты по исследованию взрывных МГД-генераторов [15].

В.Е. Фортов задумал широкий фронт экспериментальных работ по исследованию неидеальной плазмы, генерируемой взрывом. Нужны были люди, и Владимир подбирает к себе в группу первых аспирантов и студентов (рис. 2). Задача создания взрывного генератора неидеальной плазмы на основе взрывных ударных труб и исследование ее теплофизических свойств была поставлена заочному аспиранту Ю.В. Иванову – сокурснику В.Е. по МФТИ. Аспиранту Томского университета А.А. Леонтьеву были поручены исследования изэнтроп расширения конденсированных сред в области сильного межчастичного взаимодействия и уравнения состояния неидеальной плазмы инертных газов. Аспирант МФТИ кафедры В.М. Иевлева В.К. Грязнов стал заниматься расчетами ударно-сжатой плазмы с использованием химической модели плазмы, учитывающей различные модели сильного межчастичного взаимодействия. Студенту кафедры высоких температур МФТИ В.Е. Беспалову были поручены исследования сжимаемости аргоновой плазмы за фронтом мощных ударных волн. Тогда был принят в группу и я. Хорошо помню первую встречу с В.Е. Фортовым. В то время студенты имели возможность встречаться с различными активными учеными и имели право выбрать себе научного руководителя. Владимир беседовал со мной более двух часов. Он ярко описал научную задачу, открыл мне новый неизведанный мир проблем, возникающих в сильно-разогретом веществе с сильным межчастичным взаимодействием, особенно увлеченно он рассказывал о возможных специфических плазменных фазовых пе-

реходах и о металлизации вещества при высоких давлениях, ссылаясь на единственную совместную работу наших великих ученых Л.Д. Ландау и Я.Б. Зельдовича 1945 г. [16]. В.Е. Фортов подробно рассказал, как он видит решение этих проблем и какие конкретные задачи необходимо решать уже сейчас. Он дал мне две книжки – Зельдовича, Райзера [17] и Франк-Каменецкого [18] – со словами: “Изучайте, молодой человек, и приходите через недельку, выберите то, что Вам наиболее интересно”.

Так, моей первой задачей стало исследование электропроводности неидеальной плазмы.

3. ПЕРВЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Началась интенсивная дружная работа всей группы.

Сначала необходимо было разобраться с методами генерации взрывной неидеальной плазмы. Дело в том, что для проведения измерений теплофизических свойств сред за фронтом ударных волн и получения однородного сгустка необходимо обеспечить одномерность и стационарность течения. Тогда параметры ударно-сжатого вещества оказываются связанными с кинематическими параметрами течения простыми алгебраическими соотношениями, выражающими законы сохранения массы, импульса и энергии, что позволяет определить calorическое уравнение состояния вещества в виде зависимости внутренней энергии от давления и удельного объема $E = E(P, V)$ [17, 19]. Внутренняя энергия, однако, не является термодинамическим потенциалом по отношению к переменным P и V и для построения замкнутой термодинамической системы необходимо дополнительно знать зависимость температуры $T = T(P, V)$. К началу наших работ взрывные методы генерации ударных волн в газах пониженной плотности интенсивно развивались в работах советских и американских ученых. Был создан широкий спектр устройств от простых “линейных” взрывных ударных труб до специальных кумулятивных устройств, позволяющих получать скорости ударных волн до 100 км/с. Эти устройства достаточно подробно описаны в обзоре “Взрывные ударные трубы” [20]. Другая техника на основе метания плоского металлического ударника с помощью конденсированных взрывчатых веществ была широко использована для исследования уравнений состояния конденсированных сред при высоких динамических давлениях [21]. Эту технику также решено было применить для исследования неидеальной плазмы.

В разработанной взрывной линейной ударной трубе (рис. 3) [22] ионизирующая ударная волна образуется при расширении в исследуемый газ продуктов детонации конденсированного взрывчатого вещества (ВВ). Применение специальным образом профилированной детонационной линзы и выбор соответствующих размеров активного заряда



Рис. 2. Первые аспиранты, студенты (по часовой стрелке): Грязнов В.К., Иванов Ю.В., Леонтьев А.А., Минцев В.Б., Беспалов В.Е.

ВВ обеспечивали одномерность и стационарность параметров детонационного фронта при его выходе из ВВ в исследуемый газ. Полное энерговыделение в каждом эксперименте составляло $\sim 3 \times 10^6$ Дж при мощности $\sim 10^{11}$ Вт, что приводило, разумеется, к уничтожению всего устройства и необходимости работы в специально защищенных помещениях с соблюдением мер безопасности. Результаты фотографических, электрофизических и рентгенографических измерений показали одномерность и квазистационарность течения плазмы, что обеспечивалось инерционным удержанием ударно-сжатой плазмы массивными стенками канала ударной трубы.

Скорость фронта ударной волны измерялась оптическим и электроконтактным базисным методами с помощью скоростных кинокамер и ионизационных датчиков с точностью 1–1.5%. В пределах данной погрешности фронт ионизации совпадал с фронтом свечения ударной волны и положением гидродинамического скачка уплотнения. Плотность ударно-сжатой аргоновой плазмы регистрировалась с точностью $\sim 8\%$ методом импульсной рентгенографии [22, 23], не вносящим возмущения в поток плазмы и обладающим высоким временным ($\sim 10^{-7}$ с) и пространственным (~ 2 мм) разрешением.

Ввиду прозрачности плазмы перед фронтом ударной волны и малых размеров вязкого скачка уплотнения тепловое излучение имеет возможность беспрепятственно выходить из плазменного объема и дает информацию о равновесной температуре и коэффициентах поглощения ударно-сжатой плазмы. Интенсивность этого излучения при яркостном методе регистрации температуры (точность 5–10%) определялась фотометрическим сравнением разверток во времени свечения ударно-сжатой плазмы и эталонных источников света. Совместная регистрация скорости фронта и плотности определяет в соответствии с законами сохранения уравнение состояния неидеальной плазмы $E = E(P, V)$, которое совместно с измеренной зависимостью $T = T(P, V)$ представляет собой термодинамически полную информацию о плазме аргона при давлении до 600 МПа и температуре $T = 15.5\text{--}23$ кК.

Для измерений термодинамических и оптических характеристик плазмы при более высоких по сравнению с ударными трубами давлениях применялись взрывные генераторы прямоугольных ударных волн (рис. 4) различной интенсивности и длительности. В этих установках ионизирующая ударная волна возникала при расширении в исследуемые газы (аргон, ксенон) металлических или полимер-

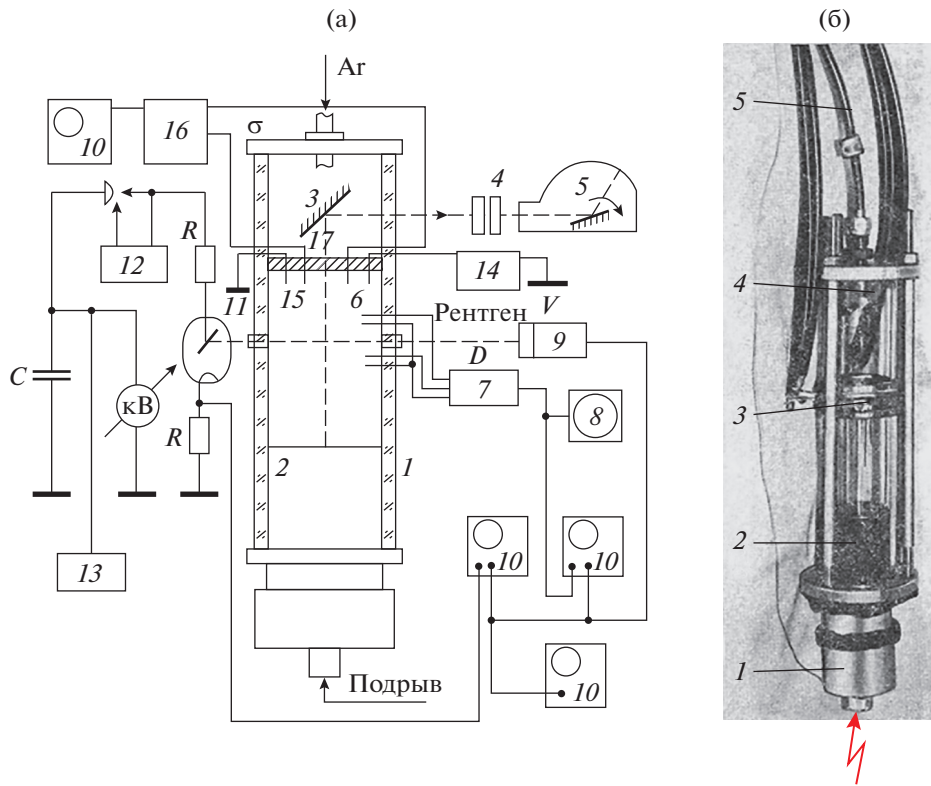


Рис. 3. Схема диагностики (а) и взрывной генератор неидеальной плазмы (б) [22, 23].

ных мишеней, предварительно сжатых до давлений $\sim 10^6$ бар. Возбуждение мощных ударных волн в мишенях осуществлялось линейными взрывными ме-

тательными устройствами [24], действие которых основано на ускорении продуктами детонации плоских металлических ударников до скоростей

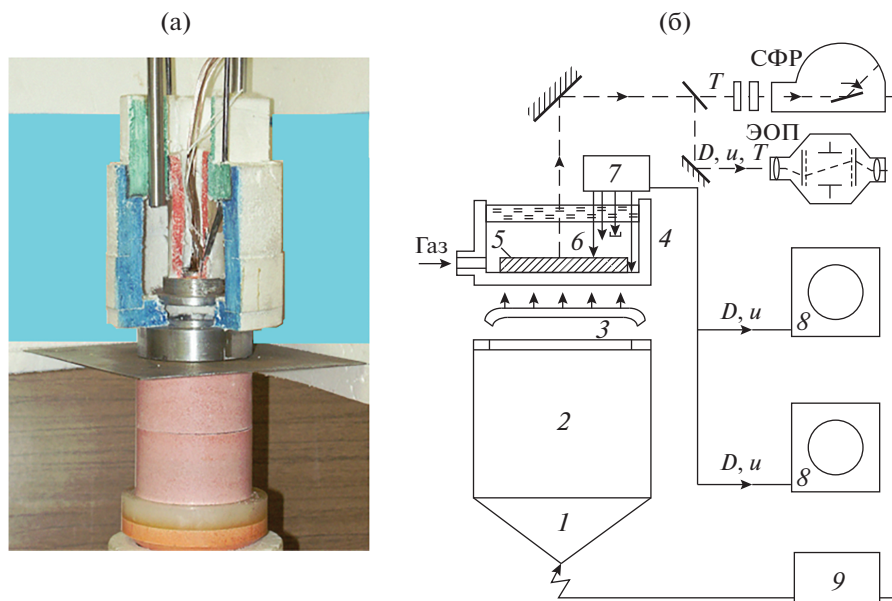


Рис. 4. Взрывной генератор прямоугольных ударных волн (а) и схема диагностики (б) [24].

2–6 км/с. Характерные энерговыделения в экспериментах составляли $(2–30) \times 10^6$ Дж при мощности 10^{11} Вт.

В экспериментах на этих генераторах электроконтактным и оптическим базисным методами выполнялась совместная независимая регистрация двух кинематических параметров: скорости фронта D и массовой скорости U движения плазмы. Открытые электроконтактные датчики регистрировали на скоростных осциллографах скорость фронта D с точностью $\sim 1\%$. Измерение массовой скорости U (точность 1–2%) осуществлялось закрытыми датчиками специальной конструкции, не реагирующими на ударную волну в плазме и срабатывающими в момент прихода тяжелой контактной поверхности раздела плазмы с мишенью. При оптической методике регистрации на заданном расстоянии от мишени устанавливалась плексигласовая преграда, через которую при помощи скоростных кинокамер или электронно-оптических преобразователей фиксировалось излучение ударно-сжатой плазмы, а характер изменения этого свечения позволял судить о движении ударной волны и контактной поверхности плазмы. Полученные результаты по уравнению состояния неидеальной плазмы аргона и ксенона относятся к широкому диапазону параметров — $P = 0.03–3$ ГПа, $T = 18–22$ кК, где реализуется развитая ионизация и сильное кулоновское взаимодействие, $\Gamma = 1–5$.

Анализ полученных термодинамических данных свидетельствует о наличии в сильносжатой плазме межчастичного отталкивания, не описываемого стандартными плазменными теориями. В рассматриваемой области высоких плотностей плазмы средние межчастичные расстояния сравнимы с характерными размерами атомов и ионов. Это обстоятельство, а также сильное кулоновское взаимодействие свободных зарядов может вызвать заметную деформацию энергетических уровней. Поэтому для интерпретации результатов использовалась наиболее популярная в физике плазмы “химическая” модель [25, 26], в которой описание межчастичного отталкивания потребовало привлечения нетрадиционной для физики плазмы квантовомеханической модели (модель “ограниченного атома” [27, 28]), учитывающей воздействие плазменного окружения на дискретный спектр атомов и ионов в сильно сжатой плазме. Для описания этого эффекта в дальнейшем использовались также модели твердых и мягких сфер.

Измерение электропроводности во взрывной ударной трубе осуществлялось четырехточечным зондовым методом, обладающим высоким пространственным разрешением и относительно простой реализацией в условиях однократного динамического эксперимента. Были проведены измерения электропроводности плазмы инертных газов в широком диапазоне параметров неидеально-

сти от $\Gamma \sim 0.3$, где различия между теориями невелики и имеется значительное количество экспериментальных данных, вплоть до области экстремально высоких $\Gamma \sim 5–10$, где расходится большинство теоретических приближений. Полученная совокупность экспериментальных данных определенно указывает на занижение измеренных значений электропроводности по сравнению с теорией Спитцера [29]. Имеющееся количественное расхождение между различными группами экспериментов связано как с особенностями поведения высокотемпературной плазмы, так и с фактическим несоответствием первичных данных и трудностями выделения кулоновской компоненты в слабоионизованной плазме. Для описания результатов экспериментов была предложена модель [30], в которой ионные корреляции описывались в заимствованном из теории жидких металлов и полупроводников приближении Займана, а рассеяние зарядов рассчитывалось в борновском приближении с экранированным кулоновским потенциалом. Полученные соотношения имеют правильную спитцеровскую асимптотику при $\Gamma \ll 1$ и обладают приемлемыми экстраполяционными свойствами, не имея нефизических расходимостей и удовлетворительно описывая “низкотемпературный” эксперимент вплоть до области экстремально высоких Γ .

Кроме организации и участия в эксперименте по неидеальной плазме, генерируемой взрывом, В.Е. Фортов продолжает заниматься уравнениями состояния конденсированных сред, исследованием уравнения состояния металлов методом изэнтропического расширения и “плазменным фазовым переходом” при детонационных явлениях, изучает гидродинамические эффекты в неидеальных средах. Результаты всех исследований публикуются в ряде центральных журналах, таких как “Журнал экспериментальной и теоретической физики”, “Доклады Академии наук”, “Теплофизика высоких температур” и др. (см. список литературы). Зимой 1977 г. В.Е. Фортов успешно защищает докторскую диссертацию “Исследование неидеальной плазмы динамическими методами” на специализированном совете при ИВТ АН. Консультантом во время работы над диссертацией был академик Я.Б. Зельдович, а оппонентами выступили профессор Л.В. Альшулер, чье имя занимает достойное место в ряду создателей советского ядерного оружия, и академик Е.П. Велихов — всемирно известный специалист в области плазменных исследований. Оппоненты дружно отмечают высокий уровень проведенных работ, их актуальность и научную значимость. Тогда ими было отмечено, что комплекс проведенных Владимиром Фортовым исследований знаменует собой появление нового научного направления — динамической физики неидеальной плазмы. Действительно уже после выходит серия обзоров в журнале “Успехи физических наук” [25, 31–33]. Совместно с

И.Т. Якубовым выпускается книга “Физика неидеальной плазмы” [34].

1 декабря 1977 г. подписывается приказ о создании лаборатории физической газодинамики под руководством В.Е. Фортова на основе уже существующей группы. В нее входят дополнительно только что защитившие студенческие дипломы экспериментаторы В.Я. Терновой, А.П. Жарков, теоретики кандидат наук Г.А. Павлов и выпускник КПУ А.А. Овчинников. Первым заместителем по лаборатории стал В.Е. Беспалов. Чуть позже в связи с необходимостью проводить массивные газодинамические расчеты в лабораторию приходят А.Л. Ни, А.В. Шутов. Для активной работы с моделями уравнений состояния вещества привлекается ученик Л.В. Альтшулера А.В. Бушман, который приходит со своим учеником И.В. Ломоносовым, являющимся в настоящее время и.о. директора Института проблем химической физики. В середине 1980-х гг. в связи с работой над проектом “Вега” в лабораторию входит группа Г.И. Канеля. После защиты докторской диссертации в 1982 г. А.Л. Ни становится заместителем заведующего лабораторией. В 1991 г. эта работа поручается мне. А в 2001 г. заместителем заведующего уже отдела экстремальных состояний вещества становится В.К. Грязнов.

4. ДАЛЬНЕЙШЕЕ РАЗВИТИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

После защиты докторской диссертации казалось, что можно немного отдохнуть и расслабиться, однако В.Е. Фортов полон сил, энергии и идей. Фронт работ по исследованию неидеальной плазмы и процессов при воздействии мощных

ударных волн на плотные среды значительно расширяется. Совместно с учеными из Сарова проводятся эксперименты по термодинамике неидеальной плазмы инертных газов в более широком диапазоне параметров при давлениях до $P \sim 4$ ГПа и температурах до $T \sim 56$ кК [28] (рис. 5). Было обнаружено значительное превышение давления и занижение внутренней энергии по сравнению с существующими моделями. Возможным объяснением является деформация электронных уровней в сильно сжатой плазме. Для описания этого эффекта на основе химической модели плазмы в [28] предложены модель “ограниченного” атома и псевдопотенциальная модель плазмы.

Модель “ограниченного” атома успешно была использована для объяснения эффекта “просветления” в неидеальной плазме. Проведенные В.Е. Беспаловым измерения коэффициента поглощения неидеальной аргоновой плазмы в зависимости от плотности показали его значительное занижение по сравнению с расчетными величинами при больших плотностях плазмы ([27], рис. 6). Причем экспериментальные значения с повышением плотности стремились к теоретическим, обусловленным только связано-связанными переходами. Данный эффект был интерпретирован в [27] как результат деформации электронного энергетического спектра атомов при их сжатии в результате воздействия на них окружающих частиц. В плотной плазме межчастичное взаимодействие делает внутриатомный потенциал более короткодействующим, что приводит к конечному числу дискретных энергетических уровней и последова-

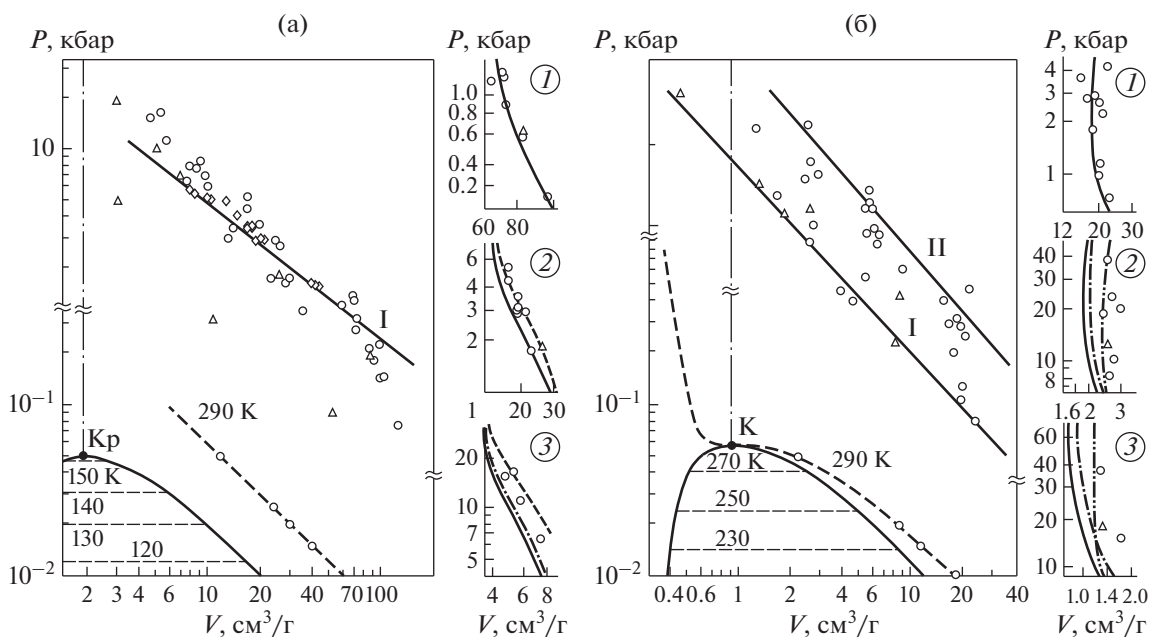


Рис. 5. Фазовая диаграмма аргона (а) и ксенона (б) [28].

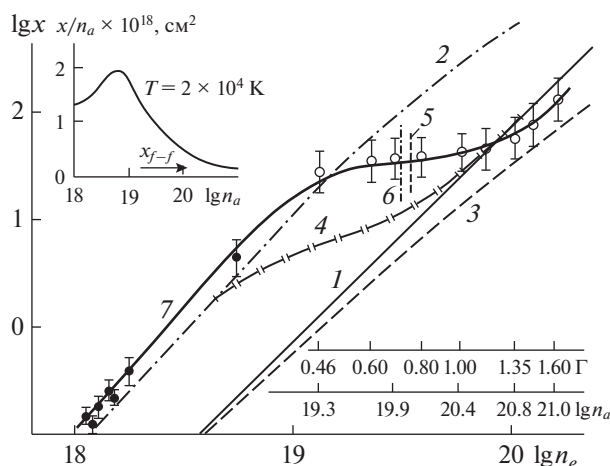


Рис. 6. Коэффициент поглощения неидеальной аргонной плазмы в зависимости от плотности [27].

тельному переходу высоковозбужденных состояний в непрерывный спектр с ростом плотности плазмы. Такое исчезновение части возбужденных энергетических уровней вызывает исключение механизма фотоионизационного поглощения из этих состояний и приводит к наблюдаемому в эксперименте уменьшению коэффициента поглощения.

Также был расширен диапазон параметров при исследовании электропроводности неидеальной плазмы. Усовершенствование временных характеристик зондовых измерений электропроводности и улучшение газодинамики течения на взрывной ударной трубе позволили провести измерения за отраженными ударными волнами и таким образом повысить давление в ксеноне до $P \sim 7$ ГПа и температуру в плотной плазме до $T \sim 100$ кК при значениях степени ионизации до трехкратной величины [35]. Для реализации сильно разогретой неидеальной плазмы были использованы также кумулятивные устройства на основе сжатия потока в условиях остроугольной геометрии. Электрофизические свойства такой плазмы оказались в значительной мере неожиданными [35], так как они свидетельствуют об отсутствии подобия кулоновской компоненты неидеальной плазмы — безразмерная электропроводность высокотемпературной плазмы (рис. 7) оказывается меньше высокотемпературной при тех же величинах кулоновской неидеальности Γ . Анализ высокотемпературных данных показывает, что причиной этого эффекта является некулоновский характер рассеяния высокоэнергетических электронов на тяжелых ионах. Действительно, с ростом температуры амплитуда кулоновского рассеяния $f_k \sim e^2/(kT)$ убывает и оказывается сравнимой с характерными размерами ионов ксенона $\sim 4 \text{ \AA}$, так что высокоэнергетические электроны проводимости при рассеянии могут подходить достаточно близко к ядру, где потенциал взаимодействия уже не является чисто

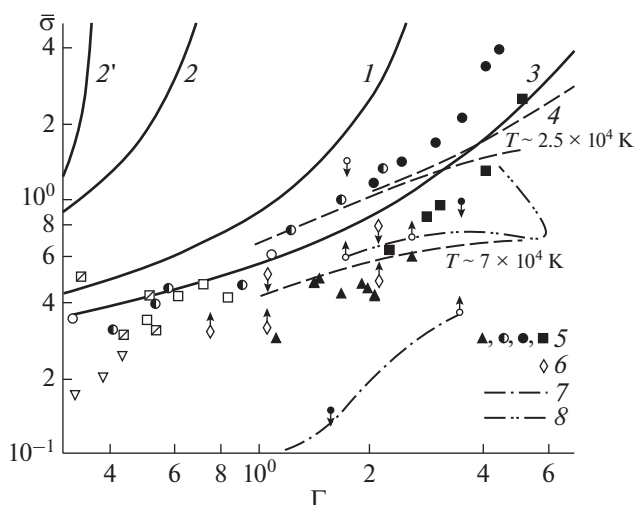


Рис. 7. Безразмерная электропроводность в зависимости от параметра неидеальности [35].

кулоновским и оказывается искаженным внутренними электронными оболочками. В этой окрестности ядра потенциал является более сильным, чем внешний ионный потенциал, что и приводит к увеличению сечения рассеяния и, следовательно, к наблюдаемому в экспериментах (рис. 7) относительному уменьшению электропроводности.

Проведенные эксперименты давали лишь косвенную информацию о свободных носителях в неидеальной плазме. Между тем проблема определения электронной концентрации выглядела очень “горячо”: какие электроны можно считать связанными, какие свободными? Поэтому возникла идея использования лазерного излучения для диагностики неидеальной плазмы. Лазерная техника как раз в эти времена стала широко использоваться в экспериментах. Было предложено использовать хорошо известный в радиолокации и физике твердого тела эффект полного отражения электромагнитного излучения с длиной волны λ от среды с электронной концентрацией, превышающей критическое значение $n_{cr} \geq (\pi c^2 m)/(\lambda^2 e^2)$. Концентрация свободных носителей в плотной плазме достаточно велика, а потому область интересующих нас длин волн лежит в оптическом диапазоне ($n_{cr} = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ соответствует длина волны $\lambda = 1.06 \text{ мкм}$). Ю. Б. Запорожцем был создан экспериментальный стенд по лазерной диагностике плотной плазмы ксенона, генерируемой с помощью взрывного генератора прямоугольных импульсов, и получены первые данные по отражательным свойствам ксенона при давлениях до $P \sim 17$ ГПа и электронных концентрациях $n_e \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ [36, 37]. Результаты оказались достаточно неожиданными (рис. 8): наблюдалось плавное увеличение коэффициента отражения R в зависимости от плотности вплоть до значений $R \sim 50\%$, характерных для металлов, ожидаемой ступенчатой зависимости от плотности.

пеньки на критической плотности обнаружено не было. Удалось лишь провести оценки частоты столкновений электронов, которая оказалась порядка удвоенной лазерной частоты $\sim 3 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$. В это время началось наше сотрудничество с Игорем Ткаченко, который работал в Одесском университете (сейчас он профессор университета в г. Валенсия). Он предложил тогда использовать данные по отражению для определения диэлектрической проницаемости неидеальной плазмы [38]. Чуть позже началось сотрудничество с немецкими учеными из Университета г. Росток (Г. Репке, Р. Редмер, Х. Рейнгольц). В тесном сотрудничестве с ними были поставлены новые эксперименты на различных длинах волн и при различных углах падения лазерного излучения [39–41]. Были учтены влияние ширины ударного фронта и кинетика установления во фронте ионизационного равновесия, что привело к разумному описанию всей совокупности экспериментов. Это плодотворное сотрудничество продолжается и в настоящее время. Отмечу, что желание прямого измерения электронной концентрации в неидеальной плазме было осуществлено несколько позже после пуска в строй электродинамической установки, которая позволяла проводить эксперименты с сильными магнитными полями. Так, в работах Н.С. Шилкина исследовался эффект Холла в неидеальной плазме и зависимость электросопротивления от величины магнитного поля [42].

С неидеальной плазмой связывают реализацию многих энергетических и космических проектов. В одном из них – разработка физических принципов работы газозажигательного ядерного реактора – Владимир Евгеньевич принял участие еще при работе студентом и аспирантом. Другое чрезвычайно интересное направление – управляемый термоядерный синтез. Для того чтобы пошла реакция синтеза, слияния, нужно иметь очень высокую температуру и крайне высокие давления. Впервые такое “горение”, только инициированное ядерным зарядом было реализовано более 60 лет назад, когда была взорвана первая водородная бомба. Однако взрыв – процесс неуправляемый, пригодный только для разрушения. Чтобы использовать его для созидания, нужно научиться его контролировать. В.Е. Фортов начал развивать схемы реализации импульсного термоядерного синтеза, основанные на сжатии дейтерия в конических мишенях с помощью лайнеров, разгоняемых конденсированным взрывчатким веществом (КВВ) до высоких скоростей [43]. Первые шаги были сделаны на стандартном генераторе прямоугольных импульсов, разгоняющих металлические ударники до скоростей $\sim 5.5 \text{ км/с}$ (рис. 9). Работу поддерживал академик Прохоров, который не один раз приезжал в Черноголовку для ознакомления с “живыми” результатами, а его сотрудник из ФИАН И.К. Красюк дневал и ночевал в нашем институте. Совместная работа всей нашей лаборатории и сотрудников ФИАН привела к интересным результа-

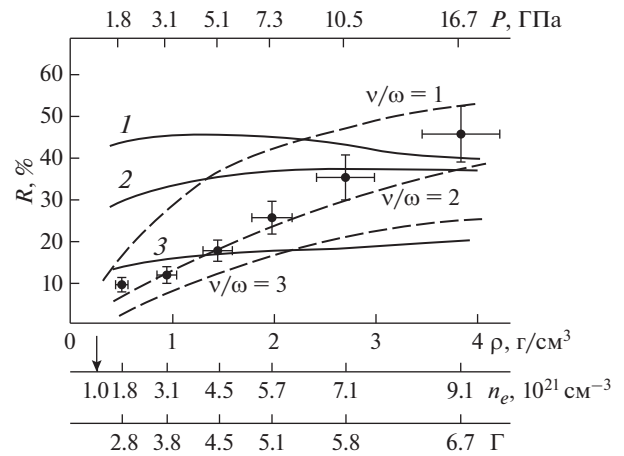


Рис. 8. Зависимость коэффициента отражения ксеноновой плазмы от плотности [36].

там: был зарегистрирован нейтронный выход порядка 10^6 нейтронов за импульс, что говорило о реализации в условиях эксперимента термоядерной плазмы при давлении $P \sim 5\text{--}10 \text{ ТПа}$, температуре $T \sim 0.3\text{--}0.5 \text{ кэВ}$ и степени сжатия $\sim 10^3$. Конечно, этого недостаточно для зажигания реакции, поэтому в дальнейшем были предприняты усилия для увеличения скорости метания ударников. Были разработаны слоистые системы, позволяющие разгонять тонкие фольги из молибдена толщиной 0.1 мм до скоростей $\sim 12.8 \text{ км/с}$ [44], и конические взрывные генераторы, в которых были реализованы скорости ударной волны $\sim 17 \text{ км/с}$ в меди и получены давления $P \sim 1.4 \text{ ТПа}$ [45]. Правда, платой за такое увеличение параметров было уменьшение времени существования плазменного сгустка и существенно меньшая его масса. Однако это было уже на несколько лет позже, в экспериментах с термоядерной плазмой они не использовались, поскольку проведенные на основании первых экспериментов расчеты показали, что скорости ударников в такой постановке для зажигания термоядерной реакции должны быть в не-

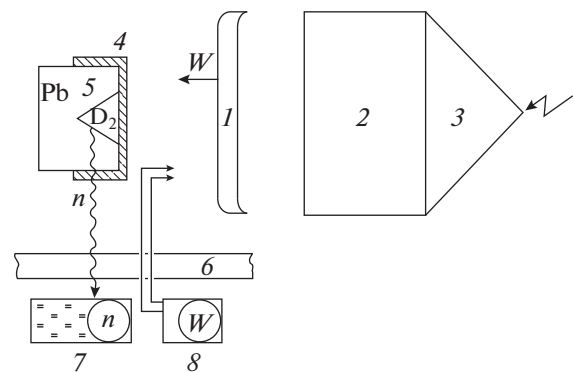


Рис. 9. Схема установки по генерации нейтронов [42].

сколько раз выше. Тем не менее эти устройства оказались чрезвычайно интересны для исследования уравнения состояния вещества в мегабарном диапазоне давлений. Существенный прогресс в реализации простыми коническими конструкциями террапаскальных давлений был достигнут лишь в последнее десятилетие [46].

Каким образом можно существенно повысить скорости метания конденсированных сред? Все методы метания с помощью химической энергии КВВ имеют существенные ограничения, связанные с конечной скоростью звука толкающего сжатого и разогретого газа. Здесь перспективным выглядит использование электромагнитных пондеромоторных сил, где такого рода ограничений, на первый взгляд, не видно. В конце 1970-х гг. для достижения скоростей порядка 100 км/с была очень популярна идея использования так называемого рельсотрона [47], представляющего собой две параллельные металлические шины, между которыми движется замыкающий электрическую цепь пластмассовый ударник, разгоняемый магнитопржатым разрядом с импульсным током ~ 1 МА. В этом устройстве для создания мощных импульсов тока привлекательным выглядело использование химической энергии конденсированных взрывчатых веществ, которое могло бы значительно уменьшить его габариты. Дело в том, что плотность химической энергии в КВВ составляет несколько мегаджоулей на килограмм, что на несколько порядков превышает плотность запасенной энергии в конденсаторах. Разработанные к тому времени в Сарове и Лос-Аламосе различные конструкции взрывомагнитных генераторов представляли собой достаточно компактные устройства, позволяющие получать рекордные значения тока ~ 300 МА, энергии ~ 300 МДж магнитных полей ~ 28 МГс [48, 49].

В это же время В.Е. Фортов при обсуждении экспериментов с нейтронами познакомился с Л.П. Феоктистовым, и ими была предложена идея [50] создания мощного источника термоядерных нейтронов на основе обжатия с помощью цилиндрического лайнера предварительно разогретой до температур ~ 0.6 кэВ плазмы, находящейся в продольном магнитном поле. Для ускорения лайнера предлагалось использовать химическое конденсированное взрывчатое вещество, а для предварительного нагрева плазмы столкновение потоков дейтерия, разгоняемых плазменными ускорителями до скоростей ~ 300 км/с.

Для реализации таких работ необходимо было создание специального взрывного стенда, оснащенного низковольтными и высоковольтными конденсаторными батареями мегаджоульного уровня запаса энергии. Директор ОИХФ Ф.И. Дубовицкий поддержал эти идеи, было выделено место на полигоне на Павильоне А-3, и начались закупки необходимого оборудования и строительство электродинамической установки,

научное руководство которым было поручено автору. Надо честно сказать, если работа со взрывчатыми материалами в нашем институте была поставлена на высоком уровне, то специалистов по высоковольтной технике не было. Пришлось ездить по различным институтам, подбирать необходимое оборудование, консультироваться по различным вопросам. К 1986 г. установка начала работать, были проведены предварительные эксперименты.

В 1986 г. ушел Н.Н. Семенов, Ф.И. Дубовицкий постепенно отходил от управления институтом. Личности масштаба Н.Н. Семенова, способной удержать большой институт, не находилось, хотя сильных ученых в химфизике было много. Непрерывно менялись директора, на короткое время даже был назначен “варяг” из ИОНХ АН СССР. Лаборатория В.Е. Фортов переходила из сектора в сектор (из сектора макрокинетики и газодинамики экстремальных химико-технологических процессов в сектор физики горения и взрыва и наоборот). В 1986 г. Владимир Евгеньевич был избран завлабом в ИВТ АН и перешел туда по приглашению академика А.Е. Шейндлина на постоянную работу. С собой он забрал ряд задач, связанных с сильноточной электроникой, в частности, рельсотронную тематику. К его чести, надо сказать, что про Черноголовку он не забыл, он остался завлабом на общественных началах. Его отсутствия мы даже не замечали, поскольку каждое его появление в Черноголовке сопровождалось бурными обсуждениями научных проблем и постановкой новых задач. С тех пор появилась “святая” пятница — день, когда Владимир Фортов обязательно был в лаборатории, исключая, конечно, дни дальних командировок. Эта традиция сохранялась всегда, даже когда Фортов занимал ответственные государственные должности и до самых последних дней. Недаром в первом интервью в качестве Президента РАН на вопрос: “Ваша первая поездка?” — последовал моментальный ответ: “В Черноголовку...”.

Несмотря на все пертурбации в институте, работа на электродинамической установке стала развиваться дальше, хотя акценты сместились. Как уже было сказано, рельсотронной тематикой стали интенсивно заниматься в ИВТ АН, где в тот момент уже имелось все необходимое оборудование и опыт. К работе с нейтронными источниками мы вернулись позже, только через пятнадцать лет, благодаря активности директора ТРИНИТИ В.Е. Черковца. К 2010 г. были разработаны специальные взрывомагнитные генераторы (ВМГ) для запитки плазменных ускорителей [51] (рис. 10). Но появились новые интересные задачи. В частности — каким образом и с какой эффективностью можно преобразовать химическую энергию КВВ в энергию электромагнитной волны? В 1985 г. к нам приехал А.Б. Прищепенко со своими компактными устройствами, разработанными в ЦНИИХМ. На полигоне были проведены серии экспериментов, специально разработанной для этих эксперимен-

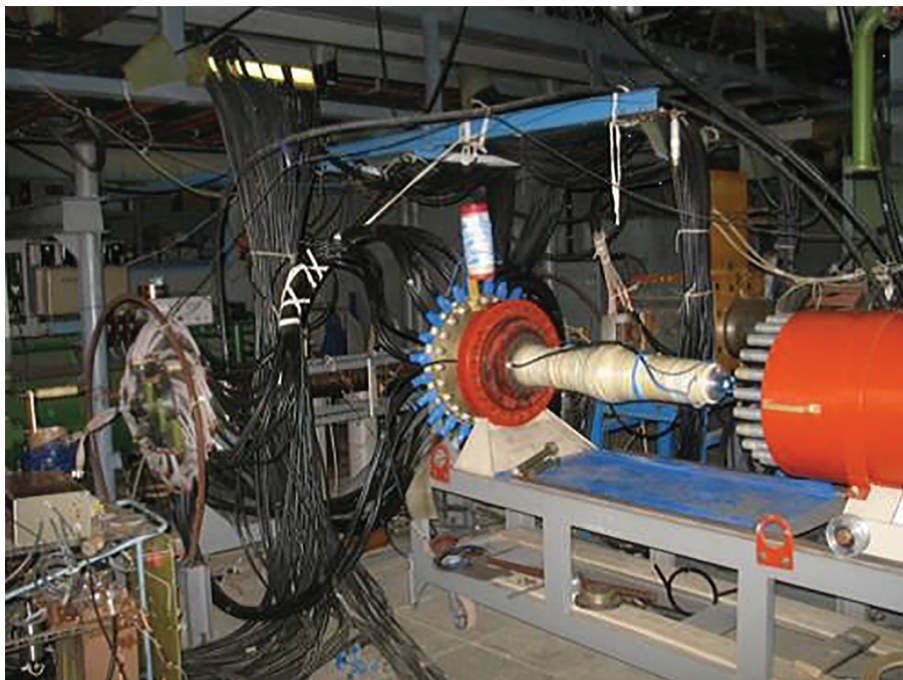


Рис. 10. Взрывомагнитный генератор для запитки плазменных ускорителей [51].

тов диагностикой были зафиксированы достаточно мощные импульсы электромагнитного излучения как в мегагерцовом, так и СВЧ-диапазоне длин волн. Однако взрывные устройства работали крайне нестабильно. Принцип их действия авторами скрывался, поставить эксперименты по физике процесса было невозможно. Поэтому совместное продолжение работ выглядело бессмысленным. Кроме того, не нашло общего языка и наше начальство.

Тогда же родилась идея использовать в таких экспериментах сильноточную релятивистскую электронику. Мы обратили внимание, что взрывомагнитные генераторы позволяют преобразовать химическую энергию конденсированных взрывчатых веществ в энергию электромагнитного поля с эффективностью до 40%, а релятивистские СВЧ-излучатели имеют эффективность преобразования электрической энергии в энергию электронного пучка и электромагнитного излучения до 50%. При этом, однако, возникает ряд нетривиальных проблем, вызванных несоответствием масштаба характерных кинетических энергий. Дело в том, что типичный уровень энерговыделения при детонации КВВ соответствует энергии валентных электронов и составляет величину порядка 1 эВ, в то время как эффективное преобразование энергии электронного пучка в электромагнитное излучение осуществляется в релятивистском диапазоне ~ 0.5 МэВ. Высокая эффективность работы взрывомагнитных генераторов имеет место лишь при их работе на низкоиндуктивные нагрузки, в то время как релятивистские источники работают

обычно при мегавольтном уровне напряжений и обладают высоким электрическим импедансом на уровне нескольких десятков Ом. Необходимо было придумать схемы их согласования.

Разработкой специального короткоимпульсного высоковольтного источника на основе взрывомагнитных генераторов с перехватом потока мы занялись совместно с В.П. Исаковым и его студентами из Красноярского государственного университета. Были разработаны два типа компактных (масса КВВ 200–600 г) высоковольтных взрывомагнитных генераторов с перехватом магнитного потока: цилиндрический генератор с осевым инициированием заряда КВВ [52] и малогабаритный конический генератор со скользящей точкой контакта [53, 54]. Член-корреспондент РАН А.Н. Диденко и его группа из НИИЯФ Томского политехнического университета под руководством А.Г. Жерлицина в качестве источника СВЧ-излучения предложили использовать триод с виртуальным катодом (виркатор) [55]. Это устройство отличалось своей сравнительной простотой, В.Е. называл его просто – “кастрюля” с электродами. Для согласования работы устройств использовались взрывающиеся проводочки, отработанные Е. Азаркевичем из Томского ВНИИВН.

Использование высоковольтных ВМГ с перехватом магнитного потока позволило разработать бестрансформаторную схему (рис. 11) [56, 57] генерации электронного пучка и импульсов СВЧ-излучения с помощью энергии КВВ на основе “бустерного” спирального ВМГ с перехватом потока, выполняющего роль энергетического источника,

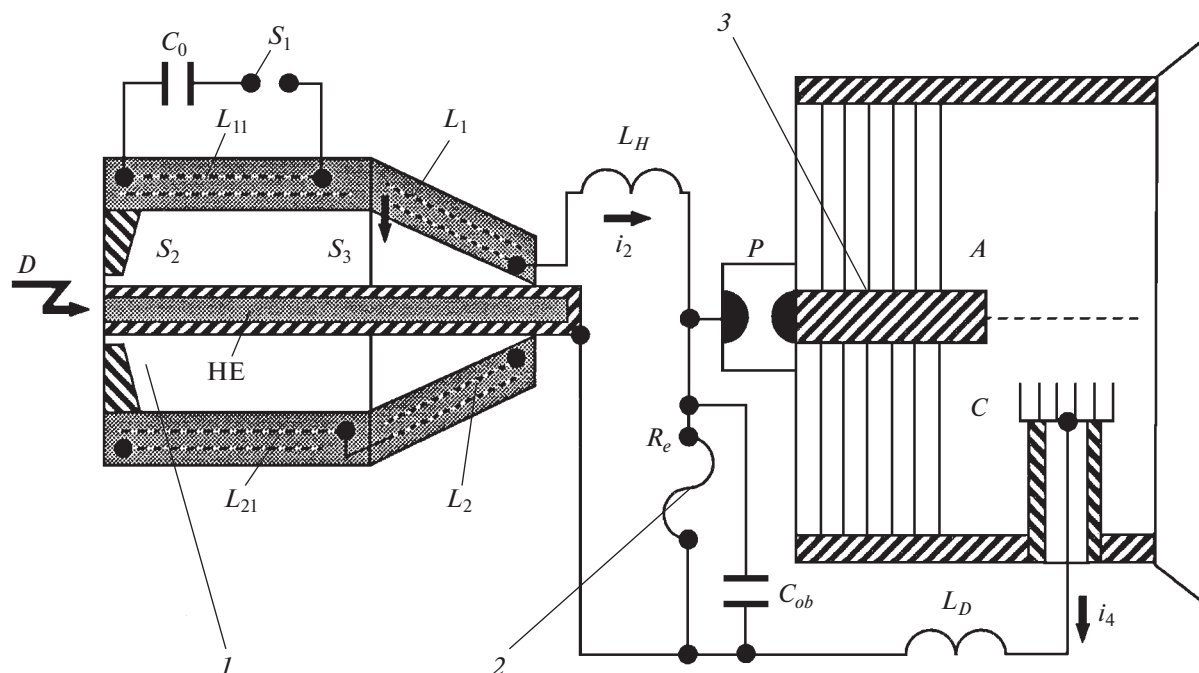


Рис. 11. Схема эксперимента: 1 – взрывамагнитный генератор, 2 – электровзрывной прерыватель, 3 – виркатор [57].

“быстрого” высоковольтного ВМГ с перехватом потока, взрывающихся проволочек, газонаполненного разрядника, обостряющей емкости и виркатора. От небольшой емкости $C_0 = 10^{-4}$ Ф напряжением 3 кВ осуществляется запитка внешней спирали бустерного ВМГ L_{11} , который усиливает электрическую энергию в нагрузку – внешнем соленоиде высоковольтного ВМГ L_1 – до 5 кДж. При расширении лайнера высоковольтного генератора магнитный поток “перехватывается” внутренним соленоидом L_2 , вызывая появление тока в цепи электровзрывного прерывателя R_e . Возникающее при размыкании тока перенапряжение приводит к пробое разрядника P и высоковольтный импульс прикладывается к аноду A виркатора, вызывая взрывную эмиссию с катода C , формирование электронного пучка и генерацию СВЧ-излучения. В ходе экспериментов на виркаторе получены импульсы напряжения до 600 кВ и токи до 16 кА, что соответствует мощности релятивистского электронного пучка 10 ГВт. Мощность выведенного в атмосферу излучения составила 100 МВт. Предложена модель работы элементов схемы и показано ее разумное согласие с экспериментом. Таким образом, проведенные эксперименты продемонстрировали возможность генерации мощного СВЧ-излучения с помощью энергии взрывчатых веществ. Дальнейшее развитие эти работы получили уже в ИВТ АН в лабораториях Е.В. Нестерова и А.В. Шурупова.

5. НЕИДЕАЛЬНАЯ ПЛАЗМА В ГЕРМАНИИ

В эти годы бурно развивается международное сотрудничество. В.Е. Фортов активно участвует в работе различных международных конференций, Черноголовку посещают делегации ученых из различных стран для ознакомления с работами в области экстремальных состояний вещества. Мне хочется отметить особенно плотное взаимодействие с немецкими учеными. В Германии в области физики неидеальной плазмы работала мощная группа теоретиков в университетах городов Берлина, Росток и Грейфсвальда под руководством профессора В. Эбелинга. Эксперименты проводились в Центральном институте электронной физики под руководством Х. Хесса. Регулярно проводились конференции по физике неидеальной плазмы. Сразу же наметились совместные работы. В 1990 г. вышла книга “Теплофизические свойства разогретой плотной плазмы” в соавторстве с В. Эбелингом, А. Форстером, В.К. Грязновым и А. Полищук [58]. Совместно с учеными из Росток Г. Репке, Р. Редмером, Х. Рейнгольц вышел ряд совместных публикаций [39–41]. Это сотрудничество плодотворно продолжается и в настоящее время.

Другое направление совместных научных работ с немецкими учеными осуществлялось с Обществом по исследованию тяжелых ионов г. Дармштадт (GSI) в лаборатории физики плазмы, возглавляемой профессором Дитером Хоффман-

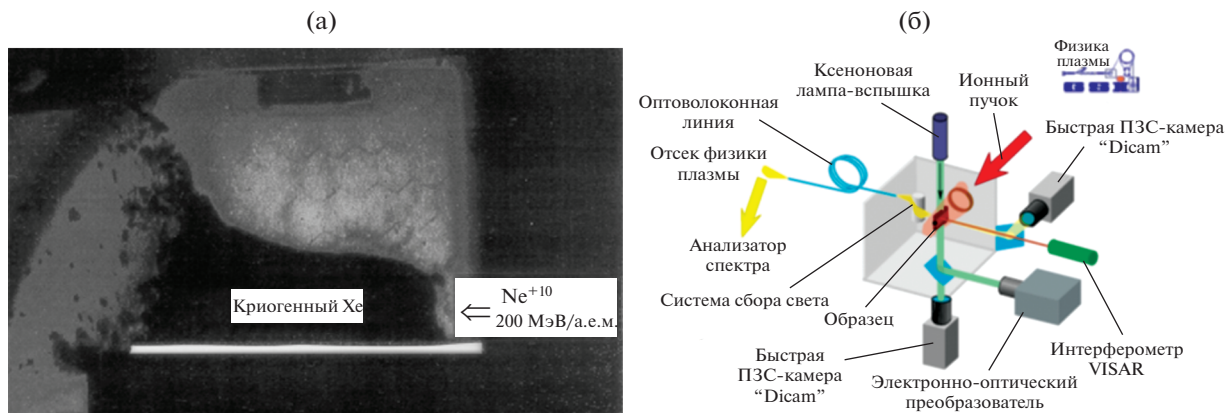


Рис. 12. Фотография воздействия пучка на кристалл ксенона – (а) и схема эксперимента HINEX – (б) [61].

ном. Во всех совместных экспериментах также принимали активное участие сотрудники ИТЭФ (г. Москва) под руководством Б.Ю. Шаркова и А.А. Голубева. Тяжелоионный ускорительный комплекс в GSI позволял получить сфокусированные пучки ионов с энергией 200–300 МэВ на нуклон, интенсивностью до $\sim 5 \times 10^9$ (число частиц за один импульс для ионов урана) и длительностью импульса на мишени до 100 нс за счет временной компрессии пучка высокочастотным полем [59]. В.Е. Фортов первым заметил, что такой драйвер выглядит очень интересным для генерации плотной неидеальной плазмы. Действительно, простые оценки показывают, что высокая интенсивность и значительная длина пробега ионов в веществе мишеней (несколько миллиметров) позволяют достигать уровня концентрации удельной энергии в веществе до 1 кДж/г, что достаточно для нагрева твердого вещества до температур $> 10^3$ К. Были предложены две основные концепции по изучению фундаментальных свойств состояний вещества с высокой плотностью энергии, получаемых при помощи интенсивных ионных пучков [59, 60]: HINEX (heavy ion heating and expansion) – где цилиндрическая или плоская мишень квазиизотропически нагревается пучком ионов, а затем образец изэнтропически расширяется и проходит интересные области фазовой диаграммы, включая двухфазную область; LAPLAS (laboratory planetary sciences) – где осуществляется квазиизэнтропическое обжатие цилиндрической мишени до мегабарных давлений веществом, разогретым кольцевым пучком. Схема эксперимента HINEX и фотография воздействия пучка на кристалл ксенона приведены на рис. 12. В ходе этих экспериментов [59, 61] были реализованы давления до 3 ГПа, температуры до 15 кК и проведены измерения теплофизических свойств и гидродинамического отклика мишеней из различных материалов (Pb, W, Ta, Al, UO₂).

Сотрудничество с немецкими учеными было взаимным. Сотрудники лаборатории физики

плазмы приезжали в Черногоровку для проведения совместных экспериментов по исследованию плазмы, генерируемой взрывом. Из наиболее интересных результатов отмечу исследование поведения спектральных линий ксенона и примесных линий алюминия в ксеноновой плазме [62]. В этих экспериментах удалось проследить уширение, сдвиг и исчезновение линий в зависимости от плотности плазмы, что позволило построить модели механизмов этих процессов в условиях сильного кулоновского взаимодействия [63].

Интенсивно развиваемые В.Е. Фортовым методы исследования плотных сильно взаимодействующих сред требовали совершенно новых и необычных подходов. В середине 1990-х гг. родилась идея использовать для диагностики неидеальной плазмы мощные пучки релятивистских ионов. Дело в том, что они обладают высокой проникающей способностью в веществе и определение изменения интенсивности пучка при этом позволило бы напрямую определить важный параметр плазмы – тормозные потери, тем более что, благодаря сильному кулоновскому межчастичному взаимодействию можно было ожидать проявление очень интересного эффекта увеличения пробега ионов в плазме – ее “просветление”. Задача оказалась достаточно трудной. Каким образом можно совместить чрезвычайно “грязную” взрывную технику, генерирующую высокие давления, ударные волны и всепроникающую пыль с высокочистой глубоковакуумной ускорительной техникой? Этот вопрос был быстро решен при слаженной работе сплоченных команд российских институтов ИПХФ РАН, ИТЭФ и ОИВТ РАН и немецких коллег из Центра физики тяжелых ионов (GSI) Дармштадта. Впервые установка была апробирована и первые эксперименты с протонными пучками были проведены в ИТЭФ в Москве в ноябре 1997 г. [64, 65]. Затем эксперименты продолжались в Дармштадте уже с пучками тяжелых ионов [66]. На рис. 13 приведено фото взрывной камеры на 150 г ТНТ, встроенной в пуч-

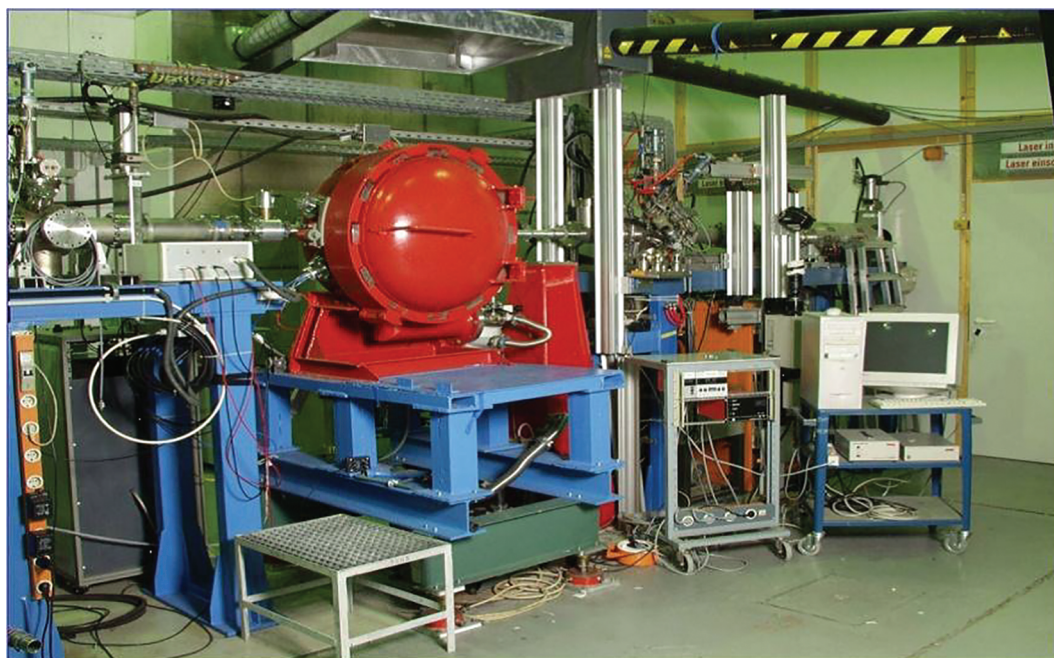


Рис. 13. Взрывная камера на ускорителе в GSI.

ковую линию в GSI. Полученный в ходе этих экспериментов обширный экспериментальный материал позволил значительно продвинуться в понимании процессов, происходящих в неидеальной плазме, и послужил базисом для построения теоретических моделей.

Третьим направлением работ, развиваемым в кооперации GSI, ИПХФ РАН и ИТЭФ, явилась протонная радиография [67]. Существующие радиографические установки на ускорителях протонов в США [68] и России [67, 69] наглядно показали преимущества метода протонной радиографии по сравнению с традиционными рентгенографическими методами диагностики при исследовании

плотных объектов в динамических экспериментах. На ускорительном комплексе ТВН-ИТЭФ (тераваттном накопителе ИТЭФ) создана протонно-радиографическая установка с применением магнитной оптики (протонный микроскоп ПУМА), которая позволяет проводить измерения распределения плотности вещества внутри статических и динамических объектов с помощью пучка протонов с энергией 800 МэВ [67]. Специально для проведения экспериментов со взрывчатыми материалами в состав установки была включена взрывная камера на 150 г тротилового эквивалента. Внешний вид протонного микроскопа ПУМА приведен на рис. 14. К сожалению, эта установка была разруше-

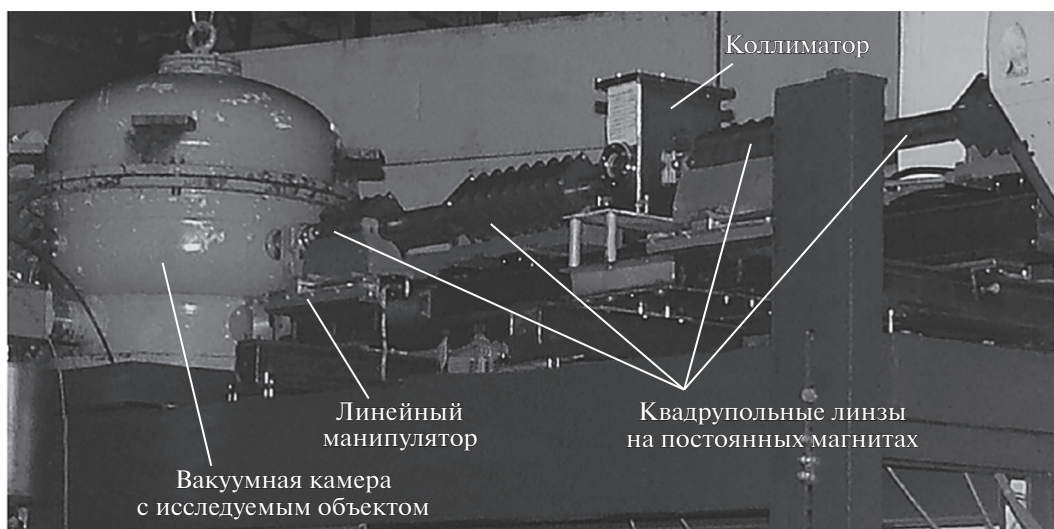


Рис. 14. Протонный микроскоп на ускорительном комплексе ТВН-ИТЭФ [67].

на в 2012 г. в результате пожара. Однако на ней удалось провести эксперименты по регистрации химического пика в ТНТ [70] и измерения плотности ударно-сжатой неидеальной плазмы аргона и ксенона [71]. Более мощный протонный микроскоп PRIOR на энергию 3.5–4.5 ГэВ был разработан и апробирован в динамических экспериментах на взрывающихся проводниках в GSI [72]. В.Е. Фортов всегда говорил о необходимости включения в состав этой установки взрывной камеры для получения важной информации о плотности ударно-сжатого вещества и ее пространственном распределении. Большое внимание он уделял разработке компактных взрывных генераторов, специально предназначенных для экспериментов с протонным микроскопом. Надеемся, что при вводе в эксплуатацию проекта FAIR в 2025 г. можно будет проводить такие эксперименты.

В начале 2000-х гг. в GSI-Дармштадт началась подготовка к созданию научного центра на базе многоцелевого ускорителя антипротонов и тяжелых ионов – проекта FAIR. Физическая программа нового международного научного центра охватывает не только физику экстремального состояния материи [73, 74], но и исследования фазового перехода ядерного вещества в кварк-глюонную плазму при высокой плотности ядерного вещества, исследования адронной физики с помощью аннигиляции антипротонов, а также ряд инновационных приложений. В.Е. Фортов вносил весомый вклад в работу Наблюдательного совета ФАИР, являясь представителем от Российской Федерации и защищая интересы российских физиков.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Так начинались и развивались научные исследования В.Е. Фортова в Черногловке. Хотелось бы подчеркнуть, что работа в Институте проблем химической физики, даже после перехода Владимира Евгеньевича в ИВТ АН, не прекращалась, велась на протяжении всей его жизни и стала одной из генеральных линий в его судьбе. Он руководил лабораторией, а затем отделом экстремальных состояний вещества на общественных началах, был членом Ученого совета, каждую пятницу проводил семинары, даже когда был Председателем Госкомитета по науке и технологиям, Министром науки и технологий, вице-премьером, Президентом РАН. Видимо, невозможно описать весь круг задач, которые решались этим по-настоящему с большой буквы ученым. Но остались его книги, статьи, труды.

Мой последний разговор с Владимиром Евгеньевичем состоялся по телефону в начале ноября 2020 г. Он находился уже в больнице. Его волновал вопрос пленарного доклада на Всероссийской конференции по физике низкотемпературной плазмы в Казани. Уже было понятно, что он сам выступить не сможет, поэтому В.Е. поручил выступить

мне. Ему уже трудно было говорить, и он кратко отметил, какие наиболее важные вопросы необходимо осветить в докладе. Это – ионизация давлением водорода и инертных газов в мегабарном диапазоне давлений, плазменный фазовый переход в дейтерии, достижение рекордных давлений ~20 ТПа в водороде и гелии, квантовый предел вязкости в сильно взаимодействующих средах.

Проведенные в конце 1990-х гг. эксперименты по исследованию электрофизических свойств ударно-сжатой плазмы свидетельствовали о появлении высокого уровня электропроводности (соответствующего металлическому) в водороде и инертных газах при высоких плотностях в области мегабарных давлений [75]. Этот процесс “металлизации” плазмы нашел свое объяснение в рамках процесса ионизации давлением. А определение сжимаемости водорода в совместных экспериментах с ВНИИЭФ впервые позволило говорить об открытии особого фазового перехода первого рода при давлении ~140 ГПа – плазменного фазового перехода [76, 77] (рис. 15). Особый интерес В.Е. Фортов и его сотрудники проявляли к обработке последних экспериментов ВНИИЭФ по достижению рекордных давлений ~20 ТПа в плазме дейтерия и гелия и созданию новых уравнений состояния в этой экзотической области параметров [78].

В последние годы В.Е. Фортов много занимался физикой астрофизических объектов и кварк-глюонной плазмой, где особенно ярко проявляются эффекты сильного взаимодействия. В частности, анализ предельного выражения для отно-

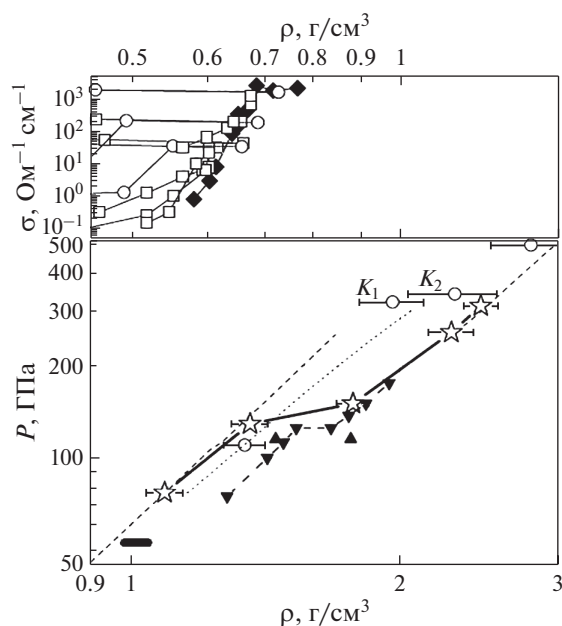


Рис. 15. Электропроводность и давление при квази-изэнтропическом сжатию дейтерия в зависимости от плотности [76].

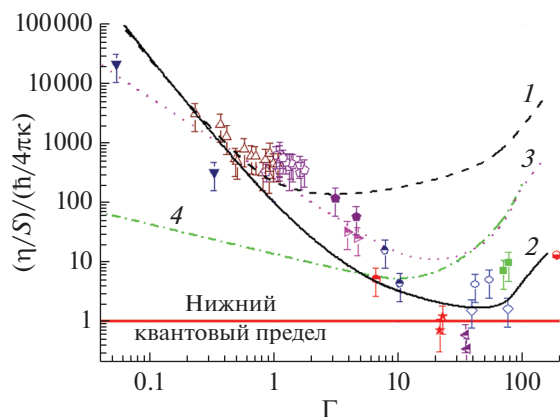


Рис. 16. Отношение сдвиговой вязкости к удельной энтропии в зависимости от параметра неидеальности [78].

шения сдвиговой вязкости к удельной энтропии, выведенного в рамках современной теории струн, показал (рис. 16), что неидеальная плазма с сильным кулоновским взаимодействием является примером такой среды, так что в этом смысле ее можно называть совершенной жидкостью [79].

Наследие, которое оставил нам В.Е. Фортвов, это почти 30 книг: монографий и учебных пособий. В.Е. Фортвов реализовал еще один уникальный проект – 26-томная “Энциклопедия по низкотемпературной плазме”, к реализации которого были привлечены ведущие специалисты России в этой области.

В.Е. Фортвов был всегда полон научных идей. К сожалению, далеко не все идеи удалось воплотить. Но он оставил после себя большую школу своих последователей, среди которых много молодежи. Надеюсь, они продолжат проникновение в эту чрезвычайно интересную область науки – область экстремальных состояний вещества.

Настоящий обзор выполнен в рамках гранта Министерства науки и высшего образования РФ, научным руководителем которого являлся В.Е. Фортвов (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785).

В подготовке обзора автор пользовался помощью, стимулирующими дискуссиями и советами В.К. Грязнова и И.В. Ломоносова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Траектория. Владимир Фортвов / Автор проекта С.В. Фортвова. М.: Международный объединенный биографический центр, 2015. 256 с.
2. Фортвов В.Е. Построение уравнения состояния конденсированных сред с ударными волнами. В кн.: Горение и взрыв. М.: Наука, 1972. С. 561.
3. Фортвов В.Е. Уравнение состояния конденсированных сред // ПМТФ. 1972. № 6. С. 156.
4. Фортвов В.Е. Калорическое уравнение состояния окиси кремния и силиконовой жидкости // ФГВ. 1972. Вып. 3. С. 428.

5. Фортвов В.Е., Дремин А.Н. Определение температуры ударно-сжатой меди по измерению параметров волн разгрузки // ФГВ. 1973. № 5. С. 743.
6. Фортвов В.Е., Леонтьев А.А. О плавлении и испарении металлов в волне разгрузки // ПМТФ. 1974. № 3. С. 162.
7. Фортвов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А., Першин С.В. Изэнтропическое расширение ударно-сжатого свинца // Письма в ЖЭТФ. Т. 20. 1974. Вып. 1. С. 30.
8. Фортвов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А. Оценки параметров критической точки // ТВТ. 1975. Т. 13. Вып. 5. С. 1072.
9. Фортвов В.Е. Гидродинамические эффекты в неидеальной плазме // ТВТ. 1972. Т. 10. № 1. С. 168.
10. Фортвов В.Е., Ломакин Б.Н., Красников Ю.Г. Термодинамические свойства цезиевой плазмы // ТВТ. 1971. № 3. Т. 9. С. 869.
11. Ломакин Б.Н., Фортвов В.Е. Уравнение состояния неидеальной цезиевой плазмы // ЖЭТФ. 1972. Вып. 1(7). С. 93.
12. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лапто Г.Б., Павлов Г.А., Сон Э.Е. Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора. М.: Атомиздат, 1980. 302 с.
13. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортвов В.Е. Расчет ударных адиабат аргона и ксенона // ПМТФ. 1973. Вып. 3. С. 70.
14. Фортвов В.Е., Дремин А.Н., Мусьянков С.И., Якушев В.В. Об “аномальных” эффектах при выходе детонационной волны на свободную поверхность // ТВТ. 1974. Т. 12. № 5. С. 957.
15. Кириллин В.А., Альтов В.А., Шейдлин А.Е. и др. Импульсный магнетогидродинамический генератор со сверхпроводящей магнитной системой // Докл. АН СССР. 1969. Т. 185. № 2. С. 316.
16. Зельдович Я.Б., Ландау Л.Д. Корреляция между жидкими и газообразными состояниями металлов // ЖЭТФ. 1945. Т. 14. С. 32.
17. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 688 с.
18. Франк-Каменецкий Д.А. Лекции по физике плазмы. М.: Атомиздат, 1968. 288 с.
19. Фортвов В.Е. Мощные ударные волны на Земле и в космосе. М.: Физматлит, 2019. 416 с.
20. Минцев В.Б., Фортвов В.Е. Взрывные ударные трубы // ТВТ. 1982. Т. 20. № 4. С. 745.
21. Альтишулер Л.В. Применение ударных волн в физике высоких давлений // УФН. 1965. Т. 85. № 2. С. 199.
22. Фортвов В.Е., Иванов Ю.В., Дремин А.Н., Грязнов В.К., Беспалов В.Е. Взрывной генератор неидеальной плазмы // Докл. АН СССР. 1975. Т. 221. № 6. С. 1307.
23. Беспалов В.Е., Грязнов В.К., Дремин А.Н., Фортвов В.Е. Динамическое сжатие неидеальной плазмы аргона // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. Вып. 6(12). С. 2059.
24. Леонтьев А.А., Дремин А.Н., Грязнов В.К. Генерация неидеальной плазмы мощными ударными волнами // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. Вып. 1. С. 225.
25. Бушман А.В., Фортвов В.Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т. 140. Вып. 2. С. 177.
26. Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. М.: Мир, 1979. 263 с.
27. Беспалов В.Е., Грязнов В.К., Фортвов В.Е. Излучение ударносжатой плазмы аргона высокого давления // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. Вып. 1. С. 140.

28. Грязнов В.К., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Иосилевский И.Л., Фортвов В.Е. Термодинамические свойства неидеальной плазмы аргона и ксенона // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. Вып. 2. С. 573.
29. Иванов Ю.В., Минцев В.Б., Фортвов В.Е., Дремин А.Н. Электропроводность неидеальной плазмы // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. Вып. 1. С. 216.
30. Грязнов В.К., Иванов Ю.В., Старостин А.Н., Фортвов В.Е. Теплофизические свойства ударно-сжатого аргона и ксенона // ТВТ. 1976. № 3. С. 643.
31. Фортвов В.Е. Динамические методы в физике плазмы // УФН. 1982. Т. 138. Вып. 3. С. 361.
32. Алексеев В.А., Фортвов В.Е., Якубов И.Т. Физические свойства плазмы высокого давления // УФН. 1983. Т. 139. Вып. 2. С. 193.
33. Анисимов С.И., Прохоров А.М., Фортвов В.Е. Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях // УФН. 1984. Т. 142. Вып. 3. С. 395.
34. Фортвов В.Е., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. Черногоровка: РИСО АН СССР, 1984. 412 с.
35. Минцев В.Б., Фортвов В.Е., Грязнов В.К. Электропроводность высокотемпературной неидеальной плазмы // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 116.
36. Запорожец Ю.Б., Минцев В.Б., Фортвов В.Е. Отражение лазерного излучения от ударносжатой неидеальной плазмы // Письма в ЖТФ. 1984. № 21. С. 1321.
37. Mintsev V.B., Zaporozhets Y.B. Reflectivity of Dense Plasma // Contrib. Plasma Phys. 1989. V. 29. № 4–5. P. 493.
38. Махлайчук В.Н., Ортнер Й., Рылюк В.М., Ткаченко И.М., Минцев В.Б., Фортвов В.Е. Структурные характеристики и отражение лазерного излучения от ударно-сжатой плазмы ксенона. Препринт ИХФЧ. Черногоровка, 1991. 21 с.
39. Reinholz H., Zaporozhets Y., Mintsev V., Fortov V., Morozov I., Röpke G. Frequency-Dependent Reflectivity of Shock-compressed Xenon Plasmas // Phys. Rev. E. 2003. V. 68. 036403.
40. Zaporozhets Yu., Mintsev V., Gryaznov V., Fortov V., Reinholz H., Raitza T., Röpke G. Reflectivity of Nonideal Plasmas // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V. 39. P. 4329.
41. Zaporozhets Y., Mintsev V., Fortov V., Reinholz H., Röpke G., Rosmej S., Omarbakiyeva Y.A. Polarized Angular-dependent Reflectivity and Density-dependent Profiles of Shock-compressed Xenon Plasmas // Phys. Rev. E. 2019. V. 99. № 4. P. 043202.
42. Шилкин Н.С., Дудин С.В., Грязнов В.К., Минцев В.Б., Фортвов В.Е. Измерение электронной концентрации и проводимости частично ионизованной плазмы инертных газов // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. Вып. 5(11). С. 1030.
43. Анисимов С.И., Беспалов В.Е., Вовченко В.И., Дремин А.Н., Дубовицкий Ф.И., Жарков А.П., Иванов М.Ф., Красюк И.К., Пашинин П.П., Прохоров А.М., Терновой В.Я., Фортвов В.Е., Щур Л.Н. Генерация термоядерных нейтронов при взрывном сжатии дейтериевой плазмы в конических мишенях // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. Вып. 1. С. 1.
44. Квитов С.В., Бушман А.В., Кулиш М.И., Ломоносов И.В., Полищук А.Я., Семенов А.Ю., Терновой В.Я., Филимонов А.С., Фортвов В.Е. Измерение радиационных характеристик плотной плазмы висмута при ее адиабатическом расширении // Письма в ЖЭТФ. 1991. Т. 53. № 7. С. 338.
45. Глушак Б.Л., Жарков А.П., Жерноклетов М.В., Терновой В.Я., Филимонов А.С., Фортвов В.Е. Экспериментальное изучение термодинамики плотной плазмы металлов при высоких концентрациях энергии // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 4(10). С. 1301.
46. Nikolaev D.N., Ternovoi V.Ya., Kim V.V., Shutov A.V. Plane Shock Compression Generators, Utilizing Convergence of Conical Shock Waves // J. Phys.: Conf. Ser. 2014. V. 500. Pt. 14. P. 142026.
47. Кондратенко М.М., Лебедев Е.Ф., Фортвов В.Е. и др. Экспериментальное исследование магнитоплазменного ускорения диэлектрических ударников в рельсотроне // ТВТ. 1988. Т. 26. № 1. С. 159.
48. Взрывные генераторы мощных импульсов электрического тока / Под ред. Фортвова В.Е. М.: Наука, 2002. 398 с.
49. Магнитокумулятивные генераторы – импульсные источники энергии / Под ред. Демидова В.А., Пляшкевича Л.Н., Селимира В.Д. Саров: РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2012. 439 с.
50. Андреев В.Ф., Кареев Ю.А., Умрихин Н.М., Феоктистов Л.П., Фортвов В.Е. Условия генерации импульсного нейтронного излучения при взрывном обжатии термоядерной плазмы. Препринт ИАЭ им. И.В. Курчатова. М., 1992. 39 с.
51. Дудин С.В., Житлухин А.М., Козлов А.В., Леонтьев А.А., Минцев В.Б., Уинурицев А.Е., Фортвов В.Е., Черковец В.Е., Шурупов А.В., Шурупова Н.П. Взрывомагнитный генератор как источник электропитания импульсного плазменного ускорителя // ТВТ. 2010. Т. 48. № 1. С. 3.
52. Жерлицын А.Г., Исаков В.П., Лопатин М.В., Мельников Г.В., Минцев В.Б., Тимченко С.А., Фортвов В.Е., Цветков В.И. Генерация импульсов высокого напряжения взрывомагнитным генератором с осевым инициированием // ТВТ. 1990. Т. 28. № 5. С. 370.
53. Минцев В.Б., Уинурицев А.Е., Фортвов В.Е. Модели работы ВМГ с перехватом магнитного потока // ТВТ. 1993. Т. 31. № 3. С. 469.
54. Карпушин Ю.В., Леонтьев А.А., Минцев В.Б., Уинурицев А.Е., Фортвов В.Е. Экспериментальные исследования компактных ВМГ с перехватом магнитного потока // ТВТ. 1993. Т. 31. № 4. С. 662.
55. Диденко А.Н., Арзин А.П., Жерлицын А.Г. и др. Релятивистские триодные СВЧ-генераторы. В сб.: Релятивистская высокочастотная электроника. Горький: Ин-т прикл. физики АН СССР, 1984. Вып. 4. С. 104.
56. Азаркевич Е.И., Диденко А.Н., Долгополов П.В., Жерлицын А.Г., Исаков В.П., Леонтьев А.А., Лопатин М.В., Минцев В.Б., Уинурицев А.Е., Фоменко Г.П., Фортвов В.Е., Цветков В.И., Шнейдер В.Б., Ясельский Б.К. Генерация импульсов СВЧ-излучения с помощью энергии химических взрывчатых веществ // ДАН СССР. 1991. Т. 319. № 2. С. 352.
57. Азаркевич Е.И., Диденко А.Н., Жерлицын А.Г., Карпушин Ю.В., Леонтьев А.А., Мельников Г.В., Минцев В.Б., Уинурицев А.Е., Фортвов В.Е., Цветков В.И., Шнейдер В.Б., Ясельский Б.К. Генерация электронного пучка и импульсов СВЧ-излучения с помощью энергии химических взрывчатых веществ // ТВТ. 1994. Т. 32. № 1. С. 127.
58. Ebeling W., Forster A., Fortov V.E., Gryaznov V.K., Polishchuk A.Y. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas. Leipzig: BSB V.G. Teubner Verlags-Gesellschaft, 1990. 320 p.

59. *Фортвов В.Е., Хоффманн Д., Шарков Б.Ю.* Интенсивные ионные пучки для генерации экстремальных состояний вещества // УФН. 2008. Т. 178. № 2. С. 113.
60. *Tahir N.A., Deutsch C., Fortov V.E., Gryaznov V., Hoffmann D.H.H., Kulish M., Lomonosov I.V., Mintsev V., Ni P., Nikolaev D., Piriz A.R., Shilkin N., Spiller P., Shutov A., Temporal M., Ternovoi V., Udrea S., Varentsov D.* Proposal for the Study of Thermophysical Properties of High-energy-density Matter Using Current and Future Heavy-ion Accelerator Facilities at GSI Darmstadt // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. 035001.
61. *Varentsov D., Ternovoi V.Ya., Kulish M.D., Fernengel D., Fertman A., Hug A., Menzel J., Ni P., Nikolaev D.N., Shilkin N., Turtikov V., Udrea S., Fortov V.E., Golubev A.A., Gryaznov V.K., Hoffmann D.H.H., Kim V., Lomonosov I.V., Mintsev V.B., Sharkov B. Yu., Shutov A., Spiller P., Tahir N.A., Wahl H.* High-energy-density Physics Experiments with Intense Heavy Ion Beams // Nucl. Instr. Methods Phys. Res. A. 2007. V. 577. P. 262.
62. *Кулиш М.И., Грязнов В.К., Квитов С.В., Минцев В.Б., Николаев Д.Н., Терновой В.Я., Филимонов А.С., Фортвов В.Е., Голубев А.А., Шарков Б.Ю., Хоффманн Д., Штокль К., Ветцлер Х.* Коэффициенты поглощения плотной плазмы аргона и ксенона // ТВТ. 1995. Т. 33. № 6. С. 967.
63. *Денисов О.Б., Орлов Н.Ю., Фортвов В.Е., Кулиш М.И., Грязнов В.К., Минцев В.Б.* Исследование механизмов штарковского уширения и сдвига спектральных линий в неидеальной плазме // Физика плазмы. 2004. Т. 30. № 10. С. 944.
64. *Mintsev V., Gryaznov V., Kulish M., Fortov V., Sharkov B., Golubev A., Fertman A., Meshcheryakov N., Suss W., Hoffmann D.H.H., Stetter M., Bock R., Roth M., Stoelc S., Gardes D.* On Measurements of Stopping Power in Explosively Driven Plasma Targets // Nucl. Instr. Methods Phys. Res. A. 1998. V. 415. P. 715.
65. *Mintsev V., Gryaznov V., Kulish M., Filimonov A., Fortov V., Sharkov B., Golubev A., Fertman A., Turtikov V., Vishnevskiy A., Kozodaev A., Hoffmann D.H.H., Funk U., Stoewe S., Greisel M., Jacoby J., Gaedes D., Chabot M.* Stopping Power of Proton Beam in a Weakly Nonideal Xenon Plasma // Contrib. Plasma Phys. 1999. V. 37. P. 101.
66. *Weyrich K., Wahl H., Hoffmann D.H.H., Golubev A.A., Kantsyrev A.V., Sharkov B. Yu., Kulish M., Dudin S., Mintsev V.B., Fortov V.E., Gryaznov V.K.* Shockwave-driven, Non-ideal Plasmas for Interaction Experiments with Heavy-ion Beams // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V. 39. P. 4749.
67. *Канцырев А.В., Голубев А.А., Богданов А.В., Демидов В.С., Демидова Е.В., Ладыгина Е.М., Марков Н.В., Скачков В.С., Смирнов Г.Н., Рудской И.В., Кузнецов А.П., Худомясов А.В., Шарков Б.Ю., Дудин С.В., Колесников С.А., Минцев В.Б., Николаев Д.Н., Терновой В.Я., Уткин А.В., Юрьев Д.С. и др.* Протонный микроскоп на ускорительном комплексе ТВН-ИТЭФ // ПТЭ. 2014. № 1. С. 5.
68. *King N.P.S., Ables E., Adams K. et al.* An 800-MeV Proton Radiography Facility for Dynamic Experiments // Nucl. Instr. Methods Phys. Res. A. 1999. V. 424. № 1. P. 84.
69. *Антипов Ю.М., Афонин А.Г., Василевский А.В., Гусев И.А., Демянчук В.И., Зятыков О.В., Игнашин Н.А., Каршев Ю.Г., Ларионов А.В., Максимов А.В., Матюшин А.А., Минченко А.В., Михеев М.С., Миргородский В.А., Пелешко В.Н., Рудько В.Д., Терехов В.И., Тюрин Н.Е., Федотов Ю.С., Трутнев Ю.А. и др.* Радиографическая установка ускорителя протонов с энергией 70 ГэВ ГИЦ ИФВЭ // ПТЭ. 2010. № 3. С. 5.
70. *Kolesnikov S.A., Dudin S.V., Lavrov V.V., Nikolaev D.N., Mintsev V.B., Shilkin N.S., Ternovoi V.Y., Utkin A.V., Yakushev V.V., Yuriev D.S., Fortov V.E., Golubev A.A., Kantsyrev A.V., Shestov L.M., Smirnov G.N., Turtikov V.I., Sharkov B. Yu., Burtsev V.V., Zavialov N.V., Kartanov S.A., Mikhailov A.L., Rudnev A.V., Tatsenko M.V., Zheronokletov M.V.* Shockwave and Detonation Studies at ITP-TWAC Proton Radiography Facility // Shock Compr. Condens. Matter. 2011. Pts. 1–2. V. 1426.
71. *Mintsev V.B., Shilkin N.S., Ternovoi V.Y., Nikolaev D.N., Yuriev D.S., Golubev A.A., Kantsyrev A.V., Skobliakov A.V., Bogdanov A.V., Varentsov D.V., Hoffmann D.H.H.* High-explosive Generators of Dense Low-temperature Plasma for Proton Radiography // Contrib. Plasma Phys. 2018. V. 58. № 2–3. P. 93.
72. *Varentsov D., Ionita B., Rodionova M., Shestov L., Vasylyev O., Weyrich K., Antonov O., Efimov S., Krasik Y.E., Bakhmutova A., Bogdanov A., Fertman A., Golubev A.A., Kantsyrev A., Markov N., Panyushkin V., Semennikov A., Skachkov V.S., Turtikov V., Barnes C.W. et al.* Commissioning of the PRIOR Proton Microscope // Rev. Sci. Instrum. 2016. V. 87. № 2. P. 023303.
73. *Фортвов В.Е., Шарков Б.Ю., Штокер Х.* Научная программа в новом международном центре фундаментальной физики – Европейском центре антипротонных и ионных исследований FAIR // УФН. 2012. Т. 182. № 6. С. 621.
74. *Schoenberg K., Bagnoud V., Blazevic A., Fortov V.E. et al.* High-energy-density-science Capabilities at the Facility for Antiproton and Ion Research // Phys. Plasmas. 2020. V. 27. № 4. P. 043103.
75. *Фортвов В.Е., Терновой В.Я., Жерноклетов М.В., Мочалов М.А., Михайлов А.Л., Филимонов А.С., Пяллинг А.А., Минцев В.Б., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л.* Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. Вып. 2. С. 288.
76. *Fortov V.E., Ikaev R.I., Arinin V.A. et al.* Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-isentropic Compression at Megabar Pressures // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. № 18. 185001.
77. *Мочалов М.А., Ильяев Р.И., Фортвов В.Е., Ерунов С.В., Аринин В.А., Блюков А.О., Огородников В.А., Рыжков А.В., Комраков В.А., Куделькин В.Г., Максимкин И.П., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Левашов П.Р., Минаков Д.Г., Парамонов М.А.* Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа // ЖЭТФ. 2021. Т. 159. № 6. С. 1118.
78. *Мочалов М.А., Ильяев Р.И., Фортвов В.Е., Ерунов С.В., Аринин В.А., Блюков А.О., Комраков В.А., Максимкин И.П., Огородников В.А., Рыжков А.В., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Левашов П.Р., Лавриненко Я.С., Морозов И.В., Минаков Д.Г., Парамонов М.А., Шутов А.В.* Сжимаемость неидеальной плазмы дейтерия и гелия до 20 ТПа // ЖЭТФ. 2021. Т. 160. № 5(11). С. 735.
79. *Fortov V., Mintsev V.* Quantum Bound of the Shear Viscosity of a Strongly Coupled Plasma // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 111. P. 125004.

УДК 544.454.3,536.7

РАЗЛИЧНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ИНИЦИИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИИ – “ВЕЧНОЗЕЛЕНАЯ ТЕМА” АКАДЕМИКА ФОРТОВА

© 2021 г. А. В. Еремин*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: eremin@iht.ru

Поступил в редакцию 07.04.2021 г.

После доработки 19.11.2021 г.

Принят к публикации 23.11.2021 г.

Среди чрезвычайно широкого круга интересов академика В.Е. Фортова на протяжении всей его жизни особое место занимали проблемы детонации. В данном обзоре отражен большой цикл исследований различных механизмов инициирования детонации, проведенных по идеям и под непосредственным руководством Фортова. Кратко упомянуты так называемые “световые детонационные волны” и детонационные волны при разрушении сверхпроводников. Более подробно представлены результаты исследований по неравновесному инициированию детонации высокоэнергетичными соударениями во фронте ударной волны и вследствие квантовых эффектов при повышенных давлениях. Но наиболее полно и детально описаны результаты изучения нового физического явления – детонационной волны конденсации, впервые обнаруженного по идеям Фортова при химической конденсации нестабильных молекул за фронтом ударной волны. В заключительной части обзора представлены идеи и предложения Фортова о практическом использовании детонационной волны конденсации для разработки нового, экологически чистого энергетического цикла, исключаящего эмиссию окислов углерода.

DOI: 10.31857/S004036442106003X

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение

1. Неравновесные процессы во фронте ударной волны
2. Квантовые эффекты увеличения частот высокоэнергетических соударений
3. Реальный вклад “суперстолкновений” в инициирование химических реакций
4. Рекомбинационное возбуждение растущих кластеров за фронтом ударной волны
5. Новое физическое явление – детонационная волна конденсации
 - 5.1. Экзотермика пиролиза недокси углерода
 - 5.2. Детонационная волна конденсации в недокси углерода
 - 5.3. Детонационная волна конденсации в ацетилене
 - 5.4. Общие закономерности детонационных волн конденсации
6. О практическом использовании детонационной волны конденсации

Заключение

Список литературы

ВВЕДЕНИЕ

Интересы В.Е. Фортова охватывали чрезвычайно широкий круг проблем, включающих экстремальные состояния вещества, физику плазмы, астрофизику, уравнения состояния вещества и т.д. Однако особое место в круге его интересов всегда занимали проблемы горения и детонации. Владимир Евгеньевич всегда считал себя учеником и последователем академика Я.Б. Зельдовича, по рекомендации которого в 1968 г. он начал свою научную деятельность в Институте проблем химической физики в Черноголовке. С тех пор и до последних дней своей жизни он уделял вопросам инициирования детонации огромное внимание, часто называя их “вечнозеленой темой” в современной физике. При этом, помимо углубленного исследования различных аспектов детонации (пересжатая и недосжатая, спиновая и галолирующая детонация и т.п.), Владимира Евгеньевича особенно привлекал поиск новых физических механизмов, способных инициировать детонацию, а также различных аналогов классической детонации, инициируемой и поддерживаемой экзотермическими химическими реакциями в горючих и взрывчатых веществах.

В частности, он предложил инициировать так называемые “световые детонационные волны” с помощью лазерного излучения, и в работе [1] действительно экспериментально наблюдался детона-

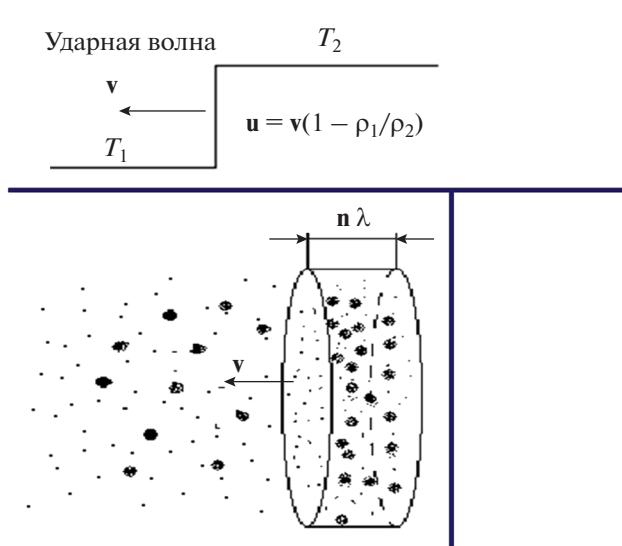


Рис. 1. Схема движения и нагрева газа во фронте ударной волны в легком газе с малой примесью тяжелых молекул.

ционно-подобный режим разрушения волоконных световодов под действием интенсивного лазерного излучения. В [2] В.Е. Фортов рассмотрел другой интересный аналог детонации — так называемый детонационный механизм распространения нормальной фазы в сверхпроводниках с электрическим током, когда мощное джоулево энерговыделение генерирует ударную волну, во фронте которой происходит сжатие и необратимый разогрев вещества, разрушающий сверхпроводящее состояние.

Но особый интерес Фортова привлекала возможность неравновесного инициирования детонации, т.е. создания условий, при которых можно было бы “запустить” детонацию, не вкладывая энергию, необходимую для начала химических превращений в термически равновесных условиях. Возможность реализации таких условий, помимо несомненного фундаментального значения, по мнению В.Е. Фортова, с одной стороны, могла открыть новые перспективы для разработки более эффективных энергетических устройств, а с другой стороны, повысить безопасность при работе с горючими и взрывчатыми веществами.

Вследствие неослабного интереса Фортова к этой проблематике и его разнообразных идей в этом направлении, под его руководством был проведен широкий круг исследований различных механизмов неравновесного инициирования детонации, результаты которых представлены в данном обзоре.

1. НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВО ФРОНТЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Одной из первых возможностей неравновесного инициирования детонации, вызвавшей чрезвычай-

ный интерес Владимира Евгеньевича, была идея Я.Б. Зельдовича [3] о возможности неравновесного инициирования химических реакций в зоне поступательной релаксации во фронте ударной волны в газовых смесях. Существо этого эффекта имеет весьма простую и ясную физическую природу. С молекулярно-кинетической точки зрения можно рассматривать фронт ударной волны как некий быстрый молекулярный пучок, налетающий на покоящийся газ. Поэтому до установления максвелловского распределения есть зона, где преобладают соударения со средней энергией, определяемой скоростью ударной волны, а не равновесной температурой за ней. Очевидно, что наиболее сильно этот эффект должен проявляться в легком газе с малой примесью тяжелых молекул — волна движется быстро и пучок тяжелых молекул будет испытывать очень высокоэнергетические соударения (рис. 1). На рис. 1 T_1 , ρ_1 и T_2 , ρ_2 — равновесные температуры и плотности газа перед и за фронтом ударной волны; v — скорость ударной волны; u — скорость потока газа за волной $u = v(1 - (\rho_1/\rho_2))$; λ — длина пробега в легком газе; n — отношение массы тяжелых молекул к массе молекул несущего легкого газа.

Этот эффект достаточно хорошо подтверждается численными расчетами как методом Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (ММКНСМ), впервые предложенным Бердом [4] и последовательно развиваемым в работах С.В. Куликова с соавторами [5–9], так и на базе приближенного решения уравнения Больцмана для структуры фронта ударной волны, развитого в работе Мотт-Смита [10] и получившего дальнейшее развитие в работах В.Ю. Великодного с использованием модифицированного метода Тамма–Мотт-Смита (ММТМС) [11–13]. На рис. 2 приведен пример расчета относительных темпе-

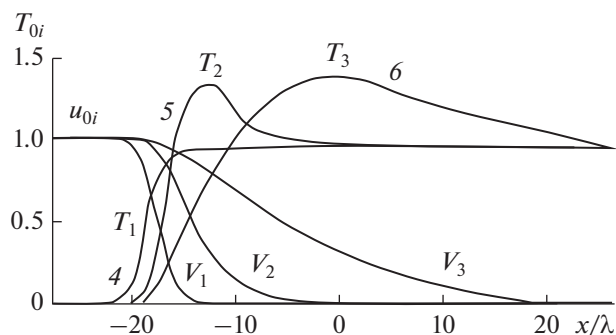


Рис. 2. Профили относительных температур и скоростей различных компонент газовой смеси в зоне поступательной релаксации ударной волны, рассчитанные методом ММКНСМ [6]; массы различных компонент соотносятся как $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 20 : 80$, а их концентрации как $n_1 : n_2 : n_3 = 1000 : 1 : 1$; λ — длина свободного пробега в легком газе; число Маха ударной волны $M = 4$.

ратур и скоростей отдельных компонент смеси, состоящей из молекул легкого газа и 0.1% примеси тяжелых молекул с массой в 20 и 80 раз больше в зоне поступательной релаксации ударной волны [6]. Все величины отнесены к равновесным значениям за фронтом ударной волны. Хорошо видно существенное превышение температур тяжелых компонент над равновесными значениями на расстояниях, достигающих 40 длин свободного пробега в легком газе.

Еще более сильный эффект предсказывают результаты приближенного решения уравнения Больцмана методом ММТМС, позволяющие рассчитывать поведение функции распределения парных соударений молекул по скоростям в высокоэнергетической области. На рис. 3 представлены результаты работы [13] расчетов интеграла соударений

$$F(v_{ij}) = \int_{v_{ij(\min)}}^{\infty} \int f(v_i) f(v_j) dv_i dv_j, \quad (1)$$

отнесенного к равновесному за фронтом ударной волны

$$F_{eq} = \langle v \rangle \exp(-E/kT_2). \quad (2)$$

Здесь $f(v)$ – функции распределения сталкивающихся молекул по скоростям. Расчеты проведены для соударений молекул йода с энергией $E = 5.45$ эВ в зоне поступательной релаксации ударной волны с числом Маха $M = 4.5$ в смеси 1% I_2 с различными легкими газами. Нетрудно видеть, что число таких высокоэнергетических соударений возрастает на много порядков, резко увеличиваясь с уменьшением массы молекул несущего газа.

Разумеется, столь существенное увеличение частот высокоэнергетических соударений во фронте ударной волны при определенных условиях могло приводить к неравновесному инициированию процессов воспламенения и детонации. Для изучения такой возможности были проведены эксперименты по воспламенению 5%-ной стехиометрической смеси $2H_2 + O_2$, разбавленной газами различной молекулярной массы (He, Ne, Ar, CO_2) за ударными волнами [14]. На рис. 4 приведены результаты этих экспериментов, демонстрирующие, что, действительно, в наиболее легком газе-разбавителе гелии задержки воспламенения оказываются существенно короче, чем в остальных смесях, и воспламенение наблюдается при значительно более низких температурах.

2. КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ УВЕЛИЧЕНИЯ ЧАСТОТ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОУДАРЕНИЙ

Позднее внимание В.Е. Фортова привлекли работы А.Н. Старостина с сотрудниками [15–17], где

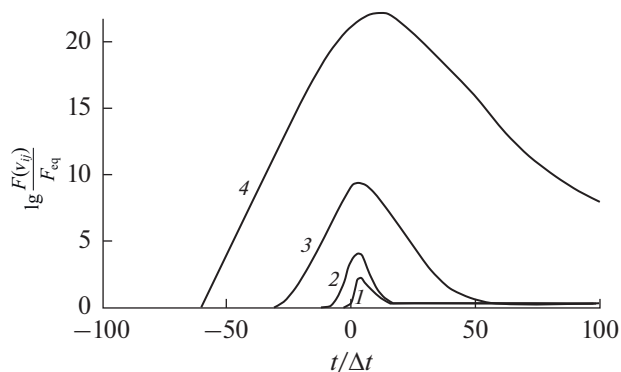


Рис. 3. Эволюция интеграла соударений малой примеси молекул йода между собой с энергиями 5.45 эВ при $M = 4.5$ во фронте ударной волны в различных газах: 1 – Ar, 2 – Ne, 3 – He, 4 – H_2 [13].

на основе квантово-механических расчетов предсказывалось увеличение высокоэнергетических “хвостов” функций распределения по импульсам при повышенных давлениях в силу проявления принципа неопределенностей для энергии сталкивающихся частиц при высокой частоте соударений. Такие квантовые эффекты уже не были связаны с фронтом ударной волны и могли приводить к неравновесному инициированию процессов воспламенения и детонации даже в термически равновесном газе при невысоких температурах. На рис. 5 приведены результаты расчетов [18] увеличения функции распределения высокоэнергетических соударений при повышенных давлениях и температуре 1000 К.

Учет квантовых поправок к функции распределения приводил к измененному выражению для констант скоростей высокопороговых реакций [18]:

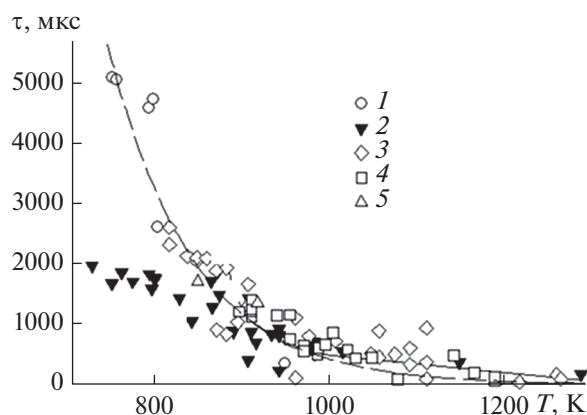


Рис. 4. Времена задержки воспламенения стехиометрической смеси 10% $H_2 + 5\% O_2$ за ударной волной в различных газах-разбавителях: 1 – Ar, 2 – He, 3 – $CO_2 + Ar$, 4 – CO_2 , 5 – Ne; кривая – результаты численного моделирования для смеси с Ar (1) при давлении $P = 1$ атм [14].

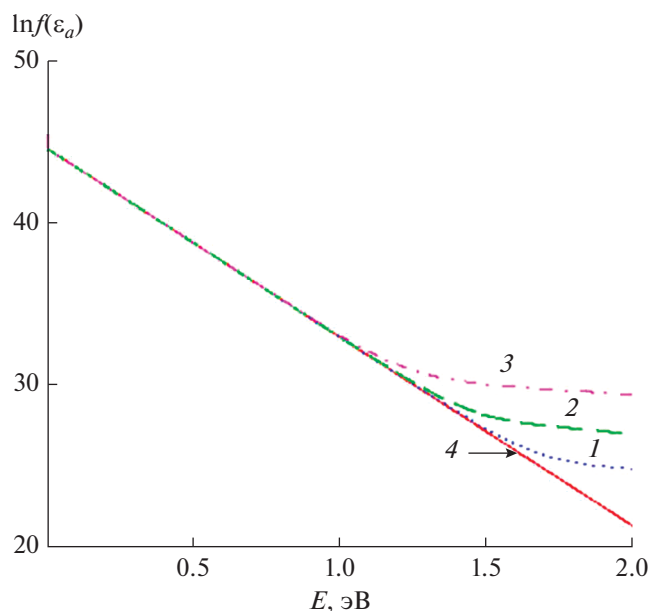


Рис. 5. Влияние квантовых эффектов на увеличение функции распределения высокоэнергетичных соударений при $T = 1000$ К и повышенных давлениях [18]: 1 – $P = 1$ бар, 2 – 10, 3 – 100, 4 – распределение Максвелла.

$$k = k_0 e^{-\frac{\Delta E_0}{T}} \left(1 + e^{-\frac{\Delta E_0 - Q}{T}} \phi \right), \quad (3)$$

где ΔE_0 – энергия активации, Q – тепловой эффект реакции, а $\phi \sim P/T^{1/2}$ – квантовая поправка.

Из данного выражения следовало, что при $e^{-\frac{\Delta E_0 - Q}{T}} \phi \gg 1$ температурная зависимость константы скорости должна выполаживаться и эффективная энергия активации должна становиться равной теплоте реакции.

В совместных работах В.Е. Фортова и А.Н. Старостина с сотрудниками [18, 19] были проанализированы многократно упоминающиеся в литературе расхождения между наиболее полными классическими расчетами и экспериментальными данными об иницировании воспламенения и детонации в водородо-кислородных смесях при невысоких температурах и повышенных давлениях. На рис. 6 приведены результаты выполненных расчетов в сравнении с наиболее достоверными экспериментальными данными. Хорошо видно, что учет квантовых эффектов позволил полностью устранить разногласие расчетных и экспериментальных данных.

3. РЕАЛЬНЫЙ ВКЛАД СУПЕРСТОЛКНОВЕНИЙ В ИНИЦИИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Необходимо отметить, что, несмотря на оптимистические заключения работ [14, 18, 19] про

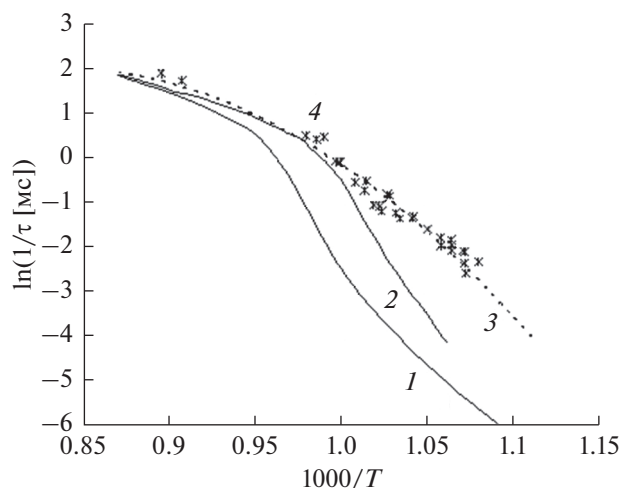


Рис. 6. Аррениусовская зависимость задержек воспламенения в смеси 4% $H_2 + 2\%$ $O_2 + Ar$: 1 – расчеты по классической кинетической модели (GRI-Mech-III) [21], 2 – расчеты по модифицированной модели GRI-Mech [22], 3 – расчеты по модифицированной модели GRI-Mech [22] с учетом квантовых поправок [18], 4 – экспериментальные данные [20].

успешное описание экспериментальных фактов об ускорении воспламенения и детонации водородо-кислородных смесей при невысоких температурах и повышенных давлениях, все теоретические рассуждения работ [3, 5–7, 11, 12, 15–17] касались лишь увеличения частот высокоэнергетичных соударений с энергией ΔE_0 , необходимой для преодоления барьеров высокопороговых реакций иницирования воспламенения. В то же время очевидно, что для фактического прохождения химической реакции необходимо, чтобы вся кинетическая энергия соударения была передана во внутренние степени свободы реагирующей молекулы. Этот вопрос практически не рассматривался в работах [6, 12, 16, 17], утверждающих о влиянии высокоэнергетичных соударений на скорости химических реакций, т.е. по умолчанию считалось, что вероятность неупругого столкновения или стерического фактора перехода $P_{\text{eff}} = 1$.

На самом деле, согласно общепринятым представлениям, основным механизмом активации высокопороговых химических процессов является механизм “слабых” соударений, по которому энергия передается во внутренние степени свободы малыми порциями ΔE , как правило не превышающими энергию колебательного кванта [23, 24]. Очевидно, что такой ступенчатый механизм, требующий большого количества возбуждающих столкновений, в условиях фронта ударной волны неосуществим и реальная вероятность процесса определяется парциальной вероятностью передачи аномально большой порции энергии при единичном соударении. Это же обстоятельство касается возможности проявления квантовых эффектов увеличения частот высокоэнергетичных соударений

в реальном изменении констант скоростей реакций, не учтенной в соотношении (3).

В адиабатическом приближении, где вероятность перехода экспоненциально убывает с ростом параметра Мессе $\xi = Ea/(hv)$ (a – прицельный параметр, v – скорость соударения) [25], вклад таких процессов оказывается пренебрежимо мал даже при $E = 1$ эВ и $v = 5000$ м/с, поэтому эффективное сечение неупругого соударения с передачей нескольких электрон-вольт полностью определяется вероятностью “сильного” неадиабатического перехода. Наиболее разработанной моделью неадиабатических переходов является приближение Ландау–Зинера, опирающееся на рассмотрение потенциальных поверхностей квазимолекулы, образующейся из сталкивающихся частиц, однако количественные расчеты вероятностей перехода даже для простейших систем типа атом–двухатомная молекула оказываются весьма сложными и ненадежными [25]. Следует отметить, что в начале 90-х гг. прошлого века была популярна дискуссия о роли “сильных” соударений или так называемых “суперстолкновений”, играющих, несмотря на малые вероятности переходов, существенную роль в кинетике химических реакций многоатомных молекул [26–29]. Однако механизм таких “суперстолкновений” был проработан довольно слабо как в связи с трудностями анализа маловероятных процессов в траекторных расчетах, на которых основаны все теоретические рассуждения, так и в связи с чрезвычайной ограниченностью имеющегося экспериментального материала [30, 31]. Более того, позднее авторы этой теории вынуждены были отказаться от своей идеи, убедившись, что более аккуратные расчеты указывают на пренебрежимо малую вероятность таких переходов [32].

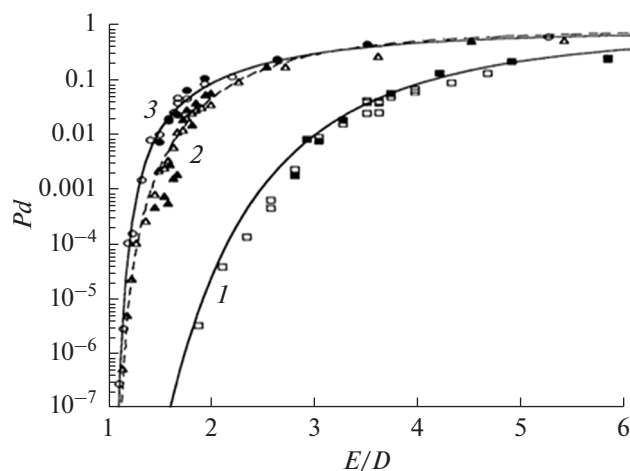


Рис. 7. Вероятности диссоциации молекул кислорода при однократном соударении с атомами различных газов в зависимости от энергии соударения E (D – энергия диссоциации): 1 – He, 2 – Ar, 3 – Xe [33].

На рис. 7 приведены примеры таких траекторных расчетов для вероятности диссоциации молекул кислорода в однократных соударениях с атомами различных газов в зависимости от отношения энергии соударения к энергии диссоциации [33]. Хорошо видно, что для заметных вероятностей таких переходов необходимы энергии соударений существенно выше энергий диссоциации даже при столкновениях с атомами наиболее тяжелых инертных газов.

Эти результаты несколько поколебали уверенность в том, что истинная причина наблюдаемого ускорения воспламенения водородо-кислородных смесей при невысоких температурах действительно связана с вкладом однократных “суперстолкновений”. Действительно, в более поздних работах [34, 35] показано, что причина расхождения экспериментальных данных по задержкам воспламенения в ударных трубах с расчетами может быть связана с погрешностями измерений при невысоких температурах и длительных временах измерения [34], а ускорение воспламенения в легких газах может быть объяснено снижением эффективности тушения активированных частиц [35].

4. РЕКОМБИНАЦИОННОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ РАСТУЩИХ КЛАСТЕРОВ ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Таким образом, наблюдаемые эффекты уменьшения задержек воспламенения не могли служить однозначным свидетельством влияния высокоэнергетических соударений на скорости химических реакций. Однако существовал ряд других экспериментальных данных, в которых наблюдались пики неравновесного излучения за фронтом ударной волны в различных инертных газах с малой примесью тяжелых молекул. Впервые подобные результаты были опубликованы в работе [36], где наблюдались пики излучения за ударной волной в смеси 1% CS_2 с различными газами (He, Ar, Kr, Xe). Позднее подобные пики излучения наблюдались за ударными волнами в инертных газах, содержащих небольшие примеси C_3O_2 [37], $Mo(CO)_6$ [38] и $Fe(CO)_5$ [35]. На рис. 8 приведены примеры пиков излучения на длине волны 615 нм, зарегистрированных в смесях, содержащих 0.5–2% $Fe(CO)_5$ в He и Ar при невысоких температурах (1210 ± 80 K) [35]. Хорошо видно, что в гелии интенсивности пиков излучения существенно больше, чем в аргоне, хотя сразу бросается в глаза, что длительность пиков достигает 5 мкс, что более чем на порядок превышает длительность зоны релаксации во фронте ударной волны. Абсолютно аналогичные результаты были зарегистрированы во всех других исследованных смесях.

В работе [35] был предпринят детальный кинетический анализ полученных данных. В качестве первого предположения рассматривалась возмож-

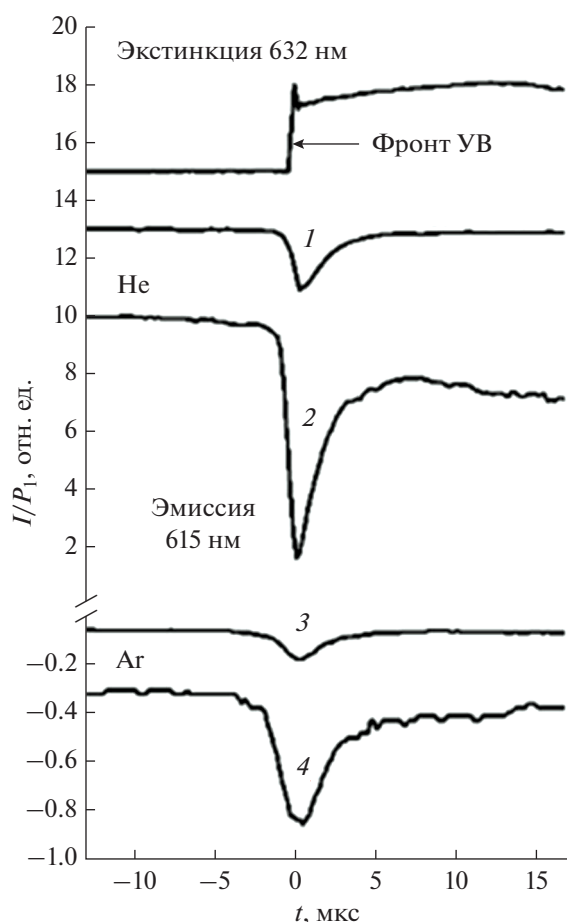


Рис. 8. Пики неравновесного излучения, зарегистрированные за ударными волнами в смесях 0.5–2% $\text{Fe}(\text{CO})_5$ в He и Ar [35]: 1 – $T = 1220$ К, 0.5% $\text{Fe}(\text{CO})_5$ в He; 2 – 1290, 2.0%; 3 – 1200, 0.5% $\text{Fe}(\text{CO})_5$ в Ar; 4 – 1130, 2.0%.

ность возбуждения наблюдаемых пиков излучения в высокоэнергетичных столкновениях в зоне поступательной релаксации во фронте ударной волны. Показано, что в этом случае, если измеренная интенсивность излучения I пропорциональна концентрации возбужденных молекул R_{\max}^* , все полученные при различных скоростях ударной волны в различных газах результаты должны были лечь на единую прямую на графике в координатах

$$\ln(R_{\max}^*/n_1) \sim 2/(\mu_i u^2).$$

Здесь n_1 – концентрация $\text{Fe}(\text{CO})_5$ перед фронтом ударной волны, μ – приведенная масса сталкивающихся молекул, u – скорость ударной волны. На рис. 9 приведены результаты проведенного анализа. Как видно, предположение не верно, и точки для каждой из смесей описываются различными прямыми с разными наклонами.

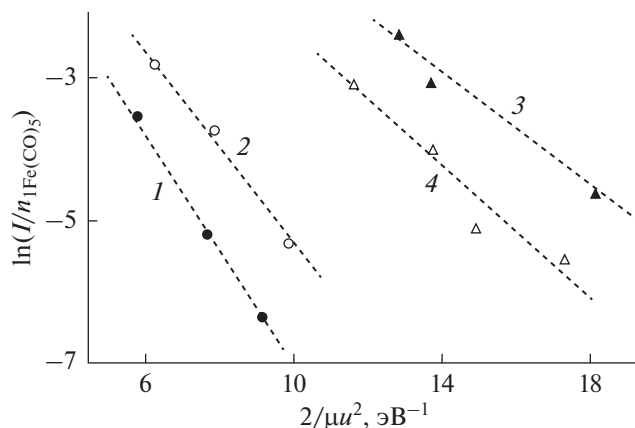


Рис. 9. Больцмановская зависимость максимальной интенсивности пиков излучения, наблюдавшегося за фронтом ударных волн в аргоне (1, 2) и гелии (3, 4), содержащих различные концентрации примеси $\text{Fe}(\text{CO})_5$ (1, 3 – 2%; 2, 4 – 0.5%) [35].

В другом рассмотренном механизме предполагалось, что излучение возникает при быстрой рекомбинации атомов железа, образующихся при распаде $\text{Fe}(\text{CO})_5$ в релаксационной зоне ударной волны. С использованием имеющихся литературных данных по кинетике диссоциации $\text{Fe}(\text{CO})_5$ было показано, что в условиях проведенных экспериментов ($T > 800$ К, $P > 3$ бар) диссоциация $\text{Fe}(\text{CO})_5$ и образование малых кластеров железа протекают очень быстро, так что максимальная концентрация малых кластеров Fe_2 – Fe_9 достигается менее чем за 1 мкс. Поэтому для количественного анализа полученных данных в работе [35] была разработана полная кинетическая схема распада $\text{Fe}(\text{CO})_5$ и образования кластеров железа в основном и электронно-возбужденном состояниях. Результаты моделирования показали, что в этом случае максимальная интенсивность излучения при различных концентрациях $\text{Fe}(\text{CO})_5$ в аргоне и гелии в зависимости от температуры за ударной волной T_2 должна описываться единой зависимостью:

$$\ln\left(\frac{R_{\max}^*}{z_i n_2}\right) \sim \frac{1}{T_2},$$

где z – отношение эффективностей тушения возбужденных кластеров железа в аргоне и гелии; n_2 и T_2 – концентрация $\text{Fe}(\text{CO})_5$ и температура за фронтом ударной волны. Рис. 10 демонстрирует, что данный подход позволил успешно описать все полученные данные.

Таким образом, результаты, полученные в работе [35], позволили заключить, что возникновение пиков неравновесного излучения во фронте ударных волн в различных инертных газах, содержащих малые примеси $\text{Fe}(\text{CO})_5$, обусловлено не высо-

коэнергетичными соударениями в зоне поступательной неравновесности, а возбуждением малых железных кластеров при быстрой конденсации пересыщенного пара атомов железа, образующегося при мгновенной диссоциации Fe(CO)₅ за фронтом ударной волны. Более того, подход, развитый в данной работе, позволил дать альтернативную интерпретацию ряда других результатов, приписываемых влиянию высокоэнергетичных соударений в зоне поступательной релаксации ударной волны [14, 36]. Было сформулировано утверждение, что наиболее вероятным механизмом возникновения наблюдаемых пиков излучения за ударными волнами в смесях, содержащих примеси различных тяжелых молекул, могли являться быстрые вторичные экзотермические процессы при конденсации продуктов их распада.

Последующий кинетический анализ подтвердил, что все исследованные примеси тяжелых молекул при данных параметрах ударных волн действительно очень быстро диссоциируют с образованием соответствующего сильно пересыщенного пара и его последующей “взрывной” конденсацией. Так, для анализа результатов экспериментов с примесью сероуглерода [36] в работе [39] была предложена следующая кинетическая схема (таблица).

Расчеты, проведенные по этой схеме, позволили достаточно хорошо описать наблюдаемые в работе [36] пики излучения (рис. 11).

Аналогичный анализ, проведенный для наблюдаемых пиков излучения в смесях, содержащих 70 ppm Mo(CO)₆ + Ar, также полностью подтвердил, что природа этих пиков связана с неравновесным возбуждением растущих кластеров молибдена.

Но наиболее интересные результаты были получены при исследовании смесей, содержащих примеси недоокиси углерода C₃O₂. Недокись углерода представляет собой весьма нестабильное летучее соединение, и при нагревании до 1400–1600 К его молекулы быстро разлагаются, образуя атом угле-

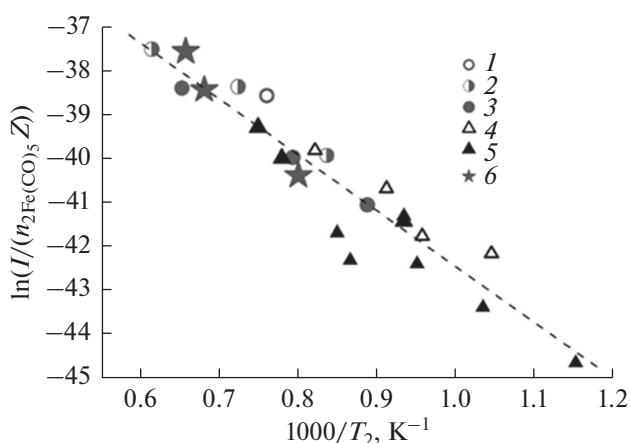
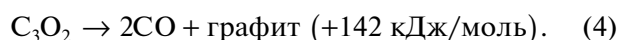


Рис. 10. Зависимость максимальной интенсивности излучения на 615 нм при различных концентрациях Fe(CO)₅ в аргоне и гелии [35]: 1 – 0.1% Fe(CO)₅ в Ar, 2 – 0.5%, 3 – 2.0%, 4 – 0.5% Fe(CO)₅ в He, 5 – 2.0%, 6 – 1.0%.

рода и две молекулы СО. Образующийся при этом сильно пересыщенный углеродный пар начинает немедленно конденсироваться в кластеры и наночастицы. Термический распад недоокиси углерода в ударных волнах и последующее образование конденсированных углеродных наночастиц были исследованы в работах [43–47]. Интегральный тепловой баланс процесса превращения недоокиси углерода в конденсированный углерод и СО существенно положительный [43]:



Анализ детальной кинетики начальных стадий пиролиза недоокиси углерода и образования возбужденных кластеров углерода выполнен в работе [37]. С помощью эмиссионно-абсорбционных измерений в полосах Свана радикалов C₂ был исследован уровень возбуждения электронных и колебательных состояний радикалов при термическом рас-

Кинетическая схема образования и тушения возбужденных кластеров серы при термическом распаде CS₂

Реакция	Константа, [1/см ³]	Источник
CS ₂ + M → CS + S + M	6.06 × 10 ⁻⁹ exp(-40430/T)	[40]
CS ₂ + S → CS + S ₂ *	2.82 × 10 ⁻¹⁰ exp(-5922/T)	[41]
S + S + M → S ₂ + M	2.76 × 10 ⁻³³	[42]
S + S → S ₂ *	5.30 × 10 ⁻⁷ exp(-33000/T)	Оценки [39]
S _n + S + M → S _{n+1} + M	2.76 × 10 ⁻³³	»
S _n + S → S _{n+1} *	5.30 × 10 ⁻⁷ exp(-33000/T)	»
S _n * + M → S _n + M	(2.8–5.0) × 10 ⁻¹¹	»
S _n + S _m * → S _{n+m} *	(1.6–2.5) × 10 ⁻⁹	»

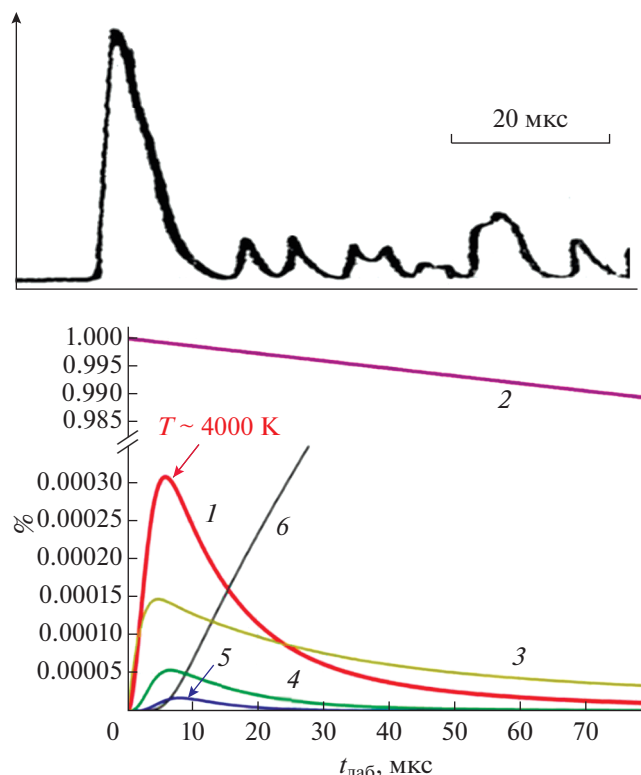


Рис. 11. Пик излучения, наблюдаемый в [36] за ударной волной в смеси 1% $\text{CS}_2 + \text{Kr}$ при $T = 1780 \text{ K}$ (а), и результаты расчетов кинетики диссоциации CS_2 и образования кластеров серы [39] (б): 1 – суммарная концентрация возбужденных кластеров серы размерами от 3 до 9 атомов; 2 – $[\text{CS}_2]$, 3 – $[\text{S}_2]$, 4 – $[\text{S}_4]$, 5 – $[\text{S}_8]$, 6 – $[\text{S}_{10}]$.

паде недокси углерода за ударными волнами. При этом было показано, что диссоциация C_3O_2 при температурах выше 2100 K сопровождается существенным перевозбуждением образующихся радикалов C_2 , а при $T > 2600 \text{ K}$ наблюдается абсолютная инверсия на переходах $\Delta v = 1$ и $\Delta v = 0$ полос Свана, которая достигает максимальных значений при $T \approx 2800 \text{ K}$ в смесях 1% $\text{C}_3\text{O}_2 + \text{He}$. На основании этих экспериментальных результатов в работе [37] был разработан детальный кинетический механизм, описывающий кинетику образования возбужденных кластеров углерода при пиролизе недокси углерода за ударными волнами.

5. НОВОЕ ФИЗИЧЕСКОЕ ЯВЛЕНИЕ – ДЕТОНАЦИОННАЯ ВОЛНА КОНДЕНСАЦИИ

Проведенные исследования практически подвели черту под попытками неравновесного инициирования воспламенения и детонации с помощью высокоэнергетичных соударений и окончательно подтвердили, что все наблюдаемые неравновесные явления за фронтом ударной волны в газах, содержащих небольшое количество тяжелых мо-

лекул, связаны со вторичными химическими реакциями в процессе их распада. Однако эти же исследования открыли новые неравновесные явления, связанные с экзотермическими процессами роста кластеров из пересыщенного пара, образующегося при мгновенном распаде различных нестабильных молекул за фронтом ударной волны. Именно эти результаты подтолкнули В.Е. Фортова к постановке вопроса о возможности использования этих экзотермических процессов роста кластеров и их последующей конденсации для инициирования детонации. В первую очередь, особенно с практической точки зрения, В.Е. Фортова заинтересовал вопрос о вкладе энергии конденсации углеродных наночастиц в горение и детонацию газообразных углеводородов, поскольку большинство этих процессов сопровождается образованием частиц конденсированного углерода. Известно, что теплота конденсации паров углерода в графит весьма велика и составляет около 720 кДж/моль, поэтому им был поставлен естественный вопрос: какова роль этой энергии при развитии волн горения и детонации углеводородов? В 2007 г. В.Е. Фортов сформулировал и другой, более принципиальный вопрос: возможно ли генерировать волну, поддерживаемую только тепловыделением конденсации?

Как показалось на первый взгляд, ответ на этот вопрос должен быть скорее всего отрицательный. В отличие от реакций воспламенения, процесс конденсации не ускоряется с ростом температуры, отсутствуют разветвленные цепные механизмы, а времена роста конденсированных частиц могут потребовать миллионов столкновений.

Анализ имеющейся литературы тоже не вселял оптимизма. В частности, Лев Ландау описал скачок конденсации, возникающий при резком расширении и охлаждении пара в сверхзвуковой струе [48] (рис. 12). Но, как он отметил, при всем формальном сходстве с детонационной волной этот скачок не превращает поток из сверхзвукового в дозвуко-

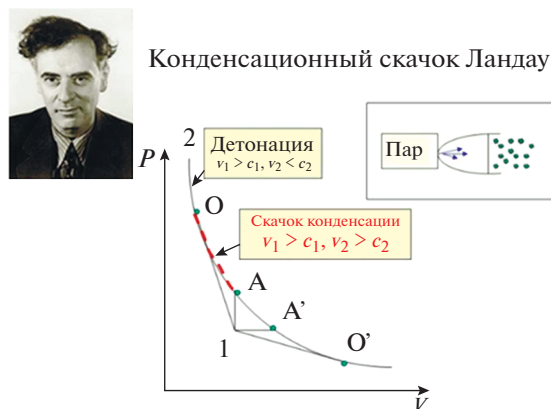


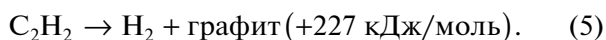
Рис. 12. Скачок конденсации в сверхзвуковой струе пересыщенного пара [48].

вой, и поэтому он соответствует участку адиабатической кривой, который обозначен на рис. 12 пунктирной линией, в то время как участок детонации лежит выше точки О. Другими словами, Ландау, рассматривая выделение тепла при конденсации, не рассматривал ситуацию, когда выделение тепла инициирует и поддерживает ударную волну.

Более того, если рассматривать некий объем, наполненный пересыщенным паром, то невозможно сформулировать условия для распространения волны конденсации. Действительно, если в какой-то точке этого объема возникнет спонтанная конденсация, то она может привести лишь к снижению давления, а рост температуры вследствие выделения теплоты конденсации в этой точке убавит степень пересыщения и таким образом замедлит скорость конденсации. Поэтому не возникает условий для формирования и распространения детонационной волны, для которой необходимыми условиями являются повышение давления и увеличение скорости звука вследствие экзотермических реакций (в классической детонации при окислении горючего газа).

Однако более пристальный анализ этой проблемы позволил сформулировать условия возникновения детонационной волны конденсации [49]. Основным условием должно являться то, что пересыщенный пар должен образовываться непосредственно в результате быстрых химических реакций разложения исходного газообразного вещества во фронте волны. Таким образом, сама волна должна инициировать сопровождающиеся существенным выделением тепла процессы образования сильно пересыщенного пара и его последующей немедленной конденсации. Такой набор процессов, в отличие от хорошо известной “физической конденсации”, был назван “химической конденсацией” [49]. Действительно, в такой ситуации процесс образования пара вследствие диссоциации исходных молекул будет экспоненциально ускоряться с ростом температуры, а последующие экзотермические рекомбинационные реакции конденсации обеспечат быстрое и интенсивное выделение тепла. Разумеется, данное исходное вещество должно быть экзотермическим, т.е. интегральный процесс его пиролиза и последующего образования конденсированной фазы должен иметь положительный тепловой баланс.

Наиболее известным соединением такого типа является ацетилен. При пиролизе ацетилена образуются графитизированная сажа и молекулярный водород и выделяется значительное количество энергии:



Процесс возникновения волн дефлаграции и детонации при саморазложении ацетилена впер-

вые наблюдали еще в конце XIX в. Бертло и ле Шателье [50]. С тех пор этот процесс, конечно же, исследовался огромным количеством авторов. Однако определить количественно вклад энергии конденсации в формирование волн дефлаграции и детонации в этом процессе было довольно трудно из-за наличия большого числа сложных промежуточных реакций роста многоатомных углеводородов, предшествующих образованию конденсированных углеродных частиц.

Поэтому для того, чтобы более наглядно и количественно точно определить роль энергии конденсации в формировании детонационной волны, было предложено использовать другое экзотермическое вещество — недоокись углерода C_3O_2 (4), при пиролизе которой уже наблюдалось неравновесное излучение кластеров C_2 , а также была изучена кинетика диссоциации и роста кластеров [37].

При этом принципиальное отличие процесса конденсации при пиролизе недоокиси углерода от любых углеводородов состоит в том, что атомы и кластеры углерода являются непосредственными продуктами ее диссоциации, в то время как при пиролизе углеводородов процесс формирования конденсированных углеродных наночастиц идет путем последовательного роста полиуглеводородных радикалов с уменьшением содержания атомов водорода. Другой важнейшей особенностью пиролиза недоокиси углерода является то, что лимитирующей стадией (“бутылочным горлышком”) всего процесса, вплоть до образования конденсированных частиц, является реакция образования паров углерода, скорость которой экспоненциально возрастает с ростом температуры [43].

Кроме того, как известно из работ [51–53], при температурах 1800–2500 К и давлениях 3–0 бар стадия роста кластеров до размеров 10^3 – 10^4 атомов, сопровождающаяся интенсивным тепловыделением, длится всего около 1–10 мкс.

Таким образом, это достаточно уникальное, экзотермическое углеродное соединение, не содержащее водорода, оказалось идеальным модельным веществом для изучения проблемы возникновения и распространения детонационной волны конденсации.

5.1. Экзотермика пиролиза недоокиси углерода. В первой серии исследований, направленных на точное измерение тепловыделения конденсации углеродных наночастиц, эксперименты проводились в смесях, содержащих только 3% C_3O_2 в аргоне [54, 55]. Эксперименты проводились за отраженными ударными волнами в ударной трубе из нержавеющей стали с внутренним диаметром 80 мм с камерой высокого давления (КВД) длиной 2.5 м и камерой низкого давления (КНД) длиной 6.3 м. Исследуемые газовые смеси, состоящие из 3% C_3O_2 и 5% CO_2 в Ar, готовились барометрически в смеситель-

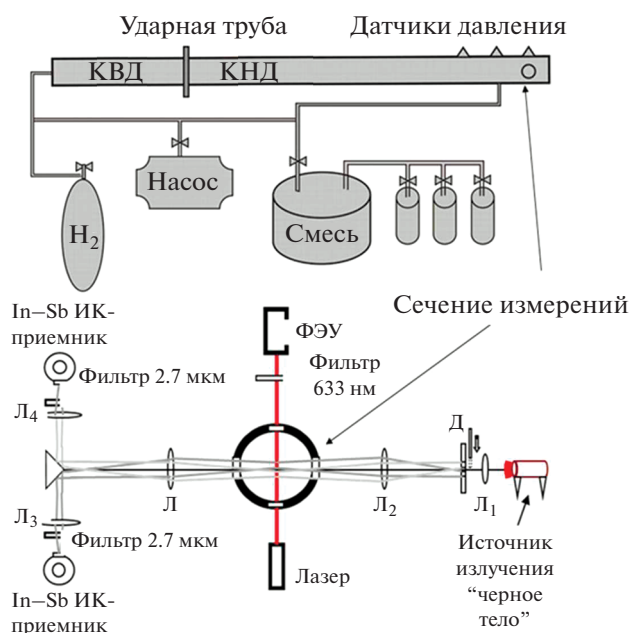


Рис. 13. Схема установки и измерений роста конденсированных углеродных наночастиц и температуры смеси при пиролизе недооксида углерода за ударными волнами [55].

ном сосуде из нержавеющей стали. В смесь для увеличения чувствительности ИК-термометрии добавлялся CO₂, в том числе чтобы обеспечить возможность измерения температуры до начала образования частиц. Давление перед ударной волной варьировалось от 30 до 130 мбар. Начальные параметры смеси непосредственно за фронтом ударной волны были определены на основе данных о скорости ударной волны, измеренных по сигналам пьезоэлектрических датчиков. Результирующие "замороженные" температуры ударно-нагретого газа за отраженными ударными волнами T_5 были определены на основе одномерной газодинамической теории и предположения о колебательно-вращательном равновесии и замороженных химических реакциях. В экспериментах эти значения варьировались между 1400 и 2200 К. Максимальное время измерений за отраженной ударной волной изменялось в зависимости от условий эксперимента в диапазоне 800–1000 мкс.

На рис. 13 представлена схема установки и диагностической аппаратуры. Сечение измерений находилось на расстоянии 15 мм от торца ударной трубы. Регистрация образования и роста объемной фракции конденсированных частиц проводилась путем измерения экстинкции излучения He-Ne-лазера на длине волны 633 нм. Для измерения температуры использовался двухканальный обобщенный метод обращения спектральных линий [55, 56], основанный на одновременном измерении эмиссии и абсорбции в ИК-спектре на длине

волны 2.7 мкм. По одному из каналов проходило излучение от эталонного источника, которое пропусклось через наблюдаемый объем в ударной трубе. По второму каналу регистрировалось только спонтанное излучение из исследуемого объема. Оба оптически идентичных канала фокусировали свет из регистрируемого сечения ударной трубы через линзы CaF₂ ($f = 100$ мм, $d = 25$ мм) на два ИК-детектора InSb Judson J10D. Для выделения спектрального диапазона спектра поглощения и излучения в области $\lambda = 2.7 \pm 0.3$ мкм (что соответствует колебательной полосе поглощения CO₂ (1,0,1)) были выбраны полосовые фильтры с FWHM = 0.3 мкм (Laser Components). В качестве эталонного источника света использовалась лампа "Черное тело" в виде нагретой вольфрамовой трубки (внутренний диаметр – 3 мм, длина трубки – 40 мм). Внутреннее отражение внутри трубки обеспечивало излучательную способность ~ 0.95 на длине волны 2.7 мкм. Свет от открытого конца вольфрамовой трубки коллимировался с помощью линзы из CaF₂ ($f = 150$ мм, $d = 25$ мм) и направлялся через окошки ударной трубы. Эффективная яркостная температура T_0 излучения источника на $\lambda = 2.7$ мкм внутри измеряемого объема определялась с помощью пирометра и устанавливалась на $T_0 = 1700 \pm 20$ К путем регулировки тока лампы. Временное разрешение системы регистрации было около 10 мкс. Временные профили сигналов излучения $I_e(t)$ и поглощения + излучения $I_a(t)$ регистрировались независимо на двух каналах осциллографа. Интенсивность проходящего света через поглощающую среду определяется по закону Ламберта–Бэра, а корреляция между излучательной способностью и поглощением на любой длине волны определяется законом Кирхгофа для теплового излучения. Комбинация обоих соотношений определяет значение температуры исследуемой среды в виде следующего соотношения [55]:

$$T(t) = \frac{h\nu}{k} \left\{ \ln \left[1 + \left(e^{\frac{h\nu}{kT_0}} - 1 \right) \left(1 - \frac{I_a(t) - I_0}{I_e(t)} \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (6)$$

где $\nu = hc/\lambda$, I_0 – начальная интенсивность излучения эталонного источника. Такой метод применим, только если температура среды неизменна во всем наблюдаемом объеме и все ослабление зондирующего излучения возникает в результате поглощения (а не рассеяния). Первое условие выполняется в ударной трубе, если можно пренебречь граничными эффектами или осаждением холодных частиц на окнах. Последнее условие может быть принято, если размеры частиц углерода находятся в пределах значений Рэлея, т.е. размер частиц намного меньше, чем длина волны зондирующего света. С увеличением оптической плотности исследуемой смеси (при большой концентрации ча-

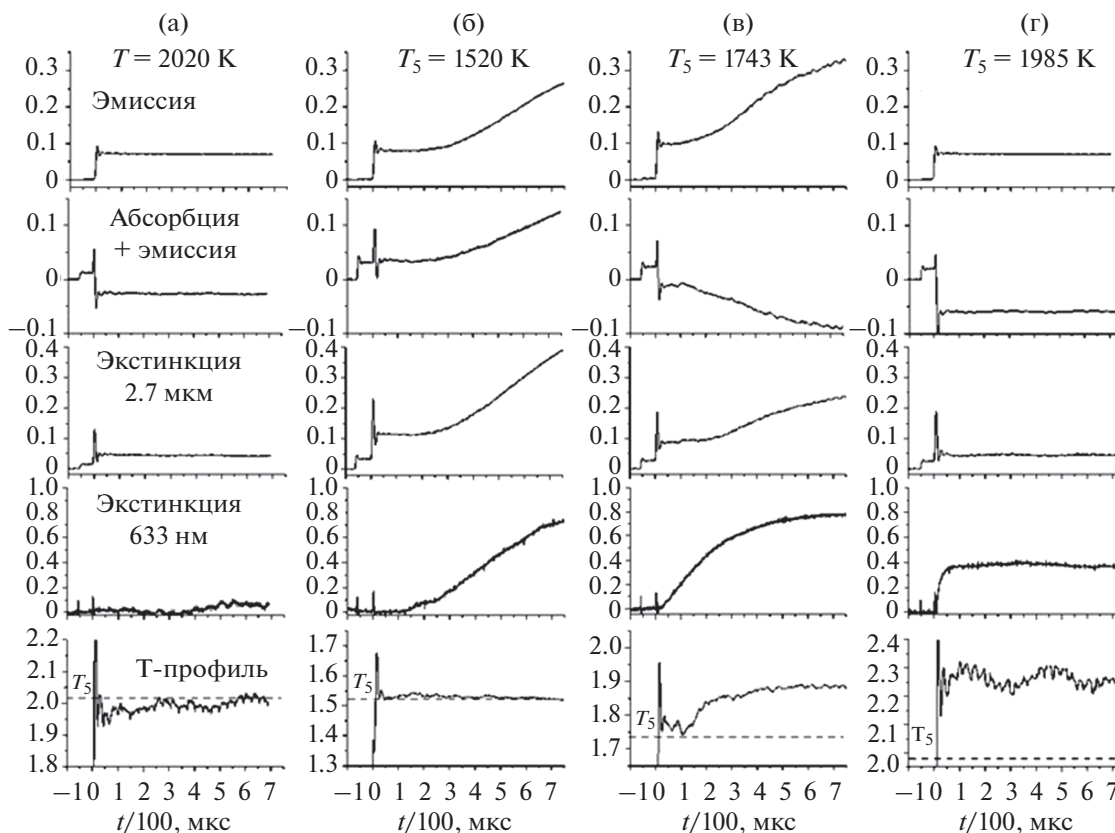


Рис. 14. Примеры зарегистрированных сигналов, оцененные по ним временные профили экстинкции на длинах волн $\lambda = 633$ нм и 2.7 мкм и температуры в смесях 5% CO_2 в Ar (а) и 3% $\text{C}_3\text{O}_2 + 5\%$ CO_2 в Ar (б)–(г) [54].

стиц) объем детектирования смещается в сторону окна детектирования, что тем не менее не имеет значения в однородной смеси. Однако во всех проведенных экспериментах выполнялись условия оптически тонкого слоя (т.е. поглощение составляло $<10\%$).

Примеры полученных сигналов и определенных по ним временных профилей оптической плотности частиц и текущей температуры смеси представлены на рис. 14. Верхние две осциллограммы на всех рис. 14 представляют сигналы эмиссии и суммы эмиссии и абсорбции, по которым определялась температура смеси, следующие две осциллограммы демонстрируют сигналы экстинкции на длинах волн 2.7 мкм и 633 нм, а нижний ряд – профили температуры смеси, определенные уравнением (6) по верхним двум осциллограммам. Сигнал экстинкции на 2.7 мкм определялся как разность эмиссионного и абсорбционно-эмиссионного сигнала на той же длине волны.

Перед проведением экспериментов с недоокисью углерода для проверки метода измерения температуры была проведена серия тестовых измерений в нереагирующих смесях, содержащих только 5% CO_2 в Ar (рис. 14а). Хорошо видно отсутствие экстинкции и хорошее согласие между измеренной темпе-

ратурой и рассчитанной “замороженной” температурой T_5 (пунктир на нижних графиках рис. 14). Расчетная погрешность измерений температуры зависела от разницы между T_0 и T_5 и варьировалась от ~ 20 К при $T_5 \sim T_0$ до ~ 50 К при $|T_5 - T_0| \sim 300$ К. Измерения в реагирующих смесях (3% $\text{C}_3\text{O}_2 + 5\%$ CO_2 в Ar), представленные на рис. 14б–14г, были выполнены в диапазоне “замороженных” температур $T_5 = 1400\text{--}2200$ К (т.е. в диапазоне, где в предшествующих работах [51, 52] наблюдался максимум оптической плотности и размеров частиц).

При наиболее низкой температуре $T_5 = 1520$ К (рис. 14б) оба сигнала экстинкции возрастают после времени индукции приблизительно в течение 300 мкс, что отражает образование частиц. Измеренная температура смеси хорошо совпадает с T_5 и остается постоянной в течение 700 мкс. Таким образом, в этом случае ни разложение C_3O_2 , ни образование частиц не вызывают заметных тепловых эффектов. При $T_5 = 1743$ К (рис. 14в) сигналы экстинкции выглядят аналогично, но измеренная температура показывает значения, близкие к T_5 , только в течение первых 100 мкс после прохождения фронта ударной волны. Через ~ 150 мкс температура поднимается на ~ 150 К, синхронно

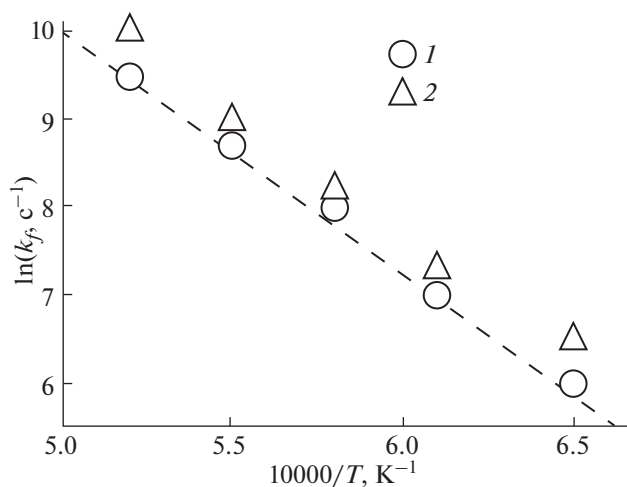


Рис. 15. Эффективные константы скорости роста частиц по измерениям экстинкции при 633 нм (1) и температуры (2) [55]; линия – константа скорости распада C_3O_2 , определенная в [43].

со значительным увеличением экстинкции в видимом и ИК-диапазоне. При $T_5 = 1985$ К (рис. 14г) сигналы экстинкции отражают быстрый рост частиц. При этом и измеренная температура сразу показывает значения почти на 300 К выше, чем T_5 . В течение дальнейшего времени эксперимента и экстинкция, и температура практически не меняются, что свидетельствует об установлении равновесия в смеси.

Таким образом, эти предварительные эксперименты предоставили первые данные о существенном и достаточно быстром разогреве смеси, содержащей всего 3% C_3O_2 . Эта информация представляла обнадеживающие сведения о возможности образования детонационной волны при конденсации паров углерода в данной системе. При этом необходимо еще раз подчеркнуть, что наиболее важное условие заключалось в том, что лимитирующей стадией всего процесса должна являться скорость образования паров углерода или, в случае углеводородов, активных радикалов, являющихся центрами последующей конденсации. Это принципиальное свойство “химической конденсации” обеспечивает экспоненциальное ускорение всего процесса с ростом температуры, что в свою очередь является необходимым условием возникновения и существования детонационной волны. Проведенные эксперименты позволяли определить выполнимость этого важного условия. Полученные данные о временных профилях экстинкции предоставили информацию о скорости роста объемной фракции конденсированной фазы f_V :

$$f_V = -\frac{\ln I/I_0}{\epsilon l},$$

где I и I_0 – интенсивности падающего и прошедшего излучения; l – длина оптического пути (диаметр ударной трубы); ϵ – коэффициент экстинкции углеродных наночастиц (для $\lambda = 633$ нм $\epsilon = 5.1 \times 10^6$ м⁻¹ [57]). Константа скорости объемной фракции конденсированной фазы k_f определялась путем экстраполяции поздних стадий роста частиц релаксационным уравнением:

$$\frac{df_V}{dt} = k_f(f_V^\infty - f_V).$$

Аналогично определялись константы скорости роста температуры смеси. На рис. 15 полученные данные о температурных зависимостях констант скорости роста частиц и температуры смеси [55] сопоставлены с данными о константе скорости (в см³ моль⁻¹ с⁻¹) распада C_3O_2 , измеренной в [43]:

$$k_d = 2 \times 10^{15} \exp(-10720/T).$$

Хорошо видно близкое согласие этих зависимостей, что подтверждает выполнение основного условия “химической конденсации” об экспоненциальном увеличении скорости образования конденсированных частиц с ростом температуры.

Другой важной особенностью распада недоокиси C_3O_2 и последующей конденсации углерода является полное отсутствие вторичных газообразных реакций: при диссоциации C_3O_2 в системе остаются только пары углерода и окись углерода CO, которая химически стабильна до $T < 4000$ К. Это обеспечивает возникновение волны конденсации непосредственно за зоной пиролиза исходных молекул.

Данные свойства пиролиза недоокиси углерода предоставили возможность провести простой анализ взаимосвязи между ростом конденсированных частиц и выделением тепла за ударными волнами различной интенсивности, что могло позволить оценить пороговые параметры формирования детонационной волны. Для достоверного подтверждения существования этого явления были проведены экспериментальные измерения изменения параметров волны конденсации при различных интенсивностях начальной ударной волны и концентрациях C_3O_2 .

5.2. Детонационная волна конденсации в недоокиси углерода. С этой целью следующая серия экспериментов была проведена в смесях, содержащих 10–30% C_3O_2 в Ar [58–61]. Температура и давление за отраженной ударной волной до химических превращений (так называемые “замороженные” параметры) находились в диапазонах 1400–2000 К и 4–9 бар. Фактическое давление и скорость ударной волны измерялись несколькими пьезодатчиками, установленными на различных расстояниях от 0 до 300 мм от торца ударной трубы. Кроме того, интенсивность излучения в диапазоне $\lambda = 633 \pm 10$ нм и экстинкция лазерного луча, отображаю-

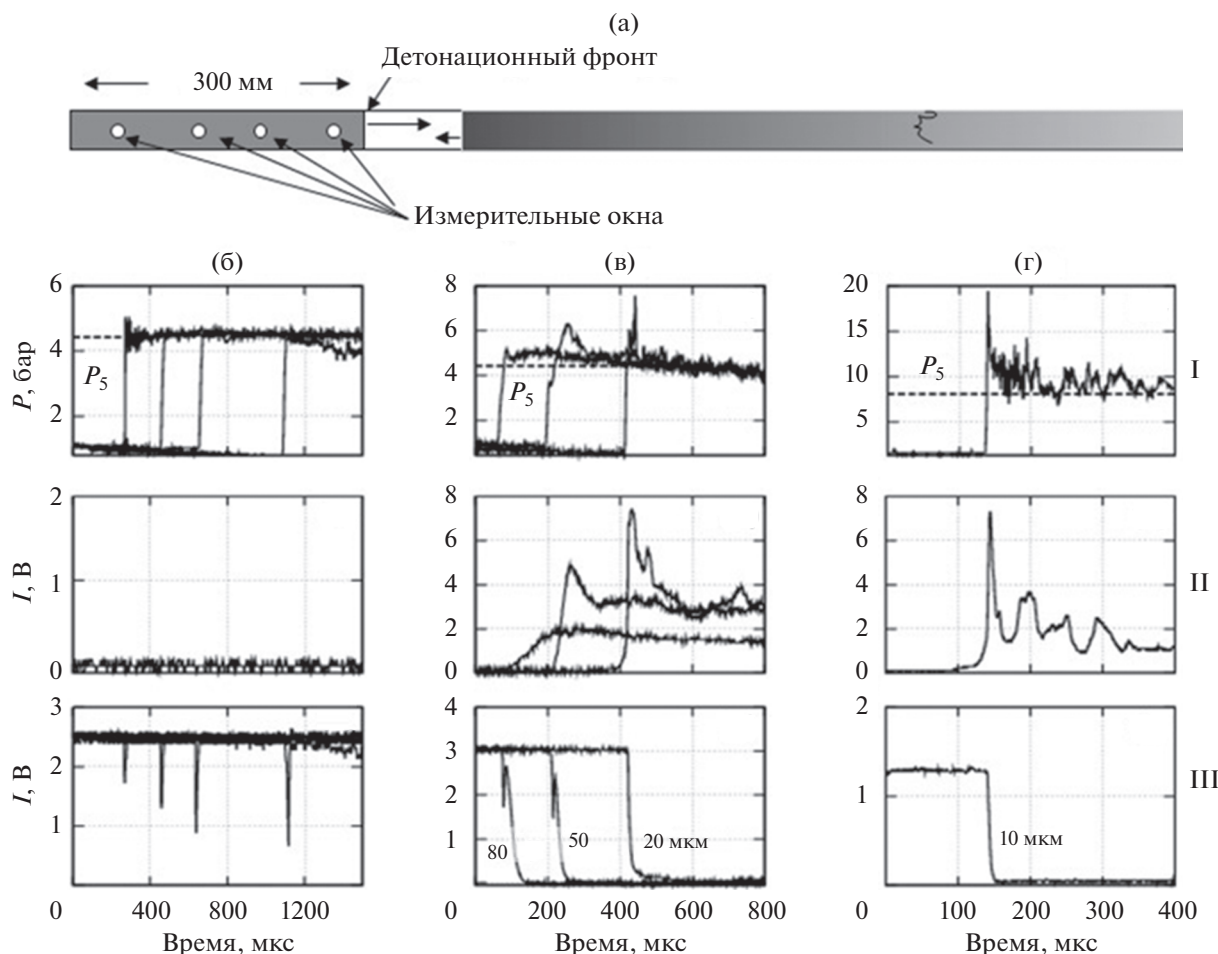


Рис. 16. Схема ударной трубы и измерительных окон (а), а также временные профили давления – I, излучения при 633 нм – II и ослабления лазерного излучения (экстинкции) – III, измеренные за ударными волнами в смесях $C_3O_2 + Ar$ на различных расстояниях (70, 140 и 295 мм) от торца ударной трубы [60]; смеси и “замороженные” температуры T_5 за волной возле торца: (б) – 10% $C_3O_2 + Ar$, $T_5 = 1390$ К; (в) – 10% $C_3O_2 + Ar$, 1620; (г) – 20% $C_3O_2 + Ar$, 1440; цифры на графиках – характерное время нарастания экстинкции.

шая образование конденсированных частиц, регистрировались через различные наблюдательные окна. На рис. 16 показаны несколько примеров экспериментальных сигналов. На рис. 16б приведены распространение ударной волны в смеси 10% $C_3O_2 + 90\% Ar$, когда “замороженная” температура за волной составляет $T_5 = 1390$ К, а измеренная скорость волны составляла $V_5 = 920$ м/с. При этой относительно низкой температуре химические превращения C_3O_2 во время измерений незначительны [44, 45], и ударная волна распространяется с постоянной скоростью и давлением, при этом излучение и экстинкция отсутствуют, за исключением резкого ширен-сигнала в момент прохождения фронта ударной волны.

На рис. 16в представлены экспериментальные графики, наблюдаемые в той же смеси 10% $C_3O_2 + 90\% Ar$, когда скорость отраженной ударной волны была $V_5 = 1040$ м/с, а “замороженная” темпе-

ратура $T_5 = 1620$ К. При этой температуре процесс распада C_3O_2 и образования углеродных частиц протекает достаточно эффективно, и можно видеть, что сразу после достижения расчетных значений давления за фронтом ударной волны $P_5 = 4.5$ бар (пунктирная линия) наблюдается дополнительный рост давления, которое достигает ~6 бар. Дальнейшее распространение ударной волны характеризуется заметным увеличением ее скорости до $V_{exp} = 1290$ м/с и появлением резкого пика давления сразу за фронтом. Эти процессы сопровождаются нарастанием пиков излучения, свидетельствующих о существенном повышении температуры в узкой зоне за фронтом волны. Нижний ряд записей демонстрирует рост экстинкции, отражая образование конденсированных частиц. Очевидно, что процесс конденсации также ускоряется с распространением ударной волны.

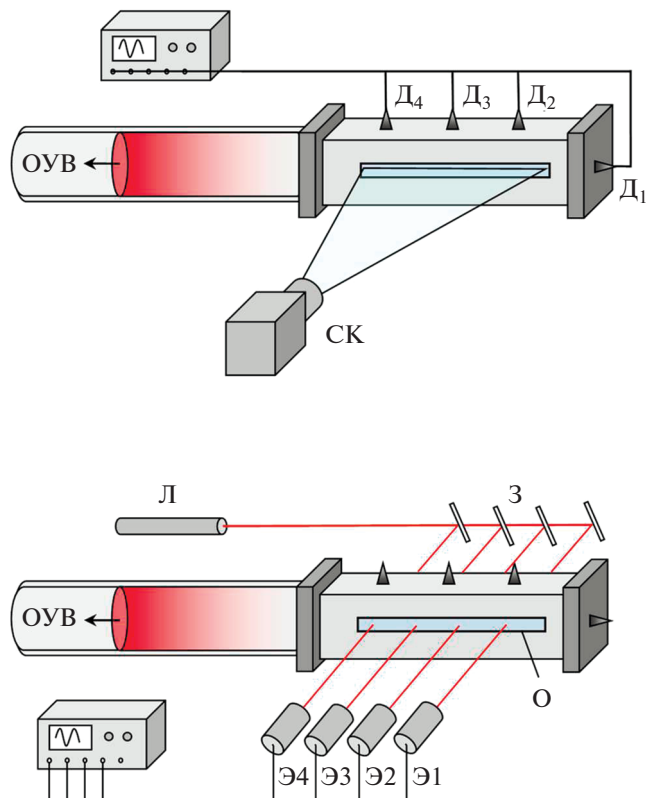


Рис. 17. Схема дополнительной секции ударной трубы (а) и многоканальной диагностики (б) формирования детонации за отраженной ударной волной (ОУВ) с помощью датчиков давления (Д1–Д4), временных разверток излучения с использованием прямоугольных сапфировых окон (О) и ICCD-камеры (СК), а также измерений лазерной экстинкции и собственного излучения потока с помощью непрерывного гелий-неонового лазера (Л), системы зеркал (З) и ФЭУ (Э1–Э4) [60].

В смесях, содержащих 20% C_3O_2 (рис. 16г), наблюдалось значительно более быстрое и интенсивное ускорение ударной волны от $V_5 = 1090$ м/с

до $V_{exp} = 1490$ м/с, сопровождающееся образованием резких пиков давления и излучения, а также скачкообразной конденсации. Нужно отметить, что профили давления и излучения, показанные на рис. 16г, довольно типичны для газовых детонационных волн [62–64].

Для последующих серий экспериментов, направленных на непрерывную регистрацию процесса распространения ударной волны, труба была оборудована специальной дополнительной секцией с двумя прямоугольными окнами из сапфира размером 160×5 мм², край которых располагался на расстоянии 25 мм от торца трубы. Через эти окна были зарегистрированы время-разрешенные изображения излучения за ударной волной в диапазоне 300–800 нм с использованием ICCD камеры (StreakStar II, LaVision GmbH). Помимо этого, через те же самые окна на различных расстояниях от торца трубы регистрировалась экстинкция лазерного излучения при $\lambda = 633$ нм, отражающая формирование конденсированных частиц. На рис. 17 представлена схема экспериментальной установки и основных методов диагностики.

На рис. 18 показана временная развертка интенсивности излучения за ударными волнами в смесях, первоначально содержавших 10, 20 и 30% C_3O_2 в аргоне. “Замороженные” температуры за фронтом отраженной ударной волны во всех случаях настолько низки, что излучение смеси перед процессами тепловыделения не могло быть зарегистрировано. В первом случае, в 10%-ной смеси наблюдается наиболее яркая картина постепенного развития детонационно-подобной структуры – хорошо видно, как волна конденсации, сопровождающаяся излучением, достигает фронт ударной волны в районе середины окна и ускоряет ударную волну от $V_5 = 1050$ до 1300 м/с. В смеси, содержащей 20% C_3O_2 , несмотря на меньшую “замороженную” температуру, волна конден-

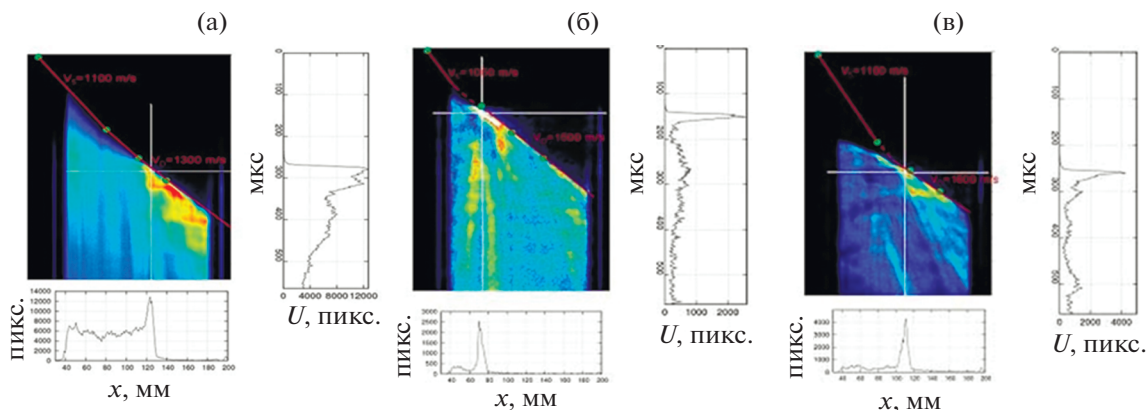


Рис. 18. Временные развертки интенсивности излучения и сечения в максимальных его значениях за фронтом ударной волны в смесях, изначально содержащих: (а) 10% C_3O_2 в Ar ($T_5 = 1650$ К, $V_5 = 1100$ м/с); (б) 20% (1530, 1050); (в) 30% (1490, 1100); начальное давление за фронтом отраженной ударной волны во всех экспериментах составляло 6 ± 1 атм [49].

сации настаивает фронт ударной волны намного раньше, сразу вслед за этим на фронте формируется яркий пик излучения, и затем наблюдается устойчивая скорость ударной волны ~1500 м/с (при начальном значении $V_5 = 1050$ м/с).

В смеси 30% C_3O_2 наблюдается наиболее удивительное поведение ударной волны – сначала она ускоряется до 1600 м/с (от $V_5 = 1100$ м/с) и затем замедляется до 1300 м/с. Причина такого немоного поведения детонационной волны конденсации при увеличении интенсивности инициирующей ударной волны заключается в принципиальном отличии кинетики конденсации от кинетики процессов горения. С ростом температуры и ее приближением к температурам фазового перехода (сублимации) формирующихся наночастиц эффективная скорость их конденсации неизбежно уменьшается и при определенных температурах становится ниже скорости их распада (дезинтеграции) [45, 65].

Эффективность вклада энергии конденсации в динамику инициирующей ударной волны сильно зависит от реального времени роста частиц до их окончательного размера. Качественно это время можно оценить по профилям экстинкции, показанным на рис. 16в (график III), 16г (график II). Видно, что с усилением ударной волны (и ростом температуры) это время уменьшается от 80 до 10 мкс. Важно еще раз подчеркнуть, что причина кажущегося ускорения конденсации с повышением температуры заключается в том, что лимитирующей стадией, определяющей скорость всего процесса, является реакция разложения недокси углерода $C_3O_2 \rightarrow CO + C_2O$, которая имеет константу скорости $k_d = 2 \times 10^{15} \exp(-10720/T)$ см³ моль⁻¹ с⁻¹ [43], все остальные реакции протекают быстрее. В экспериментах [55] было показано, что до температур $T = 2200$ К эффективная константа скорости роста частиц практически совпадает с k_d . Однако такое течение процесса реализуется до тех пор, пока вследствие повышения температуры не вступят в действие обратные реакции распада кластеров и наночастиц. В работах [45, 46] показано, что при увеличении температуры за ударной волной до 2800–3000 К скорость образования частиц замедляется. При $T = 3000$ К общее время роста частиц составляет более 100 мкс, а при $T = 3400$ К скорость распада (испарения) частиц оказывается уже выше скорости их образования [46]. Следовательно, очевидно, что в отличие от классической детонации, поддерживаемой процессами горения, данное явление должно иметь экстремум по температуре, зависящий от интегрального тепловыделения, и при чрезмерном перегреве процесс должен стать самораспадающимся.

Эти рассуждения наглядно иллюстрируются на рис. 19 сравнением наблюдаемых параметров ударной волны с поведением адиабат Гюгонии [63, 66]

для исходных смесей (кривые I) и для смесей после конденсации (кривые II). Прямые линии 2–5 соответствуют расчетной скорости отраженной ударной волны. Точки б и лучи 2–б представляют экспериментально измеренные максимумы давления и скорость фронта ускоренной волны. Точки P_{exp} показывают установленные значения давления, а точки С–J демонстрируют параметры детонации Чепмена–Жуге, рассчитанные в одном приближении [66].

Можно видеть, что в смеси 10% $C_3O_2 + Ar$ (рис. 19а) луч 2–б пересекает адиабату II при заметно более низких давлениях, чем P_{exp} , и измеренная скорость волны несколько выше скорости Чепмена–Жуге (касательной к кривой II) из точки 2. Такое поведение волны может быть вызвано недостаточным тепловыделением, что приводит к продолжению поддержки распространения волны давлением газа, сжатого у торца трубы, за ее фронтом. Такой режим течения обычно называют “перешагнутой детонацией”.

В смеси 20% $C_3O_2 + Ar$ (рис. 19б) наблюдается очень хорошее совпадение измеренных и расчетных значений давления и скорости волны. В этих условиях расчетная температура за фронтом детонации составляет 2460 К, что, согласно [46, 51–53], соответствует почти максимальной скорости конденсации. Этот факт наглядно демонстрирует профиль экстинкции на рис. 16г (график II).

В более богатой смеси 30% $C_3O_2 + Ar$ (рис. 4в) измеренные значения давления и скорости волны лежат ниже расчетных параметров детонации. Этот факт может быть объяснен избыточным тепловыделением, приводящим к неполной конденсации при повышении температуры выше 2800 К. При этих температурах начинают играть роль процессы распада частиц, замедляющие эффективную скорость конденсации. Вследствие этого энергия конденсации не может быть полностью передана в динамику волны, и наблюдается так называемый режим затухающей, “недожаренной” детонации.

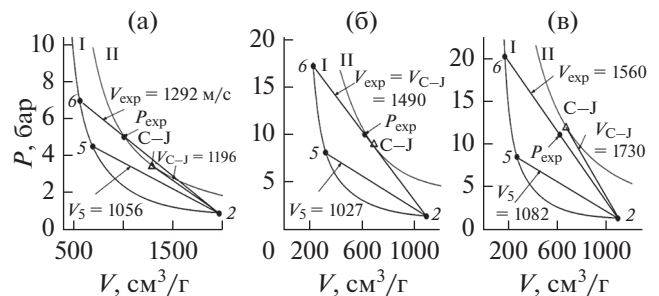


Рис. 19. Поведение адиабат Гюгонии для исходных смесей (кривые I) и для смесей после конденсации (кривые II): (а) – 10% $C_3O_2 + Ar$, $T_{C-J} = 2050$ К; (б) – 20% $C_3O_2 + Ar$, 2460; (в) – 30% $C_3O_2 + Ar$, 2830 [59].

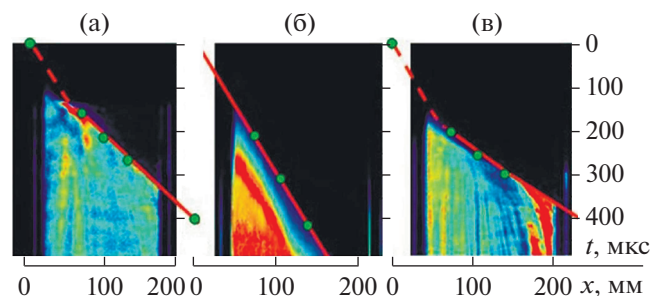


Рис. 20. Сравнение разверток интенсивности излучения за фронтом ударной волны в смесях, изначально содержащих 20% C_3O_2 (а) и 20% C_2H_2 (б), (в) в Ag при различных давлениях: (а) — $P = 7.5$ атм, (б) — 6 атм; (в) — 30 атм; красная линия — траектория фронта ударной волны, определенная по датчикам давления (зеленые точки) [73].

Таким образом, исследования, проведенные в смесях, содержащих диоксид углерода, достаточно убедительно показали, что существуют условия, при которых исключительно энергия конденсации углеродных наночастиц формирует и поддерживает детонационную волну. При этом параметры детонационной волны конденсации вполне хорошо описывались в рамках классической одномерной теории детонации Зельдовича–Неймана–Дёринга.

5.3. Детонационная волна конденсации в ацетилене. Из результатов исследований, проведенных в диоксиде углерода, следовал вывод, что процесс выделения тепла при конденсации углерода должен играть определенную роль при детонации большинства углеводородных топлив, которая сопровождается образованием углеродных наночастиц. При этом наиболее ярким примером углеводорода, способного детонировать без окислителя, т.е. с формированием конденсированного углерода, является ацетилен. Действительно, ацетилен представляет собой уникальное экзотермичное углеводородное соединение. Как отмечалось выше, при пиролизе ацетилена образуется графитизированная сажа и молекулярный водород и выделяется 227 кДж/моль энергии (5), что существенно превышает тепловыделение при распаде C_3O_2 (4) и близко к тепловыделению при окислении водорода (242 кДж/моль).

Вследствие существенного тепловыделения саморазложение ацетилена может происходить как в режиме дефлаграции со скоростями от 10 до 50 см/с, так и в режиме детонации со скоростями до 2000 м/с [67]. Детонация ацетилена наблюдалась и изучалась в большом количестве работ (см., например, [68–72]). Параметры Чепмена–Жуге — скорость и температура за детонационной волной в ацетилене хорошо известны [67]. Из предшествующих исследований было известно также, что детонационная волна формируется только при достаточно высоких давлениях (как правило, упо-

минаются значения более 10 бар [67]). Однако детальный анализ вклада энергии конденсации в формирование детонационной волны в ацетилене до авторских работ не проводился. Поэтому, используя данные о теплоте конденсации углеродных наночастиц и образовании детонационной волны, изученной в диоксиде углерода, В.Е. Фортов предложил провести аналогичное исследование формирования детонационной волны конденсации в ацетилене.

На рис. 20 представлены регистрограммы излучения, записанные ICCD-камерой в ацетилене при различных начальных давлениях [73]. (На рис. 20а для сравнения показана регистрограмма, записанная в сходном режиме в C_3O_2 .) Полученные данные показали, что в экспериментах, проведенных в условиях, сходных с изученными в смесях с диоксидом углерода, несмотря на большее тепловыделение, детонационная волна в ацетиленосодержащих смесях не формируется. Хорошо видно, что в ацетилене при начальном давлении 6 атм и температуре 1582 К (рис. 20б) волна конденсации, которая ясно видна по интенсивному нагреву смеси, отделена от фронта ударной волны довольно широкой зоной (около 50 мм), в пределах области наблюдения практически не меняющейся со временем. Иными словами, в этих условиях волна конденсации не оказывает заметного влияния на инициирующую ударную волну, которая продолжает двигаться с постоянной скоростью. Попытки увеличить интенсивность ударной волны и поднять начальную температуру за ударной волной вплоть до 2900 К не привели к сколь угодно заметному изменению в поведении ударной волны. Однако при увеличении давления в той же смеси до 30 атм даже при гораздо более низкой температуре 1312 К за инициирующей ударной волной (рис. 20в) картина принципиально меняется — волна конденсации быстро догоняет ударную волну, ускоряет ее и образует детонационно-подобную структуру с пиками излучения и давления на фронте, весьма аналогичную наблюдаемой в C_3O_2 при давлении 7.5 атм (рис. 20а).

Для проверки соответствия наблюдаемых режимов течения параметрам детонационных волн в исследуемых смесях были проведены оценки на основании одномерной теории детонации Зельдовича–Неймана–Дёринга [63, 66], аналогично тому, как это было сделано выше для детонационных волн конденсации в диоксиде углерода. На рис. 21 приведены сравнения наблюдаемых параметров — скорости волны и давления за ней — с поведением адиабат Гюгонио для начальных смесей (кривые I) и для смесей после конденсации (кривые II). Прямые линии 2–5 соответствуют расчетной скорости отраженной ударной волны. Точки б и лучи 2–6 представляют экспериментально измеренные максимумы давления в пике и скорость

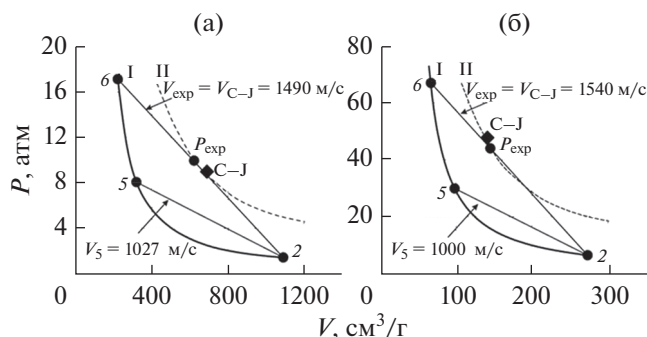


Рис. 21. Адиабаты Гюгоньо и наблюдаемые режимы детонации [73]: I – адиабаты для начальных смесей, II – кривые для смесей после конденсации; (а) – 20% $C_3O_2 + Ar$, $T_{C-J} = 2460$ К; (б) – 20% $C_2H_2 + Ar$, 2517; 2 – начальные состояния смесей перед ударной волной, 5 – замороженные параметры за ударной волной, 6 – пиковые значения давления за ускоренной волной, P_{exp} – установившиеся давления за детонационной волной; точки C–J – параметры Чепмена–Жуге.

фронта волны после ее ускорения. Точки P_{exp} показывают установившиеся величины давления, составляющие 9.7 атм в C_3O_2 и 45 атм в C_2H_2 , а точки C–J-параметры детонации Чепмена–Жуге, вычисленные в одномерном приближении [66]. Хорошо видно, что в обеих смесях измеренные скорости детонации в пределах точности измерений совпадают с расчетными скоростями Чепмена–Жуге, расчетные давления, составляющие 8.9 атм в C_3O_2 и 48 атм в C_2H_2 , отличаются от измеренных значений менее чем на 10%. Полученные результаты свидетельствуют, что предельные давления возникновения детонации в ацетилене оказываются существенно выше, чем в C_3O_2 , несмотря на больший тепловой эффект реакции (1), чем реакции (2). При этом наиболее вероятной причиной отличия процессов формирования детонационной волны в C_2H_2 и C_3O_2 является разница в скоростях тепловыделения, определяемых особенностями кинетики конденсации углерода при пиролизе этих двух веществ.

Действительно, в работе [73] показано, что если при диссоциации C_3O_2 атомы и кластеры углерода являются уже первичными продуктами распада [37], которые тут же начинают конденсироваться в наночастицы, то продуктами распада C_2H_2 являются углеводородные радикалы, которые начинают полимеризоваться, но отнюдь не образуют углеродных частиц [74]. Эта стадия процесса не сопровождается заметным тепловыделением, однако пространственно разделяет фронт ударной волны и зону конденсации, ослабляя влияние горячих слоев смеси на параметры ударной волны. В силу незначительных энергий активации реакций полимеризации скорости этих процессов не

очень сильно зависят от температуры, зато существенно ускоряются с ростом давления. В результате этого при начальном давлении за ударной волной, равном 6 атм, в области наблюдения существует нестационарная двухволновая конфигурация из ударной волны и следующей за ней волны конденсации (см. рис. 20б). Увеличение давления до 30 атм и, соответственно, концентрации реагирующих частиц приводит к сужению зоны полимеризации и увеличению скорости ее прогрева со стороны зоны тепловыделения. Последующий рост температуры вызывает резкое уменьшение времени индукции, по-видимому обусловленное включением дополнительных механизмов полимеризации, имеющих высокие энергии активации. Коллапс зоны индукции и смыкание зоны тепловыделения с фронтом ударной волны в свою очередь приводит к быстрому формированию детонационной волны.

Таким образом, из проведенного анализа был сделан вывод [73], что главная причина затруднения процесса формирования детонационной волны в ацетилене заключается отнюдь не в различии в скоростях конденсации, а в длительном периоде индукции, не сопровождающемся заметным тепловыделением.

5.4. Общие закономерности детонационных волн конденсации. В последующей работе [75], опираясь на представленные результаты, был проведен анализ общих закономерностей формирования конденсированных частиц при пиролизе различных углеводородных соединений за ударными волнами, который позволил сформулировать достаточно простую и прозрачную физическую модель, описывающую кинетику химической конденсации. В основу данной модели были положены два принципиальных предположения. Во-первых, полагалось, что объемная фракция конденсированной фазы остается неизменной, начиная с температур, соответствующих полному высвобождению углерода из исходных углеродсодержащих молекул (1600–2000 К), и вплоть до температур испарения (сублимации) конденсированного углерода (которые составляют в зависимости от размера наночастиц 3000–3500 К). Вторым принципиальным предположением являлось то, что рост (увеличение размеров) частиц в процессах пиролиза за ударными волнами полностью определяется механизмами поверхностного роста, т.е. процессами рекомбинации малых газовых радикалов (атомов С, малых кластеров C_2-C_n и т.п., а также углеводородных радикалов C_nH_m , где $n \leq 6$) на поверхности растущих частиц. При этих предположениях, а также считая, что частицы растут по механизму поверхностной конденсации, скорость увеличения числа атомов в частице в кинетическом режиме определяется соотношением [76]

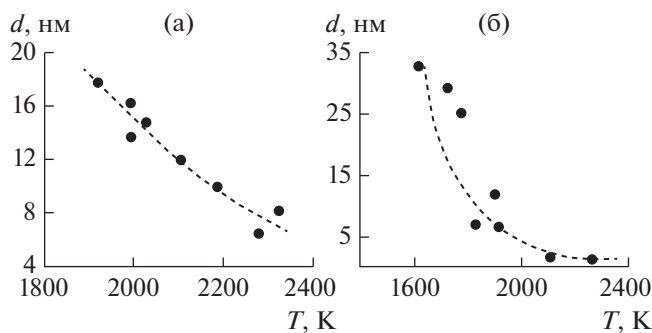


Рис. 22. Температурные зависимости размера частиц в C_2H_2 [77] (а) и C_3O_2 [78] (б): пунктир – расчеты [75] по (7): (а) – с энергией активации $E = 101$ кДж/моль из [79], (б) – $E = 211$ кДж/моль из [44].

$$\frac{dn}{dt} = N_R \sigma_p v_R = N_R n^{2/3} r_W^2 \sqrt{\frac{8\pi k T}{m_R}}$$

Здесь m_R – масса атомов или активных радикалов, участвующих в формировании частиц; r_W – радиус Вигнера–Зейтца. При этом, зная время роста частиц τ и пренебрегая убылью атомов за это время, можно приближенно определить конечное число атомов в частице или ее размер:

$$n_{fin} = \left(\frac{8\pi k T}{m_R} \right)^{3/2} \frac{N_R^3}{27} \tau^3$$

Считая далее, что время роста частиц может быть оценено из данных о константах скорости их роста, и учитывая, что для сферических частиц $d \sim n_{fin}^{1/3}$, можно найти температурную зависимость размера частиц

$$d(T) \sim \sqrt{T} \exp(E/kT), \quad (7)$$

где E – эффективная энергия активации процесса роста частиц, определяемая по экспериментальным данным.

На рис. 22 представлено сравнение экспериментальных данных о температурных зависимостях конечных размеров углеродных наночастиц в ацетилене и недоокиси углерода с расчетами по данной модели. Хорошо видно согласие расчетных и экспериментальных данных.

Таким образом, развитая модель позволила объяснить все наблюдаемые закономерности конденсации углеродных наночастиц при пиролизе различных углеродных молекул за ударными волнами, включая уменьшение конечных размеров частиц с повышением температуры и соответствующее уменьшение времени формирования частиц.

При этом важно отметить, что, несмотря на принципиальное отличие кинетики химической конденсации от традиционных кинетических механизмов воспламенения и детонации, т.е. отсут-

ствии разветвленных цепных реакций, термодинамика и газодинамика детонационной волны конденсации полностью подчиняется тем же самым законам и достаточно хорошо описывается в рамках одномерной теории Зельдовича–Неймана–Дёринга, а параметры установившейся детонационной волны неплохо совпадают с параметрами Чепмена–Жуге.

6. О ПРАКТИЧЕСКОМ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ КОНДЕНСАЦИИ

Важной особенностью детонационной волны конденсации, вызвавшей чрезвычайное внимание В.Е. Фортова, является то, что, в отличие от классического горения и детонации углеводородных топлив, основанных на реакциях окисления, этот процесс является полностью бескислородным и его продукты не содержат окислов углерода. Владимир Евгеньевич был убежден, что эти свойства детонационной волны конденсации открывают интересные перспективы практического использования данного процесса. Хорошо известно, что во всем мире очень активно ведутся разработки более экологически безвредных путей получения энергии, характеризующихся снижением выброса CO_2 . В этом плане разработка новых энергетических циклов, использующих энергию конденсации углерода, т.е. исключаящих процесс его окисления и образования углекислого газа, как был уверен В.Е. Фортов, представляет особый интерес. Значительное тепловыделение, характеризующее детонационную волну конденсации и отсутствие выбросов углекислого газа, создают очень благоприятные условия для организации принципиально нового экологически чистого и эффективного энергетического цикла. В качестве первого шага Фортов предложил использовать детонационную волну конденсации в ацетилене для разработки принципиально нового энергетического цикла, исключаящего образование окислов углерода. В.Е. Фортов был убежден, что способность ацетилена к бескислородному разложению с формированием детонационной волны и выделением при этом 227 кДж/моль может обеспечить высокий КПД экологически чистых энергетических установок, работающих с использованием энергии детонационной волны конденсации.

На основании этой идеи в работе [80] был предложен один из возможных типов стационарной установки, использующей процесс детонационного саморазложения ацетилена для получения тепловой и механической энергии без использования кислорода и, кроме того, способность вырабатывать водород и нанодисперсный технический углерод. Подобная энергетическая установка может быть особенно востребована в анаэробных условиях – под водой или в космосе. А добавление вто-

рого цикла со сжиганием образующегося водорода позволяет в наземных условиях экологически чисто получать большой выход энергии.

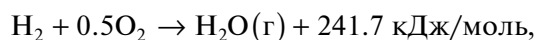
В недавней работе [81] по предложению В.Е. Фортова были проведены первые попытки использования энергии конденсации при саморазложении ацетилена для работы двигателя внутреннего сгорания (ДВС) и проточного реактора. Проведенные эксперименты продемонстрировали принципиальную возможность работы ДВС на неразбавленном ацетилене, однако при этом основной проблемой явилось образование сажи, отложения которой в поршневой группе двигателя приводили к его быстрой остановке. Далее было показано, что недостатки поршневой системы могут быть устранены при переходе на проточный реактор с непрерывной подачей топлива (ацетилена) и выводом продуктов реакции (потока водорода и сажи) из реактора. Прототип такого устройства был создан и испытан. Результаты экспериментов в проточном реакторе с внешним подогревом до 1273 К показали, что степень разложения ацетилена при расходе 100 см³/м увеличивается с ростом давления и достигает 68% при 2 атм. Таким образом, оба испытанных устройства обобновили перспективы разработки и создания новых типов экологически чистых энергетических установок, которые в непрерывном режиме могли бы осуществлять работу, используя ацетилен как основной вид топлива.

В качестве следующего, более принципиального шага в этом направлении В.Е. Фортов предложил разработку экологически чистого энергетического цикла на природном топливе. Действительно, ацетилен не является природным топливом и для его получения необходимо затратить существенное количество энергии. Скажем для бескислородной конверсии основного природного топлива – метана в ацетилен и водород:



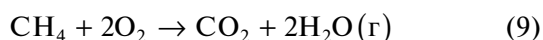
необходимо примерно 376 кДж/моль.

Поскольку в процессе (8) образуется 3 моля водорода, который тоже является прекрасным экологически чистым топливом, можно учесть теплоту его сгорания:



т.е. $241.7 \times 3 \approx 725$ кДж/моль и в итоге можно получить $227 + 725 - 376 = 576$ кДж/моль энергии с двух молей метана, полностью исключив образование углекислого газа.

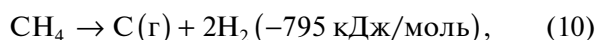
Для сравнения напомним, что при прямом сжигании метана



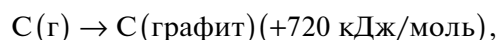
выделяется 802 кДж/моль, т.е. при сжигании двух молей метана выделится 1604 кДж/моль. Таким

образом, “энергетическая цена” получаемой при таком цикле (метан → ацетилен + водород → сажа + вода) экологически чистой энергии будет более чем в 3 раза выше, чем цена энергии, получаемой при горении метана.

С другой стороны, если целью рассматриваемого энергетического цикла является не разработка анаэробной энергетической установки, работающей на ацетилене (как это предложено в [80]), то отпадает необходимость в весьма энергозатратном процессе прямого получения ацетилена из метана (8). Естественно, что для наиболее эффективного использования энергии конденсации углерода самым разумным являлась бы разработка цикла, состоящего из прямого пиролиза метана с образованием водорода и углеродного пара:



с последующей конденсацией углерода в графитизированную сажу:



и после отделения сажи – сгорания водорода $2 \times 241.7 \approx 483$ кДж/моль, что в сумме, как нетрудно видеть, дает 408 кДж/моль экологически чистой энергии, т.е. всего вдвое меньше, чем процесс прямого сжигания метана (9).

Разумеется, техническая реализация такого энергетического цикла представляет серьезную инженерную проблему, поэтому В.Е. Фортовым совместно с автором данного обзора был предложен вариант простейшей принципиальной схемы установки для получения энергии из метана без образования углекислого газа. Для того чтобы провести пиролиз метана до атомарного углерода и водорода, нужна температура не менее 2500 К. Примерно такая температура достигается при горении водорода в воздухе. Поэтому наиболее естественно использовать круговой цикл с сжиганием образовавшегося водорода для пиролиза метана. На рис. 23 приведена принципиальная схема такой энергетической установки.

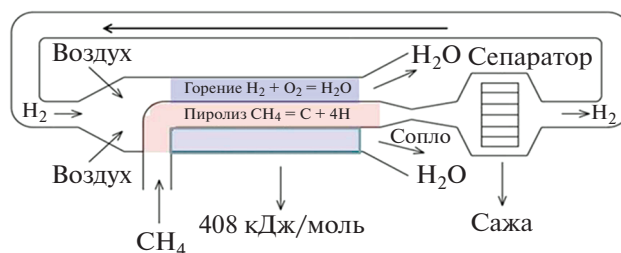


Рис. 23. Принципиальная схема экологически чистого энергетического цикла с получением энергии из метана без выброса углекислого газа.

В пиролизической камере поток входящего метана нагревается внешним водородо-воздушным пламенем. Затем продукты пиролиза проходят через сверхзвуковое сопло, где охлаждаются с образованием сажи и молекулярного водорода. Сажа отделяется в сепараторе, а водород поступает во внешнюю камеру сгорания, где смешивается с воздухом и поджигается. В результате без учета потерь и неполноты пиролиза из 1 г-моль метана получается 408 кДж тепловой энергии и 14 г сажи.

Конечно, на практике осуществить такой процесс с высоким КПД довольно трудно. По-видимому, наибольшие проблемы могут возникнуть с организацией 100% сильно эндотермичного процесса пиролиза метана (CH_4) с полной диссоциацией всех радикалов CH_x до чистого углеродного пара. Температура горения водородо-воздушной смеси составляет около 2500 К, что только теоретически достаточно для полного пиролиза метана. По самым приближенным оценкам, даже после пребывания метана в течение нескольких секунд при температуре 2500 К в смеси может оставаться до 10% радикалов CH_x . Более того, технически малореально равномерно нагреть поток метана во внутренней камере до той же температуры, что достигается во внешней камере сгорания водорода. Поэтому для окончательной проработки реальной конструкции установки нужны более точные инженерные расчеты кинетических, термодинамических, теплообменных и газодинамических процессов в данном устройстве.

Экономическая целесообразность такого цикла будет определяться, с одной стороны, снижением получаемой энергии с одного моля метана с учетом реального КПД по сравнению с обычным сгоранием метана, а с другой стороны, ценой вырабатываемого углеродного наноматериала и отсутствием штрафов за выбросы углекислого газа в атмосферу.

Инженерные разработки основ такой энергетической установки, начатые под руководством В.Е. Фортова в ОИВТ РАН в 2020 г., активно продолжаются.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Детонация – чрезвычайно сложное физико-химическое явление, основанное на сочетании кинетических, термодинамических и газодинамических процессов. Многие аспекты детонации продолжают привлекать пристальное внимание как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. В.Е. Фортов в течение всей своей научной деятельности хорошо понимал необходимость таких исследований и сформулировал целый ряд интересных идей, послуживших основой для поиска новых механизмов инициирования детонации. Одним из важнейших результатов этих исследований, выполненных под непосредствен-

ным руководством В.Е. Фортова, явилось открытие и всестороннее изучение нового физического явления – детонационной волны конденсации. Важной перспективой для практического использования этого явления, по мнению академика Фортова, может быть разработка нового экологически чистого энергетического цикла, использующего энергию конденсации углерода и, таким образом, исключающего образование окислов углерода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дианов Е.М., Фортов В.Е., Буфетов И.А., Ефремов В.П., Фролов А.А., Шелев М.Я., Лозовой В.И. Детонационно-подобный режим разрушения волоконных световодов под действием интенсивного лазерного излучения // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 86. № 2. С. 84.
2. Фортов В.Е. О детонационном режиме распространения нормальной фазы в сверхпроводящих материалах // Докл. АН СССР. 1991. Т. 318. № 5. С. 1162.
3. Зельдович Я.Б., Генич А.П., Манелис Г.Б. Особенности поступательной релаксации во фронте ударной волны в газовых смесях // Докл. АН СССР. 1979. Т. 248. № 2. С. 349.
4. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с.
5. Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 2. С. 144.
6. Kulikov S.V. Possibility of Acceleration of the Threshold Processes for Multi-component Gas in the Front of a Shock Wave // Shock Waves. 1997. V. 7. № 1. P. 25.
7. Куликов С.В., Берзигяров П.К. Статистическое моделирование поступательной неравновесности газовой смеси во фронте ударной волны на многопроцессорных компьютерах // Вычисл. методы и програм. 2002. Т. 3. № 2. С. 51.
8. Дракон А.В., Еремин А.В., Куликов С.В., Фортов В.Е. О природе неравновесных явлений во фронте ударной волны // ДАН. 2010. Т. 432. № 3. С. 326.
9. Емельянов А.В., Еремин А.В., Куликов С.В. О природе неравновесного излучения молекул йода во фронте ударной волны // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 5. С. 24.
10. Mott-Smith H.M. The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave // Phys. Rev. 1951. V. 82. P. 885.
11. Струминский В.В., Великодный В.Ю. Структура ударных волн // Докл. АН СССР. 1982. Т. 266. № 1. С. 28.
12. Башильков А.М., Великодный В.Ю. Структура ударных волн в газовой смеси // ЖТФ. 1991. Т. 61. № 8. С. 33.
13. Великодный В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В. Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны // ЖТФ. 1999. Т. 69. № 10. С. 23.
14. Диваков О.Г., Еремин А.В., Зиборов В.С., Фортов В.Е. Неравновесное воспламенение кислородо-водородных смесей во фронте слабой ударной волны // Доклады РАН. 2000. Т. 373. № 4. С. 487.

15. *Starostin A.N., Mironov A.B., Aleksandrov N.L., Fisch N.J., Kulsrud R.M.* Quantum Corrections to the Distribution Function of Particles over Momentum in Dense Media // *Physica. A.* 2002. V. 305. P. 287.
16. *Старостин А.Н.* Квантовые поправки к функции распределения частиц и скорости реакций в плотных средах // *Физика плазмы.* 2005. Т. 31. № 2. С. 146.
17. *Елецкий А.В., Старостин А.Н., Таран М.Д.* Квантовые поправки к равновесным константам скорости неупругих процессов // *УФН.* 2005. Т. 175. № 3. С. 299.
18. *Drakon A.V., Emelianov A.V., Eremin A.V., Gurentsov E.V., Petrushevich Yu.V., Starostin A.N., Taran M.D., Fortov V.E.* Quantum Phenomena in Ignition and Detonation at Elevated Density // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 109. P. 183201-1.
19. *Дракон А.В., Емельянов А.В., Еремин А.В., Петрушевич Ю.В., Старостин А.Н., Таран М.Д., Фортвов В.Е.* Влияние квантовых эффектов на инициирование воспламенения и детонации // *ЖЭТФ.* 2014. Т. 145. № 5. С. 943.
20. *Pang G.A., Davidson D.F., Hanson R.K.* Experimental Study and Modeling of Shock Tube Ignition Delay Times for Hydrogen–Oxygen–Argon Mixtures at Low Temperatures // *Proc. Combust. Inst.* 2009. V. 32. P. 181.
21. <http://www.me.berkeley.edu/grimech/version30/text30.html>
22. *Hong Z., Davidson D.F., Hanson R.K.* An Improved H_2/O_2 Mechanism Based on Recent Shock Tube/Laser Absorption Measurements // *Combust. Flame.* 2011. V. 158. P. 633.
23. *Troe J.* Fast Reactions in Energetic Systems / Eds. Cappellos R., Walker D. *Rheidel Publ. Comp.*, 1981. P. 125.
24. *Еремин А.В., Заслонко И.С., Шумова В.В.* Трансформация заселенностей высоковозбужденных состояний малых многоатомных молекул в высокотемпературных реакциях диссоциации-рекомбинации // *Кинетика и катализ.* 1996. Т. 37. № 4. С. 485.
25. *Никитин Е.Е.* Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М.: Химия, 1970. 455 с.
26. *Bernshtein V., Oref I.* Effect of Supercollisions on Chemical Reactions in the Gas Phase // *J. Phys. Chem.* 1993. V. 97. P. 49.
27. *Clary D.C., Gilbert R.G., Bernshtein V., Oref I.* Mechanisms for Supercollisions // *Faraday Discussions.* 1995. V. 102. P. 423.
28. *Lenzer Th., Luther K., Troe J., Gilbert R.G., Lim K.F.* Trajectory Simulations of Collisional Energy Transfer in Highly Excited Benzene and Hexafluorobenzene // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 103. P. 606.
29. *Troe J.* Adiabatic and Non-Adiabatic Dynamics in Unimolecular Reactions. In: *Mode Selective Chemistry* / Eds. Jortner J., Levine R.D., Pullman B. Dordrecht: Kluver, 1991. P. 241.
30. *Bernshtein V., Oref I., Lendvay G.* Energy Transfer Rate Coefficients from Trajectory Calculations and Contributions of Supercollisions to Reactive Rate Coefficients // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. № 23. P. 9738.
31. *Mullin A.S., Michaels C.A., Flynn G.W.* Molecular Supercollisions: Evidence for Large Energy Transfer in the Collisional Relaxation of Highly Vibrationally Excited Pyrazine by CO_2 // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 102. № 15. P. 6032.
32. *Miller J.A., Pilling M.J., Troe J.* Unravelling Combustion Mechanisms Through a Quantitative Understanding of Elementary Reactions // *Proc. Combust. Inst.* 2005. V. 30. P. 43.
33. *Куликов С.В., Смирнов А.Л., Терновая О.Н.* Влияние поступательной неравновесности смеси O_2 и инертных газов на одноступенчатую диссоциацию во фронте ударной волны // *Хим. физика.* 2000. Т. 19. № 12. С. 53.
34. *Hanson R.K., Davidson D.F.* Recent Advances in Laser Absorption and Shock Tube Methods for Studies of Combustion Chemistry // *Progr. Energy Combust. Sci.* 2014. V. 44. P. 103.
35. *Дракон А.В., Емельянов А.В., Еремин А.В.* Неравновесные процессы во фронте ударной волны в инертных газах, содержащих малую примесь $Fe(CO)_5$ // *ЖТФ.* 2008. Т. 78. № 8. С. 64.
36. *Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.А.* Поступательная релаксация в ударных волнах в газах. Препринт. Черноголовка: ОИХФ АН СССР, 1991. 68 с.
37. *Вагнер Х.Г., Денне Й., Емельянов А.В., Еремин А.В., Заслонко И.С., Шумова В.В.* Сверхравновесное возбуждение радикалов C_2 при термическом распаде C_3O_2 // *ДАН. Химия.* 2001. Т. 379. № 1. С. 63.
38. *Еремин А.В., Зиборов В.С.* Сверхравновесное УФ и видимое излучение во фронте слабой ударной волны в инертном газе с малой добавкой $Mo(CO)_6$. В сб.: Тез. XX Междун. конф. "Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество". Эльбрус, Россия. 1–6 март. 2005. С. 97.
39. *Дракон А.В.* Неравновесное излучение и ионизация в газо-кластерных средах за ударными волнами. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: ОИВТ РАН, 2008. 106 с.
40. *Olschewski H.A., Troe J., Wagner H.Gg.* Studies of Unimolecular Reactions of Triatomic Molecules // *Symp. (Int.) Combust.* 1967. V. 11. P. 155.
41. *Woiki D., Roth P.* A Shock Tube Study of the Reaction $S + H_2 \rightleftharpoons SH + H$ in Pyrolysis and Photolysis Systems // *Int. J. Chem. Kinetics.* 1995. V. 27. P. 547.
42. *Fair R.W., Thrush B.A.* Mechanism of S_2 Chemiluminescence in the Reaction of Hydrogen Atoms with Hydrogen Sulphide // *Trans. Faraday Soc.* 1969. V. 65. P. 1208.
43. *Friedrichs G., Wagner H.Gg.* Investigation of the Thermal Decay of Carbon Suboxide // *Z. Phys. Chem.* 1998. V. 203. № 1. P. 1.
44. *Doerge K.J., Tanke D., Wagner H.Gg.* Particle Formation in Carbon Suboxide Pyrolysis Behind Shock Waves // *Z. Phys. Chem.* 1999. V. 212. P. 219.
45. *Deppe J., Emelianov A., Eremin A., Jander H., Wagner H.Gg., Zaslanko I.* Carbon Particle Formation and Decay in Two-step Pyrolysis of Carbon Suboxide Behind Shock Waves // *Proc. Combust. Inst.* 2000. V. 28. P. 2515.
46. *Deppe J., Emelianov A., Eremin A., Jander H., Wagner H.Gg., Zaslanko I.* High-temperature Carbon Particle Formation and Decay in Carbon Suboxide Pyrolysis Behind Shock Waves // *Z. Phys. Chem.* 2000. V. 214. P. 129.
47. *Deppe J., Emelianov A., Eremin A., Wagner H.Gg.* Formation of Carbon Nanoparticle in Carbon Suboxide Pyrolysis behind Shock Waves // *Z. Phys. Chem.* 2002. V. 216. P. 641.

48. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Гидродинамика. 3-е изд., испр. Т. VI. М.: Наука, 1986.
49. Емельянов А.В., Ерёмин А.В., Фортвов В.Е. Волна химической конденсации, инициирующая бескислородное горение и детонацию // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 4. С. 49.
50. Berthelot M., Le Chatelier H.L. Sur la vitesse de detonation da l'acetylene // Comptes Rendus. 1899. V. 129. P. 427.
51. Emelianov A.V., Eremin A.V., Jander H., Wagner H.Gg. To the Temperature Dependence of Carbon Particle Formation in Shock Wave Pyrolysis Processes // Z. Phys. Chem. 2003. V. 217. P. 893.
52. Emelianov A.V., Eremin A.V., Jander H., Makeich A.A., Roth P., Starke R., Wagner H.Gg. Time and Temperature Dependence of Carbon Particle Growth in Various Shock Wave Pyrolysis Processes // Proc. Combust. Inst. 2005. V. 30. P. 1433.
53. Вагнер Х.Г., Емельянов А.В., Еремин А.В., Яндер Х. Температурная зависимость скорости образования углеродных наночастиц при пиролизе за ударными волнами // Хим. физика. 2004. Т. 23. № 9. С. 62.
54. Emelianov A.V., Eremin A.V., Makeich A.A. et al. Heat Release of Carbon Particle Formation from Hydrogen-free Precursors Behind Shock Waves // Proc. Combust. Inst. 2007. V. 31. P. 649.
55. Дракон А.В., Емельянов А.В., Еремин А.В., Макеич А.А., Шульц К. Экспериментальное определение тепловых эффектов при распаде углеродсодержащих молекул и формировании углеродных наночастиц за ударной волной // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2007. www.chemphys.edu.ru/pdf/2007-09-17-001
56. Гейдон А., Герл И. Ударная труба в химической физике высоких температур. М.: Мир, 1966.
57. Lee S.C., Tien C.L. Optical Constants of Soot in Hydrocarbon Flames // Proc. Combust. Inst. 1981. V. 18. P. 1159.
58. Емельянов А.В., Еремин А.В., Макеич А.А., Фортвов В.Е. Формирование детонационной волны конденсации // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 87. Вып. 9. С. 556.
59. Emelianov A.V., Eremin A.V., Fortov V.E., Jander H., Makeich A.A., Wagner H.G. Detonation Wave Driven by Condensation of Supersaturated Carbon Vapor // Phys. Rev. E. Rapid Comb. 2009. V. 79. P. 035303-6.
60. Емельянов А.В., Еремин А.В., Фортвов В.Е. Формирование детонационной волны при химической конденсации углеродных наночастиц // ИФЖ. 2010. Т. 83. № 6. С. 1.
61. Emelianov A.V., Eremin A.V., Jander H., Wagner H.Gg. Carbon Condensation Wave in C_3O_2 and C_2H_2 Initiated by a Shock Wave // Proc. Combust. Inst. 2011. V. 33. P. 525.
62. Lee J.H.S. The Detonation Phenomenon. N.Y.: Cambridge Univ. Press, 2008.
63. Солоухин Р.И. Детонационные волны в газах // УФН. 1963. Т. LXXX. Вып. 4. С. 525.
64. Shepherd J.E. Detonation in Gases // Proc. Combust. Inst. 2009. V. 32. P. 83.
65. Власов П.А., Карасевич Ю.К., Смирнов В.Н. Кинетика термического разложения и окисления частиц сажи в ударных волнах // Кинетика и катализ. 2004. Т. 45. № 5. С. 668.
66. Зверев И.Н., Смирнов Н.Н. Газодинамика горения. М.: Изд-во МГУ, 1987. 307 с.
67. Иванов Б.А. Физика взрыва ацетилена. М.: Химия, 1969.
68. Penny E. The Velocity of Detonation of Compressed Acetylene // Disc. Faraday Soc. 1956. V. 22. P. 157.
69. Cummings G.A., Hall A.R., Straker R.A. Decomposition Flames of Acetylene and Metyl Acetylene // Int. Comb. Symp. 1962. № 8. P. 503.
70. Кнорре В.Г., Ляхов А.Г. Измерение температуры детонации ацетилена // ФГВ. 1978. № 2. С. 151.
71. Yoshizawa Y., Kawada H., Kurokawa M. A Shock Wave Study on the Process of Soot Formation from Acetylene Pyrolysis // Proc. Combust. Inst. 1979. V. 17. P. 1375.
72. Knorre V.G., Tanke D., Thienel Th., Wagner H.G. Soot Formation in the Pyrolysis of Benzene/Acetylene and Acetylene/Hydrogen Mixtures at High Carbon Concentrations // Proc. Combust. Inst. 1996. V. 26. P. 2303.
73. Емельянов А.В., Еремин А.В., Фортвов В.Е. Формирование детонационной волны при термическом разложении ацетилена // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 92. Вып. 2. С. 101.
74. Frenklach M., Taki S., Durgaprasad M.V., Matuda R.A. Soot Formation in Shock-tube Pyrolysis of Acetylene, Allene and 1,3-Butadiene // Combust. Flame. 1983. V. 54. № 1. P. 81.
75. Еремин А.В. Новая модель формирования углеродных наночастиц в процессах пиролиза за ударными волнами // ТВТ. 2013. Т. 51. № 5. С. 747.
76. Смирнов Б.М. Процессы с участием кластеров и малых частиц в буферном газе // УФН. 2011. Т. 181. № 7. С. 713.
77. Гуренцов Е.В., Еремин А.В. Измерение размеров углеродных и железных наночастиц методом лазерно-индуцированной инкандесценции // ТВТ. 2011. Т. 47. № 5. С. 687.
78. Starke R., Kock B., Roth P., Eremin A., Gurentsov E., Shumova V. et al. Shock Wave Induced Carbon Particle Formation from CCl_4 and C_3O_2 Observed by Laser Extinction and by Laser Induced Incandescence (LII) // Combust. Flame. 2003. V. 135. № 12. P. 77.
79. Tanke D. Russbildung in der Kohlenwasserstoffpyrolyse hinter Stosswelle. Diss. Deutschland: Göiitingen Universität, 1994. 69 p.
80. Голуб В.В., Гуренцов Е.В., Емельянов А.В., Еремин А.В., Фортвов В.Е. Энергия детонационного пиролиза ацетилена // ТВТ. 2015. Т. 53. № 3. С. 383.
81. Власкин М.С., Зайченко В.М., Белов П.В., Григоренко А.В., Курбатова А.И., Еремин А.В., Фортвов В.Е. Разложение ацетилена на водород и углерод: опыты с ДВС и эксперименты с проточным реактором // ТОХТ. 2021. Т. 55. № 2. С. 251.

УДК 533.951.8

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ РАЗРЫВЫ И УСТОЙЧИВОСТЬ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ

© 2021 г. О. А. Синкевич*

Национальный исследовательский университет “МЭИ”, Москва, Россия

*E-mail: oleg.sinkevich@if.mpei.ac.ru

Поступил в редакцию 06.09.2021 г.

После доработки 06.09.2021 г.

Принят к публикации 28.09.2021 г.

Обсуждаются эффекты, связанные с влиянием внешнего постоянного магнитного поля на слабые и сильные разрывы в газовых средах, обладающие конечной электропроводимостью. Проведен детальный анализ влияния внешнего магнитного поля на устойчивость плоской ионизирующей ударной волны. Показано, что могут существовать два независимых механизма, приводящих к неустойчивости. Один, связанный с особенностями адиабаты Гюгонио, может приводить к структурной неустойчивости. В этих случаях даже при малых значениях параметра взаимодействия область устойчивости расширяется за счет вхождения в нее области нейтральных колебаний. Для сильной ударной волны (число Маха $M_1 \gg 1$) область нейтральных колебаний ударной волне, существующая в среде без магнитного поля, с ростом магнитного поля сужается и вырождается в точку. Если параметр взаимодействия превышает критическое значение, то область устойчивости сужается. Второй тип неустойчивости, не связанный с особенностями адиабаты Гюгонио, вызывается возмущением силы Ампера и зависимостью электропроводности от температуры $\sigma_2(T_2)$. Это известная плазменная неустойчивость, может развиваться при больших значениях параметра взаимодействия в сильных ударных волнах и приводить к генерации вторичной ударной волны в нагретом газе. Демонстрируется влияние магнитного поля на структуру плоской ионизирующей ударной волны, включая среду с бесконечной электропроводностью, когда необходим учет собственного магнитного поля. Дан вывод граничного условия для электрического тока в задаче об устойчивости ударной волны в поперечном магнитном поле.

DOI: 10.31857/S004036442106017X

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	Структура ударной волны без магнитного поля
Слабые разрывы в магнитном поле	Структура ионизирующей ударной волны в магнитном поле
Сильные разрывы. Ударные волны	Вывод граничного условия для электрического тока в задаче об устойчивости ударной волны в поперечном магнитном поле
Изменение энтропии во фронте ударной волны	Заключение
Генерация ударных волн и слабые разрывы	Список литературы
Границы устойчивости ударных волн с магнитным полем и без него	
Границы устойчивости плоской ударной волны без магнитного поля	
Устойчивость плоской ионизирующей ударной волны в магнитном поле	
Поведение электрических и магнитных полей на поверхности разрыва	
Системы уравнений для малых возмущений. Дисперсионное и характеристическое уравнения	
Анализ корней характеристического уравнения	
О роли других неустойчивостей, связанных с протеканием электрического тока и развивающихся в плазме за фронтом ударной волны	
Задачи о структуре ударных волн	

ВВЕДЕНИЕ

В гидродинамике хорошо известно [1–8], что наряду с непрерывными решениями, основных уравнений сплошной среды, большую роль играют разрывные решения. В таких решениях давление, плотность и скорость движения или их производные, определяющие состояния среды, испытывают скачок на некоторой стационарной или движущейся поверхности. Существуют слабые и сильные разрывы. Часто первоначальный разрыв распадется на серию движущихся разрывов [1, 3, 5]. Ограничимся газовыми средами, обладающими конечной электропроводимостью.

стью и рассмотрим влияние внешнего, постоянного магнитного поля на изменение параметров сред в слабых и сильных разрывах, включая устойчивость плоского фронта ударной волны. Анализ устойчивости ударных волн во многом опирается на уравнение состояния плотных сред и поведение адиабаты Гюгонио, в изучение которых В.Е. Фортвов внес значительный вклад [4].

Напомним основные методы анализа соотношений между параметрами среды на разрывах и определения скорости перемещения разрывов. Интенсивность скачков величин в точке некоторой поверхности для функции f можно характеризовать величинами (ось направлена по внешней нормали к поверхности):

$$\begin{aligned} \{f\} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \left[(f)_{x_\Phi(t)+\varepsilon} - (f)_{x_\Phi(t)-\varepsilon} \right], \\ \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} \right\} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_\Phi(t)+\varepsilon} - \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_\Phi(t)-\varepsilon} \right], \\ \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{x_\Phi(t)+\varepsilon} - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{x_\Phi(t)-\varepsilon} \right]. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь x_Φ – координата поверхности разрыва; первые члены в обоих выражениях берутся за фронтом разрыва, но бесконечно близко к нему.

Напомним способ определения типа скачка:

$$\text{слабые } \{f\} = 0, \quad \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} \neq 0, \quad \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} \right\} \neq 0; \quad (2)$$

$$\text{сильные } \{f\} \neq 0, \quad \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} = 0, \quad \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} \right\} = 0. \quad (3)$$

Согласно (2) в слабых разрывах претерпевают только скачки производных параметров состояния. На рис. 1 показано изменение давления среды на поверхности слабого разрыва. Аналогичные разрывы может претерпевать плотность и скорость течения.

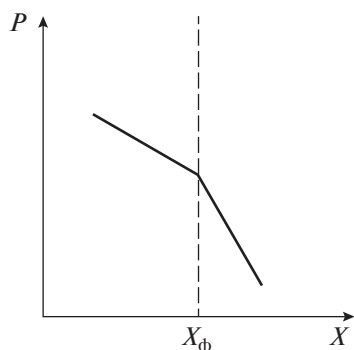


Рис. 1. Слабый разрыв.

СЛАБЫЕ РАЗРЫВЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Далее рассмотрим влияние внешнего, постоянного магнитного поля, на распространение разрывов, считая, что в декартовой системе координат движение происходит в направлении оси x , магнитное поле направлено по оси y или z . Влияние внешнего магнитного на характеристики разрывов связано с тем, что магнитное поле может приводить к генерации электрического тока. Наличие электрического тока может приводить к возникновению силы Ампера, и к джоулеву нагреву. Однако появление самого тока зависят от ориентации магнитного поля, вектор скорости потока и проводимости среды.

Действительно при движении проводящей среды в поперечном магнитном поле возникает электрический ток \mathbf{j}

$$\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{U} \times \mathbf{B}). \quad (4)$$

Здесь \mathbf{E} – напряженность электрического поля, \mathbf{B} – индукция магнитного поля, σ – электропроводность среды. Значение напряженности электрического поля зависит от способа замыкания электрического тока. Часто при движении разрыва в канале электрическое поле выражают через произведение $\mathbf{U} \times \mathbf{B}$

$$\mathbf{E} = -k\mathbf{U} \times \mathbf{B}$$

и электрический ток \mathbf{j} записывают в виде

$$\mathbf{j} = (1 - k)\sigma\mathbf{U} \times \mathbf{B}. \quad (5)$$

Здесь k ($0 \leq k \leq 1$) – носит название коэффициента нагрузки. Режим $k = 1$, $j = 0$ называется режимом холостого хода, $k = 0$ – режим короткого замыкания, в котором ток максимален.

В любом режиме согласно уравнениям Максвелла электрический ток удовлетворяет уравнению $\text{div} \mathbf{j} = 0$.

Следовательно, на слабом скачке имеет место соотношение

$$\{dj_x/dx\} = 0. \quad (6)$$

Рассмотрим слабый разрыв в магнитном поле, $\mathbf{B} = (B, 0, 0)$, когда оно коллинеарно скорости движения среды $\mathbf{U} = (U(x), 0, 0)$. В таком разрыве электрический ток отсутствует (сила Ампера и джоулев нагрев отсутствуют) и движение является изоэнтропийным. Скорость распространения такого слабого разрыва можно определить, рассмотрев сплошную среду, описание которой проводится в рамках уравнений Эйлера. Задача о распространении слабого разрыва решается известным образом [1], используя который выразим производную от давления через производную от плотности

$$\left\{ \frac{\partial P}{\partial x} \right\} = a_{s0}^2 \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial x} \right\}, \quad (7)$$

где $a_{s0} = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_s}$ – скорость звука.

Из системы уравнений неразрывности и движения для слабых разрывов плотности и скорости среды в проекции на ось x получаем следующие уравнения

$$\left\{\frac{\partial \rho}{\partial t}\right\} + U \left\{\frac{\partial \rho}{\partial x}\right\} + \rho \left\{\frac{\partial U}{\partial x}\right\} = 0, \quad (8)$$

$$\rho \left\{\frac{\partial U}{\partial t}\right\} + \rho U \left\{\frac{\partial U}{\partial x}\right\} + a_{s0}^2 \left\{\frac{\partial \rho}{\partial x}\right\} = 0. \quad (9)$$

Здесь $\mathbf{U} = (U(x), 0, 0)$ – скорость движения среды и учтено равенство (7).

Если сама функция f непрерывна, то ее приращение на границе разрыва имеет вид

$$0 = \{df\}^{\text{def}} = f(x_\Phi + 0) - f(x_\Phi - 0) = \left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\} dt + \left\{\frac{\partial f}{\partial x}\right\} dx_\Phi. \quad (10)$$

Используя (10) и выражая разрывы производных по времени через скачки производных по координатам, получаем

$$\left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\} = -\left\{\frac{\partial f}{\partial x}\right\} \frac{dx_\Phi}{dt}.$$

Здесь dx_Φ/dt – скорость распространения фронта в лабораторной системе координат.

Введем скорость, с которой фронт скачка движется относительно потока (скорость движения слабого разрыва относительно жидкости)

$$w = (dx_\Phi/dt) - U.$$

Тогда справедливо следующее равенство

$$\left\{\frac{\partial f}{\partial t}\right\} + U \left\{\frac{\partial f}{\partial x}\right\} = -w \left\{\frac{\partial f}{\partial x}\right\}.$$

Таким образом, систему уравнений (8), (9) для производных скачков плотности ρ и скорости U можно представить в виде

$$-w \left\{\frac{\partial \rho}{\partial x}\right\} + \rho \left\{\frac{\partial U}{\partial x}\right\} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{a_{s0}^2}{\rho} \left\{\frac{\partial \rho}{\partial x}\right\} - w \left\{\frac{\partial U}{\partial x}\right\} = 0. \quad (12)$$

Однородная система уравнений (11), (12) имеет нетривиальное решение, если выполняется условие

$$D = w^2 - a_{s0}^2 = 0 \quad \text{или} \quad w = \pm a_{s0}. \quad (13)$$

Таким образом, когда магнитное поле, $\mathbf{B} = (B, 0, 0)$ коллинеарно скорости движения среды $\mathbf{U} = (U(x), 0, 0)$ и электрический ток отсутствует, слабый разрыв плотности (давления) и скорости движется относительно газа со скоростью звука a_0 .

При отсутствии электрического тока могут существовать течения, в которых распространяется слабый скачек энтропии:

$$\left\{\frac{\partial S}{\partial t}\right\} + U \left\{\frac{\partial S}{\partial x}\right\} = 0, \quad \left\{\frac{\partial s}{\partial t}\right\} + U \left\{\frac{\partial s}{\partial x}\right\} = 0. \quad (14)$$

Как следует из (14), энтропийный разрыв распространяется со скоростью движения среды, что характерно и для волн малых возмущений [1].

Теперь рассмотрим слабый разрыв, который находится в постоянном магнитном поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, перпендикулярном скорости движения среды $\mathbf{U} = (U(x), 0, 0)$. Следовательно, при $k \neq 1$ в таком разрыве существует электрический ток, приводящий к возникновению силы Ампера $j_y B_0$ и джоулева нагрева j_y^2/σ (движение уже не является изоэнтропийным). Однако для слабых разрывов выполняются условия

$$\{j_y B_0\} = 0, \quad \{j_y^2/\sigma\} = 0, \quad \{a_{s0}^2\} = 0,$$

поэтому уравнения (6) принимают прежний вид

$$\begin{aligned} \left\{\frac{\partial \rho}{\partial t}\right\} + U \left\{\frac{\partial \rho}{\partial x}\right\} + \rho \left\{\frac{\partial U}{\partial x}\right\} &= 0, \\ \rho \left\{\frac{\partial U}{\partial t}\right\} + \rho U \left\{\frac{\partial U}{\partial x}\right\} + \left\{\frac{\partial P}{\partial x}\right\} &= 0, \\ \left\{\frac{\partial S}{\partial t}\right\} + U \left\{\frac{\partial S}{\partial x}\right\} &= 0. \end{aligned} \quad (15)$$

В поперечном магнитном поле снова можно воспользоваться соотношением (7) и свести задачу о скорости распространения слабого разрыва к предыдущей и заключить, что слабый разрыв плотности (давления) и скорости движется относительно газа со скоростью звука a_0 , а энтропийный разрыв распространяется со скоростью движения среды.

Известно [9–12], что для анализа ряда явлений удобно использовать инварианты Римана:

$$J_+ = U + \int \frac{a_{s0}}{\rho} d\rho \quad \text{и} \quad J_- = U - \int \frac{a_{s0}}{\rho} d\rho, \quad (16)$$

удовлетворяющие следующей системе уравнений

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + (U + a_{s0}) \frac{\partial}{\partial x}\right] J_+ &= 0, \\ \left[\frac{\partial}{\partial t} + (U - a_{s0}) \frac{\partial}{\partial x}\right] J_- &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Используя уравнения (17), можно показать появление разрывов – образование ударных волн. Существуют частные случаи решения системы уравнений (17), когда один из инвариантов Римана постоянен во всей области решения задач:

$$J_+ = \text{const}, \quad J_- = \text{var}, \quad \text{или} \quad J_- = \text{const}, \quad J_+ = \text{var}. \quad (18)$$

Для идеального газа, тогда уравнение адиабаты и адиабатическая скорость звука принимают вид

$$P = P_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma \text{ и } a_{s0} = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}},$$

где γ – показатель адиабаты. Тогда инварианты Римана принимают значения

$$J_+ = U + \frac{2}{\gamma - 1} a_{s0} \text{ и } J_- = U - \frac{2}{\gamma - 1} a_{s0}.$$

Зависимость инвариантов Римана, а, следовательно, скорости $U = F[x + (U + a_{s0})t]$ и давления, от координаты и времени определяется из начальных и граничных условий.

Для частного случая случая неоднородной среды, когда выполняются условия

$$(U + a_{s0}) = f(x; t) \text{ и } x = (U + a)t. \quad (19)$$

На рис. 2 представлена качественная схема образования крутого фронта или ударной волны. На рис. 2а показан профиль скорости среды в начальный момент времени, на рис. 2б стрелками показаны направления скоростей движения различных точек волны в этот же момент времени (размеры стрелок демонстрируют различие в скоростях движения различных точек волны). На рис. 2в показан случай, когда две волны с разными скоростями выходят из разных точек и догоняют одна другую. Действительно, пусть скорость движения волн зависит от координаты x (рис. 2б) так, что в точке 1 максимума амплитуды возмущения (рис. 2в) и максимальная скорость движения волны, а в точке 2 минимума амплитуды возмущения и минимальная скорость движения волны. Тогда с течением времени точка 1, волны с высокой амплитудой, и точка 2 волны, низкой амплитуды, будут

смещаться к точке kA . Следовательно, с течением времени может наступить момент, когда область с максимальной амплитудой “догонит” область с маленькой амплитудой (рис. 2в) – получится практически вертикальный фронт волны. На рис. 2в показаны траектории движения характеристик, выходящих в момент времени $t = 0$ из точек 1 и 2 и последующее пересечение их в точке x , в момент времени t_r , а на рис. 2г показано превращение в момент времени t_r непрерывного профиля, изображенного на рис. 2а, в разрывный.

Представленная на рис. 2г разрывная зависимость давления от координат является идеализацией реальной картины. Вязкость и теплопроводность, роль которых особенно велика именно при больших градиентах скорости и температуры, приводят к “сглаживанию” решений. Тем не менее, рассмотренный пример демонстрирует образование разрыва и показывает, что для рассмотрения непрерывного перехода от состояния перед фронтом к состоянию за ним необходимо учитывать вязкость и теплопроводность среды.

В постоянном магнитном поле $\mathbf{V} = (0, 0, B)$, перпендикулярном скорости движения среды $\mathbf{U} = (U(x), 0, 0)$ при $k \neq 1$ системы уравнений для функций Римана учитывает силу Ампера и принимает вид

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + (U + a_{s0}) \frac{\partial}{\partial x} \right] J_+ &= -j_y B_0 / \rho, \\ \left[\frac{\partial}{\partial t} + (U - a_{s0}) \frac{\partial}{\partial x} \right] J_- &= -j_y B_0 / \rho. \end{aligned} \quad (20)$$

Из (20) следует, что в магнитном поле функции J_+, J_- не являются инвариантами вдоль характеристик $U + a_{s0}$ и $U - a_{s0}$. Используя разобранную выше аналогию с нелинейности скорости звука, заключаем (20), что сила Ампера может приводить к образованию разрыва.

Соответственно, протекание электрического тока и вызванное им джоулево тепловыделение приводит к изменению энтропии

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U \frac{\partial}{\partial x} \right) S = \frac{j_y^2}{\sigma T}.$$

Влияние магнитного поля на инварианты Римана плазме бесконечной проводимостью обсуждается в работах [5, 10, 11].

СИЛЬНЫЕ РАЗРЫВЫ. УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

Типы сильных разрывов. Как было показано ранее сильными разрывами являются плоскости в координатном пространстве, на которых претерпевают разрывы свойства среды или их функции. Рассмотрим влияние внешнего постоянного магнитного поля на сильные разрывы в газовых средах, обладающие конечной электропроводностью

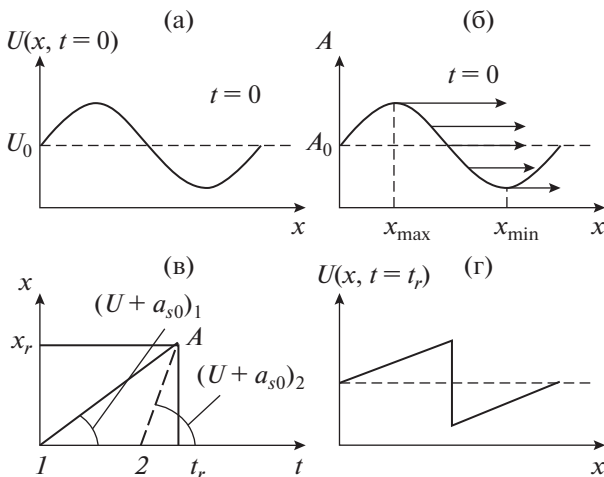


Рис. 2. Образование разрыва: (а) – профиль скорости среды в начальный момент $t = 0$, (б) – движения различных точек профиля скорости, (в) – траектории движения характеристик 1, 2 и пересечение их в точке x_r в момент времени t_r , (г) – профиль скорости среды в начальный момент $t = t_r$.

при высоких температурах, Примерами сильных разрывов являются: граница раздела плотностей двух жидкостей или газов, тангенциальный разрыв скоростей, ударные волны, детонационные и ионизирующие волны.

Рассмотрим сильный разрыв, находится в постоянном внешнем магнитном поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, перпендикулярном скорости движения среды $\mathbf{U} = (U(x), 0, 0)$ и, следовательно, при $k \neq 1$ существует электрический ток $\mathbf{j}(0, -j_y, 0)$. В этом случае следует учесть силу Ампера и джоулев нагрев (движение является не изоэнтропийным). В проводящих электрический ток средах с постоянным внешним магнитным полем анализ сильных разрывов проводится в рамках полной системы уравнений неразрывности, движения и энергии, записанных в дивергентном виде. Иногда уравнение энергии удобно представить через полную удельную энтальпию $h^* \equiv h + U^2/2$ системы [13–15]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) &= 0, \quad \frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot \tilde{\Pi} = \\ &= -j_y B = -\sigma k U B^2 \mathbf{i}, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{U^2}{2} + \rho h \right) + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{U} \left(\frac{U^2}{2} + h \right) \right] &\equiv \\ \equiv \frac{\partial}{\partial t} (\rho h^*) + \nabla \cdot [\rho \mathbf{U} h^*] &= j_y^2 / \sigma - U j_y B, \end{aligned} \quad (21)$$

где $\mathbf{i}(1, 0, 0)$ – единичный базисный вектор в декартовой системе координат, $\tilde{\Pi}$ – тензор

$$\tilde{\Pi}_{i,j} = P \delta_{i,j} + \rho U_i U_j. \quad (22)$$

Система уравнений должна быть дополнена уравнением состояния

$$h = h(P, \rho, T). \quad (23)$$

Пусть фронт, изображенный на рис. 3, движется с постоянной скоростью, тогда в системе координат, движущейся с фронтом волн в положительном

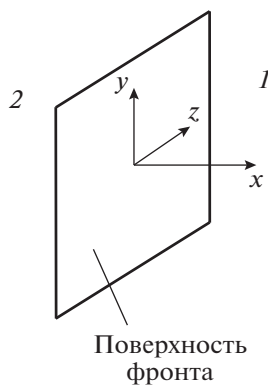


Рис. 3. Фронт сильного разрыва: 1 и 2 – области перед фронтом и за ним.

направлении оси x . Течение в этой системе стационарно и все производные по времени t выпадают. Тогда стационарной системы уравнений (20) с учетом бесконечно тонкого фронта скака, получаем

$$\begin{aligned} \{j_y B\} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} j_y B dx = 0, \\ \left\{ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -U j_y B + j_y^2 / \sigma \right\} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} (-U j_y B + j_y^2 / \sigma) dx = 0. \end{aligned} \quad (24)$$

В таких случаях для сильных разрывов на поверхности волны получим известные следующие соотношения [1, 2].

Из уравнения неразрывности следует сохранение потока массы

$$\{\rho U_x\} = 0. \quad (25)$$

Из уравнений изменения импульса следуют сохранения потоков импульса

$$\{P + \rho U_x^2\} = 0, \quad (26)$$

$$\{\rho U_x U_y\} = 0, \quad (27)$$

$$\{\rho U_x U_z\} = 0. \quad (28)$$

Поверхность, на которой претерпевает разрыв только плотность среды называется, контактным разрывом.

Из уравнения энергии следует сохранение потока энергии

$$\{\rho U_x [h + U^2/2]\} \equiv \{\rho U_x h^*\} = 0. \quad (29)$$

Из (23) следует сохранение для потоков массы

$$G = \rho_1 U_{x,1} = \rho_2 U_{x,2} = \text{const}. \quad (30)$$

На основе представленных соотношений можно дать классификацию сильных разрывов.

Если скорость вдоль оси x отсутствует ($U_{x,1} = U_{x,2} = 0$) то из уравнения (26) получаем, что давления за фронтом и перед ним должны равняться ($P_1 = P_2$). При этом возможны два случая:

а) контактный разрыв, когда тангенциальные скорости равны нулю $U_y = U_z = 0$, а плотности не равны $\rho_1 \neq \rho_2$. Такой разрыв разделяет две покоящиеся, не перемешивающиеся среды с разными плотностями;

б) Тангенциальный разрыв возникает, когда одна из тангенциальных составляющих скорости претерпевает разрыв $U_{y,1} \neq U_{y,2}$, т.е. существуют две, движущиеся с разными скоростями в одном направлении среды.

Если скорости сред в направлении оси x не равны нулю ($U_{x,1} \neq 0, U_{x,2} \neq 0$), то существует сильный разрыв, называемый ударной волной. Он сопро-

вождается потоками массы, импульса и энергии в направлении нормали к фронту волны,

Соотношения на фронте ударной волны. Используя систему уравнений (25)–(29), рассмотрим поверхность сильного разрыва, на которой тангенциальные составляющие скоростей равны нулю $U_y = U_z = 0$.

Из уравнения неразрывности следует условие сохранения потока массы

$$U_{x,1} = \frac{G}{\rho_1} = Gv_1, \quad U_{x,2} = \frac{G}{\rho_2} = Gv_2, \quad (31)$$

где $v_1 \equiv 1/\rho_1$ и $v_2 \equiv 1/\rho_2$ – удельные объемы среды за фронтом и перед ним, $G = \text{const}$ – расход газа.

Из уравнений движения остается только одно – уравнение

$$P_2 - P_1 = G^2 (v_1 - v_2) = G^2 (1 - \rho_1/\rho_2)/\rho_1. \quad (32)$$

Или в другой эквивалентной форме

$$(P_2/P_1) = 1 + (M_1^2/\gamma)(\rho_2/\rho_1 - 1)/(\rho_2/\rho_1), \quad (33)$$

где M_1 – число Маха ударной волны, определенное по скорости звука в среде перед фронтом волны, γ – показатель адиабаты для этой среды.

Так как j^2 не зависит от P и v , то на плоскости P – v уравнение (28) представляет собой прямую линию a , идущую из точки 1.

Из уравнения энергии следует

$$\begin{aligned} h_2 - h_1 &= \frac{U_1^2}{2} - \frac{U_2^2}{2} = \frac{U_{x,1}^2}{2} - \frac{U_{x,2}^2}{2} = \frac{G^2}{2} (v_1^2 - v_2^2) = \\ &= \frac{P_2 - P_1}{2(v_1 - v_2)} (v_1^2 - v_2^2) = (P_2 - P_1) \frac{v_1 + v_2}{2}. \end{aligned} \quad (34)$$

Кривой б на рис. 4 в координатах P – v изображена зависимость $h = h(P; v)$, выходящая из точки, соответствующей состоянию перед волной (точка 1). Проведем в координатах P, v из точки 1 прямую линию, соответствующую уравнению (33).

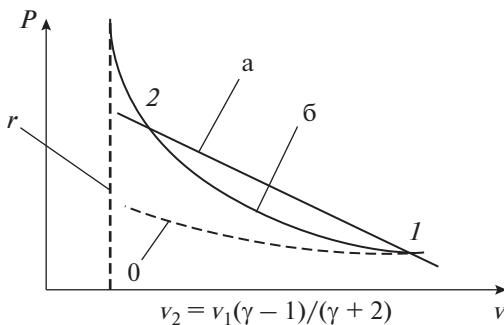


Рис. 4. Зависимость $P(v)$ ударной адиабаты и демонстрация сверхзвуковой скорости движения ударной волны.

Пересечение линии а и кривой б дают состояние системы после ударной волны. Таким образом, построив P – v -диаграмму для ударной волны и зная параметры системы перед фронтом, т.е. скорость движения фронта, можно определить параметры системы за ним. Наоборот, задавая давление за фронтом давление и плотность газа перед фронтом можно определить скорость движения фронта.

Кривая, описываемая уравнением (34), называется адиабатой Гюонио (или ударной адиабатой). Ударная адиабата отличается от реальной адиабаты, в которой энтропия не меняется ($s = \text{const}$). Однако, как это будет показано далее, изменение энтропии в процессе б незначительно и в первом приближении ее можно назвать адиабатой.

На рис. 4. в координатах P – v изображены характерные зависимости, вытекающие их уравнений (36), (37): а – прямая, описываемая уравнением (36); б – адиабата Гюонио, вытекающая из уравнения сохранения потока энергии. Вспомогательные линии: в – реальная адиабата, выходящая из точки 1; r – асимптота адиабаты Гюонио, построенная; 1 и 2 – состояния системы до фронта и после него.

Можно показать, что касательные к ударной адиабате соответствуют локальной скорости звука. Обратим внимание на расположение касательных к ударной адиабате (наклон линий) в ее начальной и конечной точках. Из рис. 4 видно, что имеют место неравенства

$$U_{x,1} > a_{s0}^{(1)} \quad \text{и} \quad U_{x,2} < a_{s0}^{(2)}, \quad (35)$$

которые означают, что ударная волна движется со сверхзвуковой скоростью, а скорость среды за фронтом меньше локальной скорости звука.

Для идеального газа можно получить простые соотношения между различными величинами на фронте ударной волны.

Для энтальпии идеального газа

$$h = \frac{\gamma}{\gamma - 1} P v, \quad (36)$$

из (35)–(37) находим

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\gamma + 1) P_1/P_2 + (\gamma - 1)}{(\gamma - 1) P_1/P_2 + (\gamma + 1)}, \quad (37)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{P_2 v_2}{P_1 v_1} \quad \text{и} \quad U_{x,1} = \sqrt{\frac{v_2}{2} [(\gamma - 1) P_1 + (\gamma + 1) P_2]}. \quad (38)$$

Изменение энтропии во фронте ударной волны. Ранее были установлены изменения скорости, плотности и давления в ударной волне, а теперь рассмотрим изменения энтальпии и энтропии во фронте ударной волны:

$$\begin{aligned}
 h_2 - h_1 &= \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right)_P^{(1)} (s_2 - s_1) + \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1) + \\
 &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial P^2}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1)^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 h}{\partial P^3}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1)^3 = \\
 &= T_1 (S_2 - S_1) + v_1 (P_2 - P_1) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1)^2 + \\
 &+ \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial P^2}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1)^3.
 \end{aligned} \tag{39}$$

Здесь учтены известные термодинамические тождества:

$$\left(\frac{\partial h}{\partial s}\right)_P = T, \tag{40}$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_s = v \equiv \frac{1}{\rho}. \tag{41}$$

Удельный объем за фронтом волны можно определить разложить в ряд Тейлора по изменению давления. Если ограничиться третьим членом ряда, получим

$$v_2 = v_1 + \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial P^2}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1)^2. \tag{42}$$

Используя вышеприведенные результаты, находим изменение энтропии в ударной волне пропорционально кубу изменения давления

$$s_2 - s_1 = \frac{1}{12T_1} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial P^2}\right)_s^{(1)} (P_2 - P_1)^3. \tag{43}$$

Уравнение (43) свидетельствует о том, что ударная волна с уменьшением ее интенсивности ($P_2 \rightarrow P_1$) стремится к волне, в которой энтропия не изменяется, а ее скорость равна скорости звука в газе

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_s = a_{s0}^2, \tag{44}$$

т.е. превращается в акустическую волну.

Обратим внимание

1. Если повышать давление за фронтом, скорость волны $U_{x,1}$ увеличивается.

2. Сжать вещество нельзя плотнее, чем в $(\gamma + 1)/(\gamma - 1)$ раз, так как

$$\lim_{P_2 \rightarrow \infty} \frac{P_2}{\rho_1} \equiv \lim_{P_2 \rightarrow \infty} \left(\frac{v_2}{v_1}\right)^{-1} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}. \tag{45}$$

Для $\gamma = 5/3$

$$\lim_{P_2 \rightarrow \infty} \frac{P_2}{\rho_1} = 4. \tag{46}$$

Температура за фронтом может увеличиваться неограниченно пропорционально давлению P . При этом рост температуры приводит образова-

нию за фронтом ударной волны плазмы, способной проводить электрический ток и обеспечивать воздействие магнитного поля на течение за фронтом ударной волны. Следовательно, ударные волны – мощный источник получения вещества при высоких температурах. Следует учитывать, что в интенсивных ударных волнах и, соответственно, при высоких плотностях ударносжатого газа следует учитывать эффекты неидеальности в уравнении состояния $h = h(P, \rho, T)$.

На рис. 5 показаны экспериментальные данные и численные расчеты ударной адиабаты для дейтерия, которые наглядно демонстрируют роль неидеальности плазмы за фронтом ударной волны. В экспериментах [17] были получены значения $\frac{P_2}{\rho_1}$, превышающие предельное значение для идеального газа 4. При больших интенсивностях ударной волны и, следовательно, более высоких температурах плазмы роль эффектов неидеальности плазмы ослабевает и в расчетах $\lim_{P_2 \rightarrow \infty} \frac{P_2}{\rho_1} \rightarrow 4$.

Более детально о расчете ударных адиабат воздуха можно найти в работе [21].

Генерация ударных волн и слабые разрывы.

Кратко остановимся на способе получения ударных волн. Среди всех способов остановимся на методе генерации ударных волн в ударных трубах, состоящих из двух камеры высокого и низкого давлений, разделенных металлической диафрагмой. Такие системы эффективно используются для исследования термодинамических свойств плотных газов при высоких температурах среды. Камеры могут заполняться различными газами под разным давлением ($P_2 > P_1$). После разрыва диафрагмы образуется ударная волна, которая распространяется по камере низкого давления, оставляя за собой область ударного сжатого газа и волну разряжения.

Заштрихованная на рис. 6 область ab в момент времени t_3 находящаяся между фронтом ударной волны, движущейся со скоростью U_a в положительном направлении оси x , и контактным разрывом, движущимся со скоростью U в положительном направлении оси x , содержит ударно сжатый газ, находящийся в камере низкого давления; область bc в момент времени t_3 , находится между фронтом контактным разрывом и фронтом волны разряжения, движущимся со скоростью звука a_s в отрицательном направлении оси x , и содержит толкающий ударную волну газ.

Кроме ударных труб для генерации ударных волн используются взрывы конденсированного взрывчатого вещества и электрические разряды в газе, жидкости или твердом теле.

Поскольку степень сжатия вещества в отдельной ударной волне ограничена (45), то для полу-

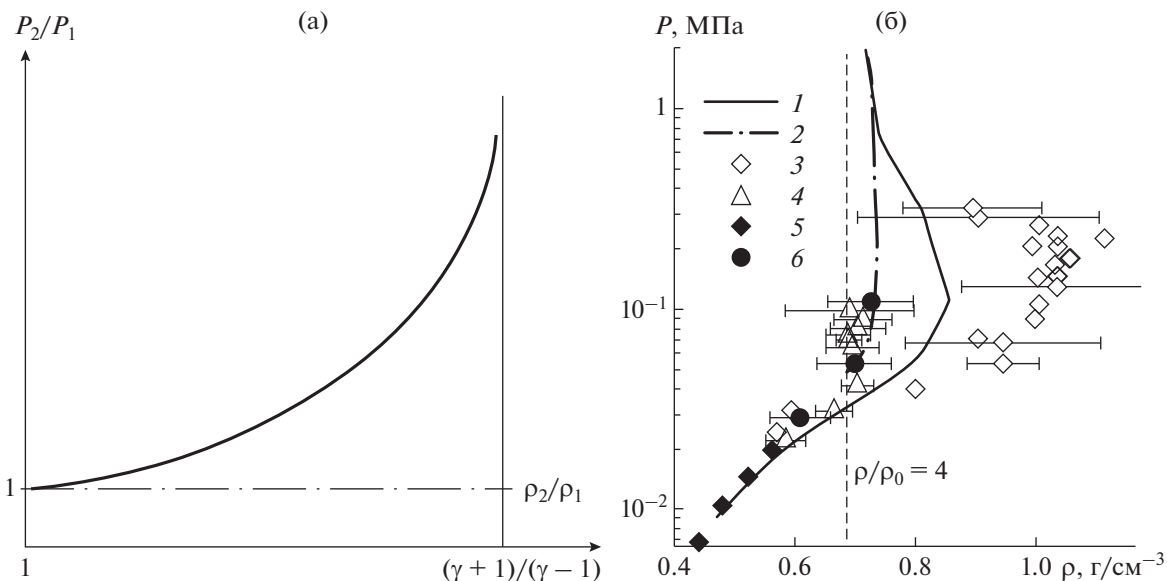


Рис. 5. Ударная адиабата: (а) ударная адиабата в идеальном газе; (б) сплошная линия – расчет ударной адиабаты [14], фигурами обозначены численные расчеты (1 – [15], 2 – [16]) и эксперименты: 3 – [17], 4 – [18], 5 – [19], 6 – [20].

чения высоких плотностей используется серия ударных волн, в которой осуществляется последовательное сжатие вещества. Напомним, что без магнитного поля и протекания электрического тока при $P_2 \rightarrow P_1$ ударная волна вырождается в акустическую. Поэтому все соотношения для ударных волн в пределе стремятся к соотношению для акустических волн. Поскольку для ионизирующих ударных волн холодный газ перед фронтом волны является не проводящим, магнитное поле не оказывает влияние на среду перед фронтом.

ГРАНИЦЫ УСТОЙЧИВОСТИ УДАРНЫХ ВОЛН С МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ И БЕЗ НЕГО

За фронтом волны при высоких температурах среда (плазма) обладает конечной проводимостью, и в постоянном поперечном магнитном поле возникает электрический ток, величина которого зависит от магнитного поля и способов замыкания тока. При коэффициенте нагрузки $k < 1$, согласно уравнению (5), ударная волна превращается в МГД генератор и затухает за счет отбора энергии во внешнюю нагрузку [22]. Торможение потока за фронтом ударной волны может приводить к образованию вторичной ударной волны [22, 23], при коэффициенте нагрузки $1 < k$ возникает ускорительный режим, в котором ударная волна и газ за ее фронтом ускоряются. Изменение магнитного поля за фронтом ударной волны, вызванное протеканием электрического тока зависит от магнитного числа Рейнольдса [6–8]

$$\text{Re}_m = \mu_0 \sigma U_x l_s.$$

Здесь $0 \leq l_s(t)$ – размеры области ударно нагретого газа за фронтом волны, обладающей конечной электропроводностью (рис. 5). Размер области $l_s(t)$ возрастет по мере движения ударной волны. В большинстве рассматриваемых в данном обзоре случаев $\text{Re}_m \ll 1$ и играет роль только внешнее магнитное поле.

Для целого ряда технических приложений важным является сохранение плоского фронта ударной волны и однородной среды за ним, поэтому далее остановимся на проблеме устойчивости плоского фронта ударной волны.

Как показывают эксперименты [24, 25], фронт волны может искривляться, испытывать колебания и даже распадаться на два сильных разрыва. Природу этих явлений можно понять, исследуя устойчивость фронта ударной волны. В анализе можно пренебречь вязкостью и теплопроводностью, которые не могут приводить к неустойчивости, а лишь обеспечить затухание возмущений. Поэтому без магнитного поля неустойчивость может быть обусловлена лишь процессами на границе среды – на фронте ударной волны. В магнитном поле и протекании электрического тока следует учитывать наличие объемных источников тепловыделения, когда акустические волны усиливаются за счет рэлеевского механизма, либо за счет флуктуации силы Ампера [7]. Сначала рассмотрим процессы, оказывающие влияние на устойчивость ударной волны без учета магнитного поля, т.к. они нам понадобятся при анализе роли поперечного магнитного поля и, следовательно, протекания электрического тока.

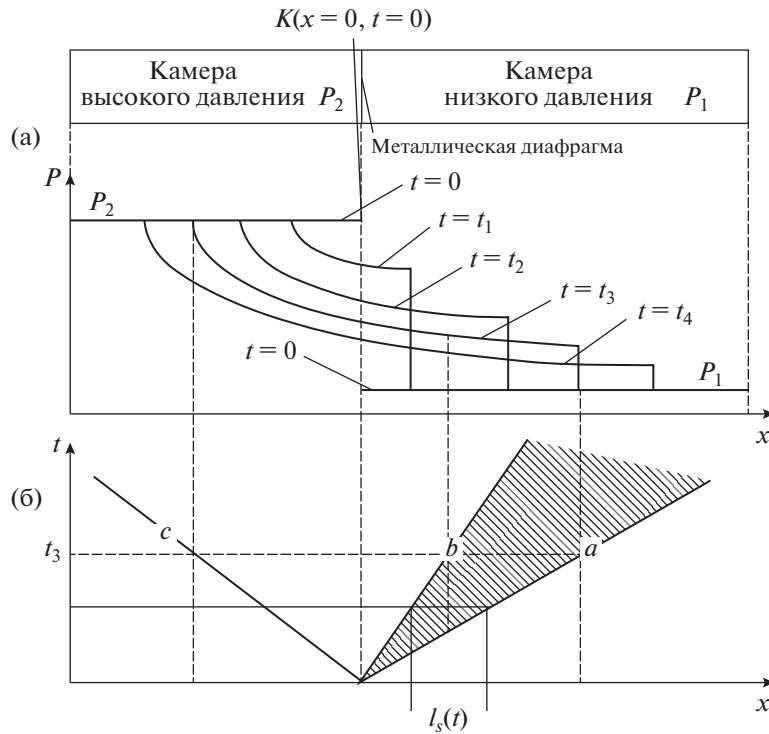


Рис. 6. Динамика распада контактного разрыва (а); положение фронта ударной волны $x_a = U_d t$ (б), контактного разрыва $x_b = Ut$ и фронта волны разряжения $x_c = -a_s t$ в момент времени $t = t_4$: a – ударная волна, b – контактный разрыв, c – фронт волны разряжения.

Границы устойчивости плоской ударной волны без магнитного поля. Для случая без магнитного поля, поведение ударной волны зависит от ее интенсивности и вида адиабаты Гюгонио – производной $\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_H$. Известно, что в зависимости от этих параметров могут существовать области устойчивости, неустойчивости и генерации колебаний. В области устойчивости возмущения затухают по закону $\xi \sim t^{-3/2}$ [26], в области неустойчивости возникает так называемая, структурная неустойчивость [25, 26].

Задача об устойчивости фронта ударной волны (рис. 6) была решена С.П. Дьяковым [26], дальнейшие обсуждения и уточнения этой задачи можно найти в работах [25, 27–38]. Эксперимент, демонстрирующий влияние неустойчивости ударной волны на обтекания твердого тела можно увидеть в [39].

Поскольку фундаментальные результаты С.П. Дьякова нам понадобятся при анализе роли магнитного поля кратко воспроизведем их ниже. Когда ударная волна движется с постоянной скоростью, то исследования ее устойчивости можно провести, переходя в систему координат, связанную с фронтом волны, рассматривая эволюцию малых возмущений [36, 37]. При линеаризации системы уравнений сохранения потока массы, импульса и энергии, следует учитывать и возмущение скоро-

сти фронта волны, решая системы линеаризованных уравнений в областях перед и за фронтом и сшивая их на движущейся поверхности разрыва.

Фронт движется со скоростью большей скорости звука $U_{x,1} > a_{s0}$, а возмущения могут перемещаться только со скоростью звука, поэтому возмущения, наблюдаемые в области за фронтом, не могут оказывать на него никакого влияния, но могут оказывать влияние возмущения, находящиеся на поверхности фронта и перед ним. Качественный анализ показывает, что устойчивость ударных волн в первую очередь может быть связана с процессами во фронте ударной волны.

Представим малые возмущения за фронтом волны в виде

$$P_2 = P_2^{(0)} + \delta P, \quad \rho_2 = \rho_2^{(0)} + \delta \rho, \quad U_{x,2} = U_{x,2}^{(0)} + \delta U_x.$$

Аналогичные разложения можно написать и для среды перед фронтом. Тогда система решаемых уравнений должна состоять из системы линеаризованных уравнений сохранения массы, импульса и энергии за и перед фронтом волны.

Граничные условия для возмущений сводятся к ограниченности возмущений на бесконечности в любой момент времени. К линеаризованным уравнениям (31)–(34) на фронте ударной волны добавляется кинематическое условия, имеющего вид

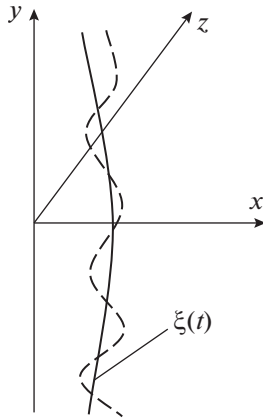


Рис. 7. Фронт волны: сплошная линия – невозмущенный фронт; пунктирная – возмущение фронта.

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \delta U_{x,1}, \tag{47}$$

где $\xi(t)$ – поверхность фронта.

Решение задачи для вектора возмущений будем искать в виде плоской волны

$$\delta \mathbf{q} = \mathbf{C} \exp[i(k_y y + k_x x + \omega t)]. \tag{48}$$

Систему координат всегда можно направить так, чтобы волновой вектор имел только две проекции $\mathbf{k} = (k_x; k_y; 0)$. Здесь k_x – проекция волнового вектора в направлении нормали к фронту волны; k_y – проекция волнового вектора в поперечном направлении ($l_y = 2\pi/k_y$ – длина волны в поперечном направлении).

Из системы уравнений для малых возмущений после ряда преобразований [21] можно получить дисперсионное уравнение, содержащее проекции волнового вектора k_x, k_y и частоту ω

$$D(k_x; k_y; \omega) = 0. \tag{49}$$

Находя корни дисперсионного уравнения k_{xj} и подставляя общее решение для возмущений

$$\delta \mathbf{q}(x, t) = \sum_{j=1}^s \mathbf{C}_j \exp[i(k_y y + k_{xj}(k_y, \omega)x + \omega t)]$$

в граничные условия, находим характеристическое уравнение

$$\Delta[k_x(\omega; k_y); \omega] = 0. \tag{50}$$

На основе полученных корней характеристического уравнения $\omega = \omega(k_y, m)$ можно судить об устойчивости ударной волны.

В отсутствии магнитного поля, параметрами задачи являются

$$m = \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_H G^2 = G^2 / \left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_H = M_1^2 \frac{a_1^2}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_H} k_v, \tag{51}$$

где индекс H показывает, что производная берется по адиабате Гюгонио; G – поток массы через фронт.

В общем случае частота, найденная из уравнения (50), может содержать действительную и мнимую части: $\omega_n(m, k_v) = \omega_{nr}(m, k_v) + i\omega_{ni}(m, k_v)$, зависящие от волнового числа k_y и параметра m (51), который обычно и определяет границы устойчивости ударной волны. При $\omega_{ni}(m, k_v) < 0$ возникают неустойчивости плоской ударной волны, связанные с особенностями адиабаты Гюгонио – параметра m , и называемые структурными [25]. На рис. 7 представлена диаграмма устойчивости ударных волн в зависимости от параметра m .

Таким образом анализ корней характеристического уравнения показывает:

1. Если параметр m удовлетворяет условию

$$\Gamma_{st} \equiv -1 < m < \Gamma_{st+} \equiv \frac{1 - M_2^2(1 + \delta)}{1 + M_2^2(\delta - 1)},$$

то плоская ударная волна устойчива, $\delta = \rho_2/\rho_1 > 1$, $M_2 \equiv U_{x,2}/a_{s0}^{(2)}$ – число Маха за фронтом. Асимптотический закон затухания возмущений имеет вид $t^{-3/2}$. Видно, что положение верхней границы области устойчивости зависит от интенсивности ударений волны – числа Маха. При малых интенсивностях ударных волн $M_2 < M_{2cr} = \sqrt{1/(1 + \delta)}$ $\Gamma_{st+} > 0$, при $M_2 < M_{2cr}$ верхняя граница области устойчивости перемещается в отрицательную область $\Gamma_{st+} < 0$, а нижняя остается неизменной при всех значениях интенсивности ударной волны.

Для значения параметра $m = \frac{1 - M_2^2(1 + \delta)}{1 + M_2^2(\delta - 1)}$ за-

тухание происходит по закону $\xi \sim t^{-1/2}$.

При $m < -1$ или $m > 1 + 2M_2$ ударная волна неустойчива. В этих областях амплитуда возмущений возрастает по экспоненциальному закону.

2. Если имеет место соотношение

$$\frac{1 - M_2^2(1 + \delta)}{1 + M_2^2(\delta - 1)} < m < 1 + 2M_2,$$

то возможно излучение звука колеблющимся разрывом, т.е. затухание отсутствует.

Суммируя вышесказанное и рис. 7, в зависимости от параметра m можно выделить несколько характерных областей поведения малых возмущений фронта ударной волны.

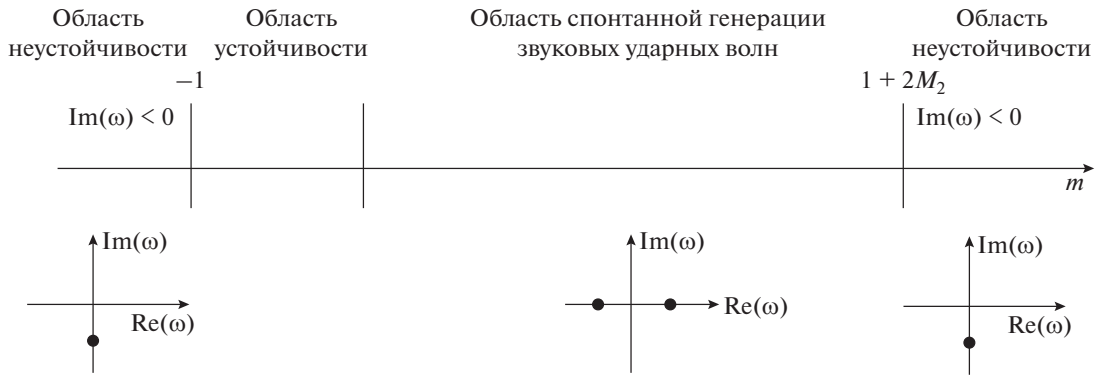


Рис. 8. Области неустойчивости и устойчивости ударных волн и схемы расположения корней характеристического уравнения на комплексной плоскости в зависимости от параметра m .

Поскольку квадрат потока массы всегда положителен G^2 , то из (51) следует, что знак параметра m определяется производной $(\partial v / \partial P)_H$. Для идеального газа она всегда отрицательна, однако, как показывают эксперименты, существуют реальные вещества, у которых $(\partial v / \partial P)_H$ может быть положительной (рис. 8). Если адиабата Гюгонио имеет вид, представленный на рис. 6б, то неустойчивая ударная волна расщепляется на две устойчивые ударные волны, идущие одна за другой. Более детальное обсуждения поведения неустойчивой ударной волны можно найти в [25–30].

Если еще газ посмотреть на рис. 6, где представлены экспериментальные значения и численные расчеты ударных адиабат с учетом неидеальности сред при высоких плотностях за фронтом с ударной волны, то легко видеть возможности возникновения неустойчивости.

Как уже отмечалось неустойчивость ударных волн, связанная с поведением производной $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_H$ называется структурной неустойчивостью, поскольку в результате неустойчивости ударная волна может распадаться на несколько ударных волн [25] (рис. 9). Некоторые вопросы, связанные с нелинейными эффектами при развитии структурной неустойчивости ударных волн содержатся в обзоре [25].

Устойчивость плоской ионизирующей ударной волны в магнитном поле. В предыдущем пункте была исследована устойчивость ударной волны в газах без магнитного поля, где структурная неустойчивость зависела от особенностей ударной адиабаты — производной $(\partial v / \partial P)_H$. Теперь в дополнении к этому механизму рассмотрим влияние электрических и магнитных полей на устойчивость ударной волны, следуя работам [39–44], и используя методы, изложенные в [44, 45]. В поперечном магнитном поле на поведение возмущений могут оказывать влияние как особенности адиабаты Гюго-

нио, приводящие к структурной неустойчивости и без магнитного поля [25, 26]; так и возмущения силы Ампера $\delta j_2 B_0$. Возмущения силы Ампера могут возникать за счет двух механизмов. Первый $\delta j_2 B_0 = \delta U_2 \sigma_2 B_0^2 / \rho_2$ связан с возмущением скорости плазмы δU_2 и приводит к затуханию возмущений за счет так называемой, магнитной вязкости $\frac{\sigma_2 B_0^2}{\rho_2}$. С учетом этого механизма магнитное поле влияет на вид асимптотического разложения при анализе структурной неустойчивости ударной волны. В области устойчивости, амплитуда возмущения может затухать гораздо быстрее, чем в отсутствие магнитного поля. Вторым механизмом $\delta j_2 B_0 = \delta \sigma_2 U_2 B_0^2 / \rho_2 = \sigma_2 U_2 B_0^2 \left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial T_2}\right)_P \delta T_2 / \rho_2$ соответствует известной в плазме перегревной неустойчивости [8], вызванной зависимостью элект-

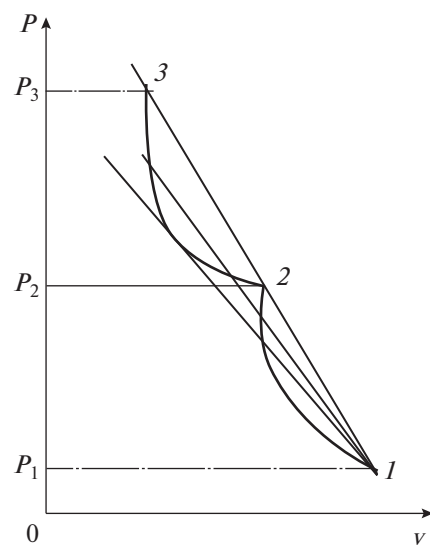


Рис. 9. Возможный вид адиабаты Гюгонио реального газа. Волны P_1 — давление перед фронтом, P_3, P_2 давления за фронтом при одном и том же расходе G .

тропроводности от температуры $\sigma_2(T_2)$. Эта неустойчивость возникает в ударно нагретой плазме за фронтом волны и не связана с особенностями адиабаты Гюгонио. Кроме того, при больших значениях параметра взаимодействия торможение потока плазмы может приводить к снижению скорости распространения фронта и к генерации вторичной ударной волны в нагретом газе [39–44].

Поведение электрических и магнитных полей на поверхности разрыва. Пусть ударная волна, плоскость которой совпадает с плоскостью yoz , движется в электрическом и магнитном полях в положительном направлении оси x (рис. 3). Электропроводность холодного газа перед фронтом волны равна нулю, а за фронтом нагретый газ термически ионизован и способен проводить электрический ток. Следовательно, коэффициент электропроводности изменяется скачком при переходе через поверхность разрыва от значения $\sigma_1 = 0$ перед фронтом до значения $\infty > \sigma_2 > 0$ за ним.

Рассмотрим случай движения ударной волны во внешнем постоянном магнитном поле, которое лежит в плоскости ударной волны и направлено по оси z ($B_x = B_y = 0$). За фронтом ударной волны движение проводящей среды приводит к генерации электрического поля и электрического тока. Ударные волны, в которых электропроводность за фронтом волны достигает больших величин, называются ионизирующими ударными волнами [5, 46–48].

Электрическое поле \mathbf{E} и электрический ток \mathbf{j} связаны с индукцией магнитного поля \mathbf{B} соотношением (4) $\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{U} \times \mathbf{B})$. Если происходит замыкание электрического тока через внешнюю сеть, то приходим к закону Ома (5):

$$\mathbf{j} = \sigma(1 - k)\mathbf{U} \times \mathbf{B}.$$

Если стенки канала непроводящие, приходим к режиму холостого хода. В этом случае связь между напряженностью электрического поля \mathbf{E} , индукцией магнитного поля и скоростью движения газа сводится к соотношению,

$$E_{2,y} = U_2 B_{2,z}. \quad (53)$$

В таком случае согласно уравнению Максвелла $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}$ на поверхности разрыва газодинамической ударной волны должны выполняться условия, связывающие возмущения магнитного и электрических полей и

$$\{B\} \equiv B_{2,z} - B_{1,z} = 0, \quad \{E_\tau\} = 0. \quad (54)$$

Напомним, что символ $\{A\}$ здесь, как и ранее, обозначает скачок величины A на поверхности разрыва.

Иследуем устойчивость плоского фронта ударной волны относительно малых смещений параметров зрелы от положения равновесия. Пренебрегая эффектом Холла (это связано с большим

значением частоты столкновений частиц в среде за фронтом ударной волны), вязкостью и теплопроводностью. Последнее связано с преимущественным учетом длинноволновых возмущений. В рассматриваемой задаче $Re_m \ll 1$ и играет роль только внешнее постоянное магнитное поле.

В системе координат, движущейся вместе с невозмущенным фронтом ударной волны, смещение фронта ударной волны от положения равновесия в направлении к нормали к плоскому фронту волны ($\mathbf{n}_0 \{1, 0, 0\}$) в начальный момент времени выражается в виде

$$\xi(x, t = 0) = \xi_0 \exp(iky), \quad \xi_0 \ll l_s(t = 0). \quad (55)$$

Обозначим через \mathbf{n} вектор, направленный по нормали к возмущенной поверхности разрыва, и $\boldsymbol{\tau}$ – вектор, лежащий в касательной плоскости. Их вид дается уравнениями

$$\mathbf{n} = \left\{ 1; -\frac{\partial \xi}{\partial y}; 0 \right\}, \quad \boldsymbol{\tau} = \left\{ \frac{\partial \xi}{\partial y}; 1; 0 \right\}. \quad (56)$$

Ионизирующая ударная волна движется со сверхзвуковой скоростью по отношению к среде, находящейся перед фронтом волны, поэтому возмущения газодинамических параметров, вызванные смещением плоского фронта от положения равновесия, в область перед фронтом волны не проникают. Возмущения электромагнитного поля туда проникают, но так как среда перед фронтом не проводящая, то электрические токи и в этой области не возникают, и не происходит возмущения газодинамических параметров. Ввиду отсутствия электрических токов в невозмущенном состоянии считается, что невозмущенные параметры среды не зависят от координат и времени. Кроме того, будем считать магнитное число Рейнольдса малым (пренебрегать влиянием индуцированного магнитного поля по сравнению с невозмущенным). Параметр МГД взаимодействия произволен.

Система уравнений (21), линеаризованная относительно малых возмущений в проводящей области, имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{a_2^2} \left[\frac{\partial(\delta P)}{\partial t} + U_2 \frac{\partial(\delta P)}{\partial x} \right] &= P_2 \left[\frac{\partial(\delta U)}{\partial x} + \frac{\partial(\delta V)}{\partial y} \right], \\ \rho_2 \left[\frac{\partial(\delta U)}{\partial t} + U_2 \frac{\partial(\delta U)}{\partial x} \right] + \frac{\partial(\delta P)}{\partial x} - \delta j_y B_2 &= 0, \\ \rho_2 \left[\frac{\partial(\delta V)}{\partial t} + U_2 \frac{\partial(\delta V)}{\partial x} \right] + \frac{\partial(\delta P)}{\partial y} + \delta j_x B_2 &= 0, \\ \frac{\partial(\delta P)}{\partial t} - \left(\frac{P_2}{\rho_2} \right) \frac{d(\delta p)}{dt} &= -(\gamma - 1) \times \\ &\times P_2 \left[\frac{\partial(\delta U)}{\partial x} + \frac{\partial(\delta V)}{\partial y} \right], \\ \text{rot}(\delta \mathbf{E}) &= 0, \quad \text{div}(\delta \mathbf{j}) = 0, \\ \delta \mathbf{j} &= \sigma_2 (\delta \mathbf{E} + \delta \mathbf{U} \times \mathbf{B}_2). \end{aligned} \quad (57)$$

Нижний индекс 1 относится к параметрам перед фронтом ударной волны, индекс 2 – за фронтом. Возмущения электромагнитного поля в области перед фронтом ударной волны описываются системой уравнений Максвелла без учета тока смещения. Для линейных возмущений электрического тока джоулев нагрев не учитывается

Линеаризуя уравнения (36), (37) и (34) на поверхности разрыва, приходим к следующим соотношениям при координате $x = 0$

$$\begin{aligned} \rho_2 \delta U_2 + \delta \rho_2 U_2 &= (\rho_2 - \rho_1) \frac{\partial \xi}{\partial t}, \\ U_2^2 \delta \rho_2 + 2G \delta U_2 + \delta P_2 &= 0, \\ G \delta V_2 &= (P_2 - P_1) \frac{\partial \xi}{\partial y}, \quad \delta P_2 = \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_H \delta v_2. \end{aligned} \quad (58)$$

Здесь $\rho_1 U_1 = \rho_2 U_2 = G = \text{const}$ – поток массы. Производная $\left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_H$ в последнем уравнении системы (58) берется вдоль ударной адиабаты. Из условия не протекания электрического тока в область, находящуюся перед фронтом ударной волны получим

$$\{\delta \mathbf{j} \cdot \mathbf{n}\} = 0, \quad \delta j_{2,x} = 0. \quad (59)$$

Доказательство этого условия приводится в разделе “Вывод граничного условия для электрического тока в задаче об устойчивости ударной волны в поперечном магнитном поле”. Откуда следует, что для бесконечно тонкого разрыва, электрический ток на возмущенном фронте ударной волны принимает следующее значение:

$$\delta j_{2,y} = \frac{P_2 - P_1}{2} \left[\delta U_2 - \frac{\partial \xi}{\partial t} \right] + U_2 \frac{P_1}{2P_2} \delta P_2. \quad (60)$$

Системы уравнений для малых возмущений. Дисперсионное и характеристическое уравнения. Здесь проведем исследование устойчивости ударной волны в рамках задачи с начальными данными, считая, что все свойства исходного состояния за фронтом ударной волны не зависят от координаты x . В этом случае малые возмущения всех свойств представим решение исходной системы уравнений в виде

$$\delta q(x; y; t) = q(x; t) \exp(iky). \quad (61)$$

Применяя к уравнениям (58) преобразование Лапласа

$$q^L(x; \omega) = \int_0^{\infty} q(x; t) \exp(-\omega t) dt$$

и вводя вектор преобразованных по Лапласу возмущений

$$\mathbf{q}^L = \{P^L(x; \omega); U^L(x; \omega); V^L(x; \omega); j_x^L(x; \omega); j_y^L(x; \omega)\}, \quad (62)$$

запишем исходную систему уравнений следующим образом:

$$\tilde{\Omega} \frac{d\mathbf{q}}{dx} = -(\omega \tilde{T} - \tilde{\Lambda}) \mathbf{q}. \quad (63)$$

Матрица $\tilde{\Omega}$ имеет вид

$$\tilde{\Omega} = \begin{pmatrix} U_2 & \rho_2 a_2^2 & 0 & 0 & 0 \\ 1/\rho_2 & U_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 B_2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (64)$$

Матрицы \tilde{T} и $\tilde{\Lambda}$ имеют виды

$$\begin{aligned} \tilde{T} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \tilde{\Lambda} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & ik\rho_2 a_2^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -B_2/\rho_2 \\ ik\rho_2 & 0 & 0 & B_2/\rho_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ik \\ 0 & 0 & ik\sigma_2 B_2 & -ik & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (65)$$

Граничные условия (58)–(60) могут быть записаны в виде вектора

$$\mathbf{q}(0; \omega) = \chi_1 \xi(\omega) + \chi_2 \xi(0). \quad (66)$$

Компоненты векторов χ_1, χ_2 имеют вид

$$\chi_1 = \{\chi_{1,1}; \chi_{1,2}; \chi_{1,3}; 0; \chi_{1,5}\}, \quad \chi_2 = \frac{1}{\omega} \{\chi_{1,1}; \chi_{1,2}; 0; 0; \chi_{1,5}\},$$

где

$$\begin{aligned} \chi_{1,1} &= -\frac{2\omega P_2 - P_1}{U_1 U_1}, \quad \chi_{1,2} = -\omega \frac{1 + m U_2 - U_1}{1 - m U_1}, \\ \chi_{1,3} &= ik(U_1 - U_2), \quad \chi_{1,5} = -\omega \frac{P_2 - P_1 \sigma_2 B_2}{2 \rho_2 a_2^2} \times \\ &\times \left[\frac{2U_2 P_1}{P_2 U_1 (1 - m)} + \frac{U_2 - U_1}{U_1} \frac{1 + m}{1 - m} \right], \\ m &= (G)^2 \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_H. \end{aligned}$$

Как уже говорилось, производная $\left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_H$ берется вдоль адиабаты Гюгонио.

Решение уравнения (63) представим в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(x; \omega) &= \mathbf{q}(0; \omega) \exp(\tilde{\Pi} x), \\ \tilde{\Pi} &= -\tilde{\Omega}^{-1} (\omega \tilde{T} + \tilde{\Lambda}). \end{aligned} \quad (67)$$

Можно показать, что решение (67) ограничено тогда и только тогда, когда

$$\mathbf{q}^1(0; \omega) \cdot \mathbf{q}(0; \omega) = 0. \tag{68}$$

Здесь $\mathbf{q}^1(0; \omega)$ – собственный вектор матрицы $\tilde{\Pi}^1$ ($\tilde{\Pi}^1$ – транспонированная матрица $\tilde{\Pi}$ ($\Pi_{i,j} \equiv \Pi_{j,i}^1$)). Смещение фронта ударной волны от положения равновесия запишется из уравнений (66), (68) в виде

$$\xi(\omega) = -\xi(0) \frac{\mathbf{q}^1(0; \omega) \cdot \chi_2(\omega)}{\mathbf{q}^1(0; \omega) \cdot \chi_1(\omega)}. \tag{69}$$

После возвращения к функциям – оригиналам, получаем для амплитуды смещения соотношение

$$\frac{\xi(t)}{\xi(0)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty+is}^{+\infty+is} \frac{f(\omega)}{D(\omega)} \exp(\omega t) d\omega \tag{70}$$

Здесь

$$f(\omega) = (1-m) \left(\omega - \frac{\beta}{2\gamma\tau_\sigma^*} \right) + 2l - \frac{M_2^2\beta}{\tau_\sigma^*} + \frac{1+m}{2\gamma\tau_\sigma^*(1-\delta^{-1})}, \tag{71}$$

$$D(\omega) = \left[(1-m) \left(\omega^* - \frac{\beta}{2\gamma\tau_\sigma^*} \right) + 2l - \frac{\beta M_2^2}{\tau_\sigma^*} \right] \omega^* + \delta(1+m) \left[1 + \frac{\omega^*}{2\tau_\sigma^*(\delta-1)} \right].$$

Здесь

$$l(\omega^*) = \pm \sqrt{M_2^2 \left(\omega^* + \frac{1}{2} \tau_\sigma^* \right) + (1-M_2^2) \left(1 - \frac{M_2^2}{4\tau_\sigma^{*2}} \right)},$$

$$\beta = \frac{P_2 - P_1}{P_2}, \quad \omega^* = \frac{\omega}{U_2 k}, \quad \tau_\sigma^* = \frac{\rho_2 U_2 k}{\sigma_2 B_2^2},$$

$$\tau_\sigma = \frac{\rho_2}{\sigma_2 B_2^2}, \quad M_2 = \frac{U_2}{a_2}, \quad \delta = \frac{U_1}{U_2} = \frac{\rho_2}{\rho_1} \geq 1,$$

$$\beta = \frac{P_2 - P_1}{P_2} \geq 0, \quad \tau_\sigma^* = \frac{\rho_2 U_2 k}{\sigma_2 B_2^2}, \quad \tau_\sigma = \frac{\rho_2}{\sigma_2 B_2^2}.$$

Анализ корней характеристического уравнения. Зависимость амплитуды смещения от времени определяется особенностями функции $D(\omega, k)$ из-за члена $l(\omega^*)$, в общем случае, является двузначной. Если выбрать два листа римановой поверхности, склеенной вдоль разреза, проходящего между точками ветвления функции $D(\omega)$, то контур интегрирования выбирается на верхнем листе римановой поверхности (перед корнем l в (70) выбираем знак плюс).

В том случае, когда все особенности подынтегрального выражения, входящего в первое выражение l , лежат на нижнем листе римановой по-

верхности и вклад в асимптотику дают лишь точки ветвления, для анализа удобно использовать дробно – линейное преобразование

$$\omega^* = \frac{1}{2} \frac{\mu}{M_2} \left(z - \frac{1}{z} \right) - \frac{\tau_\sigma^*}{2}, \quad \mu = \sqrt{(1-M_2^2) \left[1 - \frac{M_2^2}{4\tau_\sigma^{*2}} \right]}.$$

С использованием этого преобразования интеграл (70) принимает вид

$$\frac{\xi(t)}{\xi(0)} = \frac{\mu}{2\pi i} \exp\left(-\frac{t}{2\tau_\sigma^*}\right) \times \int_C \exp\left[-\frac{\mu(z-z^{-1})f(z)(z^2+1)}{2M_2 z D(z)}\right] dz. \tag{72}$$

В качестве контура интегрирования C выбирается окружность единичного радиуса ($C: |z|=1$). Проводя интегрирование, находим поведение амплитуды смещения. При больших временах ($t \rightarrow \infty$) из (72) методом перевала получаем

$$\frac{\xi(t)}{\xi(0)} = \frac{\exp[-t/(2\tau_\sigma^*)]}{2\pi i \sqrt{t/\pi}} \sum_{k=1}^2 \exp[th(z_{0,k})] \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_{2n}(z_{0,k})(2n)!}{t^n 4^n n!} \sim C\varphi(t) \exp[-t/(2\tau_\sigma^*)] t^{-3/2}, \tag{73}$$

где C_{2n} – коэффициенты асимптотического разложения, $\varphi(t)$ – гармоническая функция ($|\varphi| < 1$).

Положение нулей функции $D(\omega, k)$ зависит от газодинамических параметров M_2, m^+ и величины магнитного поля $R_\sigma = 1/\tau_\sigma^*$ (параметра взаимодействия). Рассмотрим расположение границ устойчивости. Когда магнитное поле стремится к нулю ($\tau_\sigma^{-1} \rightarrow 0$), из уравнения (63) приходим к хорошо известному в газовой динамике результату [26], где при решении задачи с начальными данными возмущения затухают не экспоненциально, а степенным образом

$$\frac{\xi(t)}{\xi_0} \sim t^{-3/2}, \quad \frac{\xi(t)}{\xi(0)} \sim t^{-3/2}.$$

Проследим влияние магнитного поля на границы областей устойчивости.

Прежде всего, рассмотрим частный случай, когда

$$\tau_\sigma^* = 0.5M_2 \tag{74}$$

и, следовательно, зависят только от интенсивности ударной волны. При выполнении этого условия функция $D(\omega, k)$ является многочленом второй степени, и его корни с учетом $(1-m+2M_2 \neq 0)$ определяются как

$$\omega_{1,2} = \frac{\eta \pm \sqrt{\eta^2 - \delta(1+m)(1-m+2M^2)}}{1-m+2M^2}, \quad (75)$$

где

$$\eta = \frac{1}{4\tau_{\sigma}^*} \left[\frac{m(2\delta-1)+1}{\delta-1} \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) - 2M_2(\beta M_2 - 1) \right]. \quad (76)$$

Диапазон изменений параметра m

$$\Gamma_{st-} \equiv \Gamma < m < \Gamma_{st+} \equiv 1 + 2M_2, \quad (77)$$

где $\Gamma = \max(-1; \Gamma_1)$, $\Gamma_1 = \frac{1+2M_2(\delta-1)(1-\beta M_2)\gamma/\beta}{2\delta-1}$,

соответствует области устойчивости ионизирующей ударной волны.

Диапазоны

$$m < \Gamma_{st-} \quad \text{и} \quad m > \Gamma_{st+} = 1 + 2M_2 \quad (78)$$

соответствуют областям неустойчива плоской ударной волны.

Если $\Gamma_1 < 1$, то существует единственное значение параметра m (при этом $k = 0$)

$$m = 2\gamma M_2(\beta M_2 - 1)(\delta - 1)/[\beta(2\delta - 1) + 1], \quad (79)$$

при котором смещение поверхность разрыва изменяется по гармоническому закону — происходит генерация колебаний. Т.е. магнитное поле приводит к тому, что область нейтральных колебаний полностью исчезает или вырождается в точку.

При произвольном значении параметра взаимодействия $R_{\sigma} = (\tau_{\sigma}^*)^{-1}$ для оценки числа корней функции $D(\omega, k)$ (71), лежащих в правой полуплоскости, удобно использовать принцип аргумента. Точки ветвления функции $D(\omega, k)$ всегда лежат в левой полуплоскости, причем, и при условии $\tau_{\sigma}^* < 0.5M_2$, они находятся на отрицательной части действительной оси. При условии $\tau_{\sigma}^* \rightarrow \infty$ одна точка стремится к $-\infty$, а другая — к нулю слева. Можно показать, что как при условии $\tau_{\sigma}^* \gg 0.5M_2$, так и при условии $\tau_{\sigma}^* < 0.5M_2$ функция $D(\omega, k)$ имеет в правой полуплоскости хотя бы один корень, если выполнено условие (79).

Для малых значений параметра взаимодействия ($\tau_{\sigma}^* \ll 0.5M_2$) область устойчивости определяется неравенствами

$$\Gamma_{st-} = -1 < m < \Gamma_{st+} \equiv 1 + 2M_2. \quad (80)$$

При превышении критического значения параметра взаимодействия

$$\frac{1}{\tau_{\sigma}^*} > \frac{1}{\tau_-} = \frac{2\gamma(1-M_2^2)}{\beta(1+\gamma M_2^2)}$$

область устойчивости сужается.

Положение левой границы области устойчивости (правая граница $m > 1 + 2M_2$ от величины τ_{σ}^* не зависит и равняется $1 + 2M_2$). При условии $\tau_{\sigma}^* \ll 0.5M_2$ и выполнении неравенства

$$\Gamma_{st-} = \max(-1; \Gamma_2) < m^+ < \Gamma_{st+} = 1 + 2M_2,$$

где

$$\Gamma_2 = \left[1 + 2\gamma M_2^2(1-\beta)(\delta-1)/\gamma \right] (2\delta-1)^{-1} \quad (81)$$

функция $D(\omega, k)$ не имеет корней, лежащих в правой полуплоскости.

Из выше сказанного следует, что положение границ области устойчивости при больших параметрах взаимодействия определяется только интенсивностью ударной волны и не зависит от величины самого параметра взаимодействия, т.е. неустойчивости зависит от вида адиабаты Югонио.

Длина волны возмущения k влияет на положение границы области устойчивости только через

величину параметра взаимодействия $R_{\sigma} = (\tau_{\sigma}^*)^{-1}$.

Если в начальный момент времени заданы возмущение давления, скорости, плотности среды и плотности электрического тока, поведение амплитуды смещения по-прежнему определяется особенностями функции $D(\omega, k)$.

Суммируем результаты воздействия магнитного поля на устойчивость ионизирующей ударной волны, когда основным механизмом структурной неустойчивости являются особенности ударной адиабаты.

1. Для малых значений параметра взаимодействия ($\tau_{\sigma}^* \ll 0.5M_2$) область устойчивости определяется неравенствами

$$-1 < m < 1 + 2M_2,$$

т.е. вся область нейтральных колебаний, существующая без магнитного поля, переходит в область устойчивости. Это связано с затуханием возмущения скорости δU_2 за счет магнитной вяз-

кости $\frac{\sigma_2 B_2^2}{\rho_2}$.

2. Для сильной ударной волны ($M_1 \gg 1$) магнитное поле приводит к сужению области устойчивости

$$-1 < \Gamma_{st-} < m < \Gamma_{st+} = 1 + 2M_2.$$

Следует отметить, для идеального газа

$$-1 < \Gamma_{st-} < m < \Gamma_{st+} = 1 + 2M_2.$$

Следовательно, сильная ионизирующая ударная волна может оказаться структурно не устойчивой.

Полученные в этом разделе результаты показывают, что поперечное магнитное поле влияет

на структурную неустойчивость ударной волны, Теперь границы области устойчивости определяются как величиной $(\partial v/\partial P)_H$, так и величиной магнитной вязкости $\sigma_2 B_2^2/\rho_2$ (параметра взаимодействия). Совместное воздействие этих механизмов приводит к тому, что область устойчивости смещается, вбирая в себя область, нейтральных колебаний, существующей при отсутствии магнитного поля. Область устойчивости для малых значений параметра взаимодействия шире, чем область устойчивости для больших параметров. Протекание электрического тока, вызванного магнитным полем, приводит к тому, что амплитуда возмущения может затухать гораздо быстрее, чем в отсутствие магнитного поля. Как уже отмечалось, этот эффект объясняется влиянием так называемой, магнитной вязкости $\sigma_2 B_2^2/\rho_2$, связанной с флуктуацией скорости среды.

О роли других неустойчивостей, связанных с протеканием электрического тока и развивающихся в плазме за фронтом ударной волны. Если в области за фронтом ударной волны протекает электрический ток, то даже при структурной устойчивости ударной волны необходимо учитывать различные плазменные эффекты. Во-первых, следует учитывать, что коэффициент электропроводности является функцией термодинамических параметров среды. Во-вторых, протекание электрического тока приводит к джоулеву тепловыделению и, соответственно, неоднородности температуры плазмы [22, 23].

Для газовой плазмы электропроводность возрастает с ростом температуры $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_p \neq 0$. Если

ли $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_p > 0$ и параметр взаимодействия

$R_\sigma = \left(\tau_\sigma^*\right)^{-1} = \frac{\sigma_2 B_2^2}{\rho_2 U_2} k > 1$, то протекание электрического тока в области за фронтом волны может приводить к неустойчивостям перегретного типа, вызванными флуктуациями силы Ампера и джоулева тепловыделения. Эти неустойчивость могут возникать даже в совершенном газе. Подробный анализ этой ситуации, характерной для МГД-генераторов на ударных волнах, разобран в [39].

Качественно воспроизведем результаты [39] и рассмотрим влияние магнитного поля на устойчивость плазмы за фронтом ударной волны не связанную с повелением адиабаты Югонио. Здесь следует учесть, что протекание электрического тока все свойства за фронтом ударной волны зависят от координаты x из-за воздействия силы Ампера и джоулева тепловыделения. В этом случае флуктуации силы Ампера $\delta j_2 B_0 = \delta \sigma_2 U_2 B_2^2/\rho_2 =$

$= \sigma_2 U_2 B_2^2 \left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial T_2}\right)_p \delta T_2/\rho_2$ могут генерироваться возмущением температуры, связанной с зависимостью коэффициента электропроводности от температуры $\sigma_2(T_2)$ и магнитным полем.

Если джоулев нагрев приводит к неоднородности температуры

$$\frac{dT_2}{dx} \approx (1-k)^2 \frac{\sigma_2 (U_2 B_0)^2}{\lambda_2} x, \quad x \geq 0, \quad (82)$$

то при условии

$$\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_p > \left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_{pcr} = \frac{\lambda_2 T_2}{4(1-k)^3 \rho_2 U_2^3 a_2} \quad (83)$$

развивается неустойчивость, в которой возмущения изменяются во времени по закону:

$$\delta U_2(x, t) = C \exp \left[i(kx + a_2 t) + \left(\sigma_2 B_2^2 / 2\rho_2 \right) \times \sqrt{(1-k)^3 \frac{\rho_2 U_2^3}{\lambda_2 T_2} a_2 \left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2} \right)_p t^{3/2}} \right], \quad (84)$$

где λ_2 – коэффициент теплопроводности плазмы, a_2 – скорость звука. Здесь учтено изменение области нагретого газа за фронтом волны.

Из выражения (84) следует, что при условии (83) ситуация меняется. Если ранее в устойчивой ударной волне без магнитного возмущения затухают по закону $\xi \sim t^{-3/2}$, то при наличии магнитного поля возмущения могут нарастать экспоненциально $\xi \sim \exp(t^{3/2})$. На рис. 10 представлена зависимость параметра $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_{pcr}$ от скорости ударной волны в аргоне [39]. Заштрихована область устойчивости.

Когда область магнитного поля ограничена, следует иметь в виду, что неустойчивость носит конвективный характер [1] и может не успеть развиваться. В тех случаях, когда ударная волна формируется разлетающимися плотными продуктами взрыва конденсированного взрывчатого вещества, в среде за фронтом может развиваться неустойчивость Рэлея–Тейлора, которая здесь не рассматривается.

ЗАДАЧИ О СТРУКТУРЕ УДАРНЫХ ВОЛН

Структура ударной волны без магнитного поля. В ряде задач связь между характеристиками сред перед фронтом ударной волны и за ним можно установить, рассматривая структуру переходного слоя L (рис. 11). Такой непрерывный переход происходит в диапазоне нескольких длин свободного пробега и, строго говоря, его следует рассматривать в рамках кинетической теории. Структуру ударной волны можно рассчитать, используя решения уравнения Больцмана 13-момент-

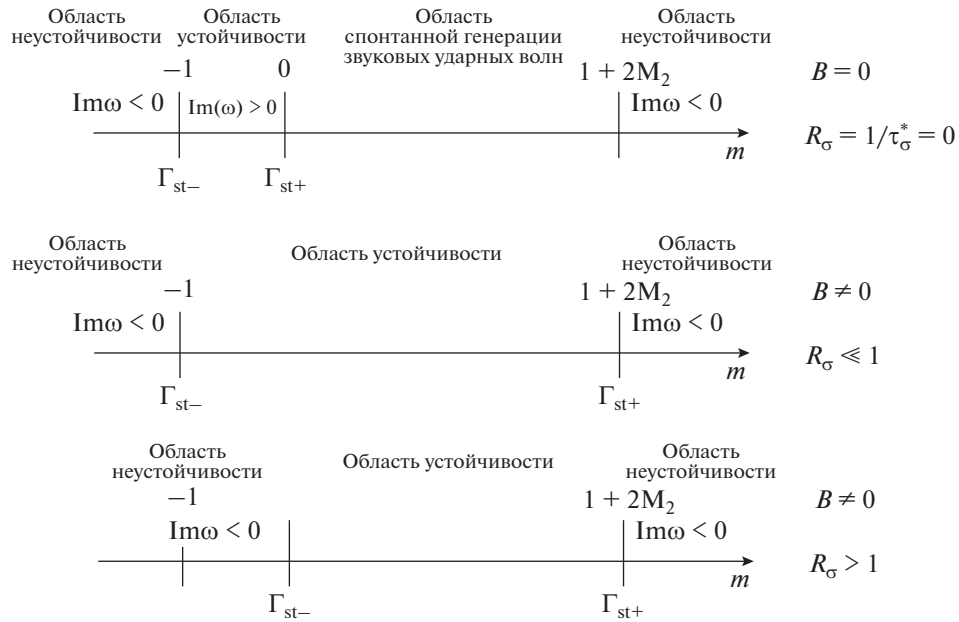


Рис. 10. Влияние магнитного поля на расположение областей неустойчивости в зависимости от параметра m .

ным методом Грэда. Однако существуют подходы, в рамках которых используются уравнения сплошной среды. Исследования, относящиеся к различным вопросам о структуре ударных волн без магнитного поля, содержатся в работах [27, 28, 50–54].

Сначала рассмотрим более подробно задачу, о непрерывном стационарном переходе во фронте ударной волны без магнитного поля. Задача о непрерывном переходе от однородного состояния перед волной к однородному состоянию за ней носит название задачи о структуре ударной волны. Решение этой задачи позволяет выявить поведение свойств среды в структуре ударной волны. Рассмотрим подход к решению задачи о структуре ударной волны с использованием системы уравнений Навье–Стокса, учитывая влияния вязкости и теплопроводности. Несмотря на то, что фронт ударной волны тонкий и составляет несколько длин свободного пробега молекулы $l_{с.п.}$, скорость, давление и температура претерпевают значительные изменения (рис. 11). В простейшем случае стационарная система уравнений Навье–Стокса, используемых для описания структуры фронта ударной волны, записанная в системе координат движущегося с постоянной скоростью фронта имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho U_x)}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(P + \rho U_x U_x - \eta \frac{\partial U_x}{\partial x} \right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(P + \rho U_x - \eta \frac{\partial U_x}{\partial x} \right) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho U_x \left(\frac{U_x^2}{2} + h \right) - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] &= 0. \end{aligned} \tag{85}$$

Здесь η – коэффициент динамической вязкости, λ – коэффициент теплопроводности. Следует пояснить отсутствие диссипативного члена в уравнении энергии. Он отсутствует, т.к. уравнение записано относительно полной энтальпии h . Изменение полной энтальпии автоматически учитывает вклад от изменения состава и температуры при нагреве за счет диссипации скорости и протекания хи-

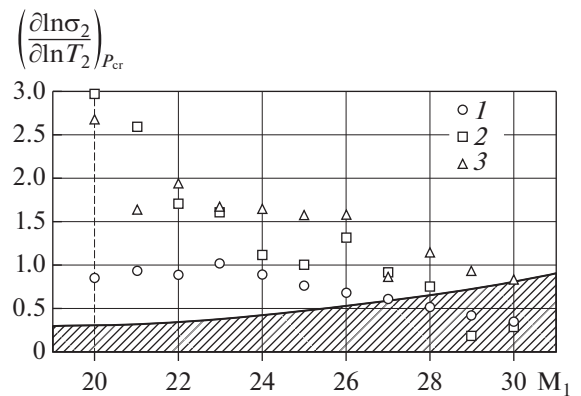


Рис. 11. Зависимость $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2} \right)_{P_{cr}}$ от скорости ударной волны в аргоне [39]. Точками обозначены значения параметра $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2} \right)_{P_{cr}}$ в зависимости от начального давления аргона перед фронтом ударной волны: 1 – 10 мм рт. ст.; 2 – 1.0 мм рт. ст.; 3 – 0.1 мм рт. ст.; сплошная линия $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2} \right)_{P_{cr}}$, заштрихованная область – зона устойчивости.

мических реакций. Например, при протекании химической реакции или ионизации газа происходит изменение состава среды и ее суммарной энтальпии.

Систему уравнений (85) можно упростить, проинтегрировав один раз. Интегрирование первого уравнения системы (85) приводит, как и раньше в (30), к получению одного инварианта в структуре фронта ударной волны – постоянству потока массы:

$$\rho U_x = G = \text{const.}$$

Из второго уравнения системы (85) получаем

$$\frac{\partial U_x}{\partial x} = (P(T, \rho = G/U_x) + GU_x - I)/\eta, \quad (86)$$

$$I = \text{const.}$$

Здесь $I = \text{const}$ – поток импульса, который должен быть определен из граничных условий.

Из третьего уравнения системы (85), используя связь между энтальпией и температурой $h(P(T, \rho))$, получаем еще одно уравнение, описывающее изменение температуры в структуре волны:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \left[G \left(\frac{U_x^2}{2} + h(P(T, \rho), \rho = G/U_x) \right) - \Pi \right] / \lambda. \quad (87)$$

Здесь $\Pi = \text{const}$ – поток энергии, который должен быть определен из граничных условий.

С использованием уравнения состояния, энтальпию можно представить в виде функция температуры и плотности $h(P(T, \rho))$ или температуры и скорости $\rho = G/U_x$.

Вводим вектор

$$\mathbf{q}(x) = (U_x(x), T(x)), \quad (88)$$

Сведем задачу о структуре ударной волны к решению следующей системы обыкновенных уравнений:

$$\frac{d\mathbf{q}}{dx} = \mathbf{F}(\mathbf{q}, G, I, S). \quad (89)$$

Здесь

$$\mathbf{F} = \left((P(T, \rho = G/U_x) + GU_x - I)/\eta, \left[G \left(\frac{U_x^2}{2} + h(P(T, \rho), \rho = G/U_x) \right) - S \right] / \lambda \right). \quad (90)$$

Эту систему необходимо дополнить граничными условиями перед и за фронтом ударной волны. Можно считать, что состояния среды перед фронтом и за ним однородны и, соответственно, находятся в точках $x = \pm\infty$:

$$x \rightarrow \pm\infty: \frac{\partial U_x}{\partial x} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial T}{\partial x} \rightarrow 0. \quad (91)$$

Математические аспекты решения такой задачи для системы дифференциальных уравнений (89) можно найти [55, 56]. Они состоят из определения тип особых точек и условий непрерывного перехода

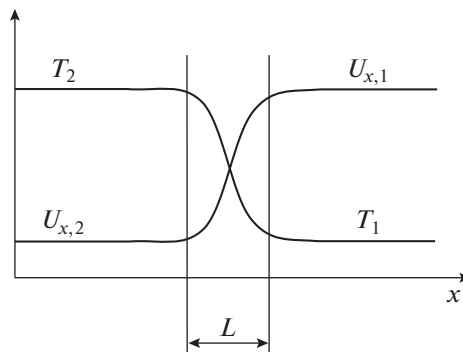


Рис. 12. Профиль температуры и скорости внутри ударной волны и ее некоторой окрестности; L – “толщина” ударной волны (величина порядка нескольких длин свободного пробега молекулы $l_{c.п.}$).

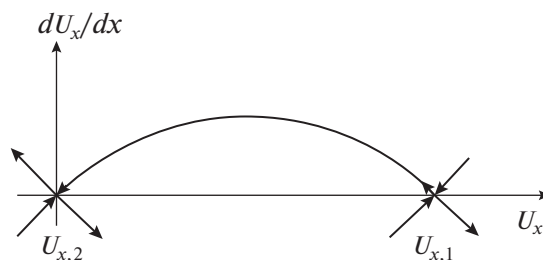


Рис. 13. Фазовый портрет структуры ударной волны.

между ними. Для определения тип особых точек чего линейризуем систему уравнений (92) относительно малых возмущений. Из анализа особых точек следует, если выполняются условия

$$U_{x,1} > a_{s0}^{(1)} \equiv \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{s=s_1}} \quad \text{и} \quad U_{x,2} < a_{s0}^{(2)} \equiv \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{s=s_2}}, \quad (92)$$

то особые точки при $x = +\infty$ и $x = -\infty$ являются седлами. Проекция фазового портрет дифференциального уравнения (89) на плоскость U_x, x представлена на рис. 12. Структура ударной волны соответствует сепаратрисе, выходящей из точки 1 перед волной и входящей в точку 2 – за волной (рис. 13).

Характерный размер фронта ударной волны можно оценить следующим образом:

$$L \approx \frac{U_{x,1} - U_{x,2}}{\partial U_x / \partial x} \approx (10 - 100) l_f, \quad L \approx \frac{U_{x,1} - U_{x,2}}{\partial U_x / \partial x} \approx (10 - 100) l_{c.п.},$$

где l_f – длина свободного пробега частиц.

Из этой оценки следует, что структура ударной волны превышает несколько длин свободного пробега и переход из состояния перед волной в состояние за ней можно заменить разрывом. Решение задачи о структуре ударной волны в газе ничего не добавляет к полученным ранее соотношениям между состоянием перед и за фронтом,

полученным из законов сохранения потоков массы, импульса и энергии. Однако существует большой класс задач (детонационные волны, магнитогазодинамические ионизирующие ударные волны и др.), в которых соотношений, вытекающих из законов сохранения потоков массы, импульса и энергии не хватает, чтобы определить скорость волны и связи между параметрами перед и за разрывом. В этом случае решение задачи о структуре такой волны позволяет найти дополнительные соотношения и связать параметры перед волной с параметрами за ней.

СТРУКТУРА ИОНИЗУЮЩЕЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

При анализе структуры ионизирующей ударной волны с учетом изменяющегося магнитного поля кроме уравнений для потоков массы, импульса и энергии (82)–(84) следует учитывать дополнительные соотношения для электрического и магнитного полей, вытекающие из уравнений Максвелла. В этом случае, считая, что ударная волна движется в направлении оси x $\mathbf{U}(U_x, 0, 0)$, и учитывая лишь одну компоненту поперечного магнитного поля $\mathbf{B}(0, 0, B_z(x))$, вместо системы уравнений (82)–(84) получаем следующую:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho U_x)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(P + \rho U_x U_x - \eta \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial B_z}{\partial x} B_z \right) &= 0, \quad (93) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho U_x \left(\frac{U_x^2}{2} + h \right) - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + E_y B_z \right] &= 0, \end{aligned}$$

к которой должны быть добавлены соотношения, вытекающие из уравнений Максвелла

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial B_z}{\partial x} = -\mu_0 j_y = -\mu_0 \sigma (E_y - U_x B_z). \quad (94)$$

Здесь μ_0 – магнитная проницаемость вакуума, σ – коэффициент электропроводности плазмы.

Отсутствие диссипативного члена в уравнении сохранения потока энергии связано с тем, что при конечном значении электрического тока i_y и больших значениях коэффициент электропроводности плазмы σ , слагаемом j_y^2/σ можно пренебречь по сравнению с $\frac{\partial}{\partial x} E_y B_z$. Изменение состава среды, связанное с протеканием реакции термической ионизации нужно учесть в энтальпии.

Вводя трехкомпонентный вектор

$$\mathbf{q}(x) = (U, T(x), U_x(x)). \quad (95)$$

Можно свести задачу о структуре ударной волны к решению следующей системы обыкновенных уравнений:

$$\frac{d\mathbf{q}}{dx} = \mathbf{F}(\mathbf{q}, G, I, \Pi, E_y).$$

Здесь трехкомпонентный вектор \mathbf{F} имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{F} = & \left(\left(P(T, \rho = G/U_x) + GU + \frac{B_z^2}{2\mu_0} - I \right) / \eta, \right. \\ & \left[G \left(\frac{U_x^2}{2} + h(P(T, \rho), \rho = G/U) \right) + E_y B_z - \Pi \right] / \lambda - \\ & \left. - \mu_0 \sigma (E_y - U_x B_z) \right). \quad (96) \end{aligned}$$

Здесь $G = \text{const}$ – расход плазмы, $I = \text{const}$ – поток импульса, $\Pi = \text{const}$ – поток энергии, $E_y = \text{const}$, которые должны быть определены при решении задачи о нахождении структуры ионизирующей волны из граничных условий.

Граничные условиями перед фронтом ударной волны и за ним находятся в точках $x = \pm\infty$, соответствующих однородным состояниям среды перед фронтом ионизирующей ударной волны и за ним:

$$x \rightarrow \pm\infty: \frac{\partial U_x}{\partial x} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial T}{\partial x} \rightarrow 0, \quad \frac{\partial B_z}{\partial x} \rightarrow 0. \quad (97)$$

Следовательно, состояния среды перед фронтом и за ним являются точками равновесия (особыми точками [55, 56]) системы (89) $\mathbf{F} = 0$ и связаны между собой уравнениями:

$$\begin{aligned} P(T, \rho = G/U_x) + GU + \frac{B_z^2}{2\mu_0} &= I, \\ \frac{U_x^2}{2} + h(P(T, \rho), \rho = G/U_x) + E_y B_z &= \Pi G, \quad (98) \\ U_x B_z &= E_y. \end{aligned}$$

Как и ранее, используя уравнение состояния, энтальпию можно представить в виде функции температуры и плотности $h(P(T, \rho))$ или температуры и скорости $\rho = G/U_x$.

В точке $x = \infty$ известны следующие параметры системы P_1, ρ_1, B_{z1} , по которой движется ударная волна со скоростью $U_{x1} = D$, которая определяется в процессе решения задачи. Если считать, что в особой точке $x = -\infty$ параметры системы $T_2(P_2, \rho_2), U_{x2}, B_{z2}$ (соответственно $T_2(P_2, \rho_2)$), то трех уравнений (98) не хватает, чтобы зная лишь $T_1(P_1, \rho_1)$, определить две величины за фронтом $T_2(P_2, \rho_2), U_{x2}, B_{z2}$ и скорость самой ударной волны $U_{x1} = D$. Учитывая, что структура ударной волны соответствует переходу в фазовом пространстве U_x, T, B_z, x из одной особой точки системы в другую ее особую точку. Вновь задача сводится к известной задаче на собственные значения $U_{x1} = D$ для системы дифференциальных уравнений (89) [56, 57], однако в пространстве большей размерности.

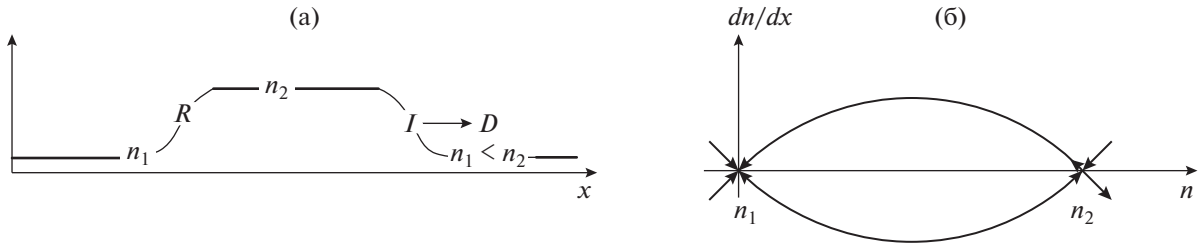


Рис. 14. Изменение концентрации электронов (а) в слоевой волне, состоящей из фронтов ионизации I и рекомбинации R , которые соединяют два однородных состояния n_1, n_2 , структура слоевой волны (б), стрелками указаны направления входа (выхода) в (из) в особые точки структуры n_1, n_2 .

Решение задач о структуре ионизирующей ударной волны можно найти в работах [5, 46, 47, 57, 58] и в литературе, указанной в них.

Более сложные структуры типа ударных волн могут возникать в двухтемпературной газовой плазме с магнитным полем и в полупроводниках. Описание такой среды состоит из уравнений сплошной среды отдельно для электронов и тяжелых частиц (атому и ионы). В таких системах наряду одинарными ударными волнами ионизации и рекомбинации плазмы, могут образовываться, своеобразные слоевые волны ионизации и рекомбинации (кинки). В такой волне передний фронт соответствует волне ионизации, а в задний – рекомбинации (рис. 14) [59, 60]. Слоевая волна распространяется с постоянной скоростью D , на переднем фронте волны происходит ионизация, где концентрация электронов изменяется от n_1 до $n_2 > n_1$. На заднем фронте происходит рекомбинация, где концентрация электронов изменяется от n_2 до $n_1 < n_2$. Эти волны аналогично волгам, возникающим в плазме полупроводников [61].

Использование вышеизложенного подхода оказывается продуктивным и при исследовании влияния магнитного поля на детонационные волны. Например, в экспериментальных и теоретических исследованиях [62] было показано, что наличие поперечного магнитного поля влияет на критический диаметр канала, в котором происходит

движение детонационной волны. Более детальные исследования различных эффектов, связанных с детонационными волнами можно найти в работе [63]. При достаточно высоких плотностях среды за фронтом ионизирующей ударной волны следует учитывать эффекты не идеальности плазмы в уравнение состояния и их влияние на переносные и оптические процессы. Обсуждение вкладов не идеальности плазмы в различные свойства плотной плазмы можно найти в работах В.Е. Фортова [4, 64]. Оптические процессы в ударных волнах детально обсуждаются в [2].

Вывод граничного условия для электрического тока в задаче об устойчивости ударной волны в поперечном магнитном поле. Представим вывод граничного условия (60). Из уравнений $\text{div}(\delta j) = 0$ приходим к следующему соотношению:

$$\frac{\partial j_y}{\partial x} - \frac{\partial j_x}{\partial y} = \frac{\sigma B}{\rho a^2} \left(\frac{\partial P}{\partial t} + U \frac{\partial P}{\partial x} \right). \quad (99)$$

Считаем, что область перед фронтом обладает малой, но конечной проводимостью σ_1 и возмущение поверхности разрыва имеет вид $\xi(t; y)$. Перейдем к новой системе координат путем замены переменных (рис. 15)

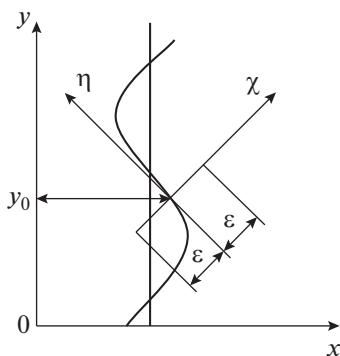


Рис. 15. Возмущение плоского фронта ударной волны.

$$\chi = x - \xi(y_0; t) - \frac{\partial \xi}{\partial y} (y - y_0),$$

$$\eta = (x - \xi) \frac{\partial \xi}{\partial y} + (y - y_0), \quad \tau = t.$$

В результате замены уравнение (99) примет вид

$$\frac{\partial j_y}{\partial \chi} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial j_y}{\partial \eta} + \frac{\partial j_x}{\partial \chi} \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{\sigma B}{\rho a^2} \left\{ \frac{\partial P}{\partial \tau} - \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial P}{\partial \chi} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial t \partial y} \left[(x - \xi) \frac{\partial P}{\partial \eta} - (y - y_0) \frac{\partial P}{\partial \chi} \right] + U \left[\frac{\partial P}{\partial \chi} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial P}{\partial \eta} \right] \right\}.$$

Умножая это уравнение на $d\chi$, интегрируя от $-\epsilon$ до $+\epsilon$ и затем, устремляя ϵ к нулю, получим

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial j_y}{\partial \chi} d\chi &= \{j_y\} \equiv j_{y,2} - j_{y,1}, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial j_x}{\partial \chi} d\chi &= \frac{\partial \xi}{\partial y} (j_{x,2} - j_{x,1}), \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left\{ \frac{\sigma B}{\rho a^2} \left(U - \frac{\partial \xi}{\partial t} \right) \frac{\partial P}{\partial \chi} \right\} d\chi &= \\ &= \left\langle \frac{\sigma B}{\rho a^2} \left(U - \frac{\partial \xi}{\partial t} \right) \right\rangle (P_2 - P_1). \end{aligned}$$

Здесь скобки $\langle \rangle$ означают среднее на отрезке интегрирования. При равной нулю проводимости в области перед поверхностью разрыва последнее соотношение может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\sigma B}{\rho a^2} \left(U - \frac{\partial \xi}{\partial t} \right) \right\rangle (P_2 - P_1) &= \\ = \frac{\sigma_2 B}{2\gamma_2 P_2} \left(U_2 - \frac{\partial \xi}{\partial t} \right) (P_2 - P_1). \end{aligned} \tag{100}$$

Остальные интегралы при $\varepsilon \rightarrow 0$ стремятся к нулю:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial j_y}{\partial \eta} d\chi &= \left\langle \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial j_y}{\partial \eta} \right\rangle 2\varepsilon = 0, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\sigma B}{\rho a^2} \frac{\partial P}{\partial \tau} d\chi &= \left\langle \frac{\sigma B}{\rho a^2} \frac{\partial P}{\partial \tau} \right\rangle 2\varepsilon = 0. \end{aligned}$$

Проведя линеаризацию полученных соотношений и учитывая, что в области перед поверхностью разрыва электрические токи отсутствуют, из уравнения (100) приходим к (60).

Когда необходимо учитывать влияние индуцированного магнитного поля (магнитное число Рейнольдса произвольно), вид граничного условия (60) изменяется.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обсуждаются эффекты, связанные с влиянием внешнего постоянного магнитного поля на слабые и сильные разрывы в газовых средах, обладающие конечной электропроводимостью. Показано, что в газовых средах с конечной электропроводностью магнитное поле не оказывает влияние на скорость их перемещения слабых разрывов.

Для случая без магнитного поля воспроизведен вывод характер положения границ между областями устойчивости, неустойчивости и генерации колебаний в зависимости от ее интенсивности ударной волны и вида адиабаты Гюгионо — производной $\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_H$.

Проведен детальный анализ влияния внешнего магнитного поля на устойчивость плоской ионизирующей ударной волны.

Показано, что могут существовать два независимых механизма, приводящих к неустойчивости: а) первый механизм связан с особенностями адиабаты Гюгионо, приводит к структурной неустойчивости; б) второй тип неустойчивости вызывается возмущением силы Ампера и зависимостью электропроводности от температуры $\sigma_2(T_2)$ (она не связана с особенностями адиабаты Гюгионо). Второй случай соответствует известной плазменной неустойчивости, он может реализоваться при больших значениях параметра взаимодействия в сильных ударных волнах и приводить к генерации вторичной ударной волны в нагретом газе.

Проведен детальный анализ роли влияния внешнего, постоянного магнитного поля на структурную неустойчивость, связанную с особенностями адиабаты Гюгионо. Показано, что положение границ областей устойчивости зависит теперь от газодинамических параметров M_2 , $m \approx 1/\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_H$, M_2 , m^+ и величины магнитного поля — параметра взаимодействия $R_\sigma = 1/\tau_\sigma^*$.

Для малых значений параметра взаимодействия область устойчивости расширяется за счет того, что к области устойчивости ударной волне без магнитного поля присоединяется область нейтральных колебаний, т.е. бывшая область генерации звука при наличии магнитного поля исчезает. Если параметр взаимодействия превышает критическое, то область устойчивости сужается. В области устойчивости возмущения затухают по закону $\exp[-t/(2\tau_\sigma)]t^{-3/2}$.

Для сильной ударной волны ($M_1 \gg 1$) магнитное поле приводит к тому, что область нейтральных колебаний вырождается в точку или полностью исчезает.

Обсуждается перегревная неустойчивость, вызванная возмущением силы Ампера, неоднородностью температуры и зависимостью электропроводности от температуры ($\sigma_2(T_2)$). Она возникает, если электропроводность возрастает с ростом температуры $\left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_p > \left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_{p_{cr}} > 0$ и параметр взаимодействия превышает некоторое критическое значение. В сильных ударных волнах с учетом изменения области ударно нагретой проводящей плазмы возмущения нарастают по закону

$$\begin{aligned} C \exp[i(kx + a_2 t) + (\sigma_2 B_2^2 / 2\rho_2) \times \\ \times \sqrt{(1-k)^3 \rho_2 U_2^3 / \lambda_2 T_2} a_2 \left(\frac{\partial \ln \sigma_2}{\partial \ln T_2}\right)_p t^{3/2}]. \end{aligned}$$

Эта неустойчивость не связана с видом ударной адиабаты и может развиваться в интенсивных

ударных волнах в идеальном газе, когда плазма образуется за счет термической ионизации.

Обсуждается влияние поперечного магнитного поля на структуру плоской ионизирующей ударной волны. Показано, как изменяются границы области устойчивости, Обсуждаются условия, когда необходим учет собственного магнитного поля.

Дан вывод граничного условия для электрического тока в задаче об устойчивости ударной волны в поперечном магнитном поле.

Автор благодарит В.С. Филинова за представления ряда материалов и комментариев.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 733 с.
2. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 686 с.
3. Кочин Н.Е. Ударные волны в жидкости. Собр. соч. Т. 1. М.—Л.: Изд-во АН СССР, 1948.
4. Фортвов В.Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе. М.: Физматлит, 2009. 404 с.
5. Куликовский А.Г., Любимов Г.А. Магнитная гидродинамика. М.: Логос, 2005. 325 с.
6. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. I—IV / Под ред. Фортова В.Е. М.: Наука/Интерпериодика, 2000.
7. Синкевич О.А. Волны и неустойчивости в сплошных средах. Уч. пособ. М.: Изд-во МЭИ, 2016. 263 с.
8. Артемов В.И., Левитан Ю.С., Синкевич О.А. Неустойчивости и турбулентность в низкотемпературной плазме. М.: Изд-во МЭИ, 1994. 412 с.
9. Исакович М.И. Общая акустика. М.: Наука, 1973. 495 с.
10. Куликовский А.Г. О волнах Римана в магнитной гидродинамике // Докл. АН СССР 1958. Т. 121. № 6. С. 987.
11. Сибгатуллин Н.Р. О нелинейном механизме возбуждения ударных волн в ограниченной системе при резонансных поперечных колебаниях // Изв. АН СССР. МЖГ. 1976. № 2. С. 131.
12. Синкевич О.А. Акустические волны в плазме и твердом теле. М.: Изд-во МЭИ, 2007. 91 с.
13. Синкевич О.А., Стаханов И.П. Физика плазмы. М.: Высш. шк., 1991. 191 с.
14. Филинов В.С. Корреляционные эффекты в плазменных средах. Автореф. докт. дис. ... физ.-мат. наук. М.: ОИВТ РАН, 2006. 92 с.
15. Bezukrovniy V., Filinov V., Kremp D., Bonitz M., Shlanges M., Kraeft W.-D., Fortov V. Monte Carlo Results for the Hydrogen Hugoniot // Phys. Rev. E. 2004. V. 70. Iss. 5. P. 05740.
16. Miltzer B., Ceperley D.M. Path Integral Monte Carlo Calculation of the Deuterium Hugoniot // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. Iss. 9. P. 1890.
17. Collins G., Da Silva L., Celliers P., Gold D., Foord M., Wallace R., Ng A., Weber S., Budil K., Cauble R. Measurements of the Equation of State of Deuterium at the Fluid Insulator-Metal Transition // Science. 1998. V. 281. Iss. 5380. P. 1178.
18. Knudson M.D., Hanson D.L., Bailey J.E., Hall C.A., Asay J.R., Anderson W.W. Equation of State Measurements in Liquid Deuterium to 70 GPa // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. Iss. 22. P. 225501.
19. Nellis W., Mitchell A., van Thiel M., Devine G., Trainor R. // J. Chem. Phys. 1983. V. 79. P. 1480.
20. Boriskov G.V., Bykov A.I., Il'kaev R.I., Selemir V.D., Sitakov G.V., Trunin R.F., Urlin V.D., Shuikin A.N. // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 092104.
21. Кузнецов Н.М. Термодинамические функции и ударные адиабаты воздуха при высоких температурах. М.: Машиностроение, 1965.
22. Синкевич О.А. Нестационарные течения с ударными волнами в канале МГД-генератора. МГД-метод получения энергии. М.: Наука, 1972. С. 58.
23. Попель О.С., Синкевич О.А. К вопросу о предельных значениях энергии, генерируемой импульсными МГД-преобразователями // ТВТ. 1977. Т. 15. № 2. С. 38.
24. Сахаров А.Д., Зайдель Р.М., Минаев В.Н., Олейник А.Г. // Докл. АН СССР. 1964. Т. 159. № 6.
25. Кузнецов Н.М. Устойчивость ударных волн // УФН. 1989. Т. 159. № 3. С. 493.
26. Дьяков С.П. Об устойчивости ударных волн // ЖЭТФ. 1954. Т. 27. № 3. С. 288.
27. Дьяков С.П. Ударные волны в релаксирующей среде // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. С. 1525.
28. Дьяков С.П. Ударные волны в бинарных смесях // ЖЭТФ. 1954. Т. 27. № 3. С. 283.
29. Конторович В.М. К вопросу об устойчивости ударных волн // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. № 6. С. 1525.
30. Конторович В.М. // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. № 6.
31. Freeman N.C. // Proc. Roy. Soc. A. 1955. V. 233. P. 1174.
32. Асланов С.К. // Докл. АН СССР. 1963. № 3. С. 169; 1966. № 3; 1966. № 8. С. 1115; 1968. Т. 33. № 1. С. 178.
33. Барышников А.С., Скворцов Г.Е. Неустойчивость ударных волн, в релаксирующей среде. // ПМТФ. 1979. Т. 49. Вып. II. С. 2483.
34. Зайдель Р.М. // ПМТФ. 1967. № 4. С. 30; ПММ. 1960. № 2. С. 24.
35. Иорданский С.В. Об устойчивости плоской стационарной ударной волны // ПММ. 1957. Т. 21. Вып. 4. С. 30.
36. Арутюнян Г.М., Гольданский В.И., Кузнецов Н.М., Рухадзе А.А., Синкевич О.А., Соломина Н.Л., Степанова Л.Г. Сергей Петрович Дьяков и его вклад в науку // УФН. 1993. Т. 161. № 9. С. 110.
37. Щелкин К.И. Два случая неустойчивого горения // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. № 2. С. 600.
38. Барышников А.С., Бедин А.П., Масленников В.Г., Мишин Г.И. О неустойчивости фронта головной ударной волны // Письма ЖТФ. 1979. Т. 5. Вып. 5. С. 281.
39. Синкевич О.А. Устойчивость фронта плоской ударной волны при малых магнитных числах Рейнольдса // ТВТ. 1969. Т. 7. № 6. С. 1126.
40. Синкевич О.А. Устойчивость плоской ионизирующей ударной волны // Докл. АН СССР. 1971. Т. 199. № 1. С. 48.
41. Синкевич О.А. Устойчивость плоской ионизирующей ударной волны контактного разрыва. В сб.: Теплообмен и физическая газодинамика. М.: Наука, 1972.

42. Синкевич О.А. Устойчивость плоской ионизирующей ударной волны в магнитном поле // Изв. АН СССР. МЖГ. 1972. № 1. С. 122.
43. Зубцов В.М., Синкевич О.А. Границы устойчивости ударной волны в поперечном магнитном поле // ТВТ. 1975. Т. 13. № 6. С. 1286.
44. Синкевич О.А. Неустойчивости в низкотемпературной плазме. М.: Изд-во МЭИ, 1971. 37 с.
45. Джозеф Д. Устойчивость движений жидкости. Пер. с англ. Беляева Ю.Н., Яворской И.М. / Под ред. Петрова Г.И. М.: Мир, 1981. 638 с.
46. Бармин А.А., Куликовский А.Г. Об ударных волнах, ионизирующих газ при наличии произвольно ориентированного магнитного поля. В сб.: Проблемы гидродинамики и механики сплошной среды. М.: Наука., 1969. С. 3.
47. Taussig R. T. Normal Ionizing Shock Waves with Equilibrium Chemistry in Hydrogen // Phys. Fluids. 1966. V. 9. № 3. P. 421.
48. Йосс Ж., Джозеф Д. Элементарная теория устойчивости и бифуркации. Пер. с англ. Рубановского В.Н. / Под ред. Моисеева Н.Н. М.: Мир, 1983. 300 с.
49. Коул Дж. Методы возмущения в прикладной математике. Пер. с англ. Державиной А.И., Диесперова В.Н. / Под ред. Рыжова О.С. М.: Мир, 1972. 274 с.
50. Арутюнян Г.М. О структуре слабых ударных волн в релаксирующих средах // ПМТФ. 1969. № 2. С. 110.
51. Арутюнян Г.М., Овсепян С.Т. Структура слабых ударных волн при фазовых переходах первого рода // Изв. АН СССР. МЖГ. 1980. № 4. С. 55.
52. Арутюнян Г.М. Слабые ударные волны в терморелаксирующей среде // Докл. АН СССР. 1969. Т. 185. № 4. С. 778.
53. Рухадзе А.А., Силаков В.П., Чебатарев А.В. Распространение нестационарных ударных волн в колебательно-возбужденном азоте // Краткие сообщения по физике. 1983. № 6. С. 18.
54. Бедарев И.А., Федоров А.В. Структура и устойчивость ударной волны в газозвеси с двумя давлениями // Вычислительные технологии. 2015. Т. 20. № 2. С. 4.
55. Арнольд В.И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1974. 431 с.
56. Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И., Майер А.Г. Теория бифуркаций динамических систем на плоскости. М.: Наука, 1967. 487 с.
57. Gross V.A. Strong Ionizing Shock Waves // Rev. Mod. Phys. 1957. V. 37. № 4. P. 724.
58. Ахизер А.И., Любарский Г.Я., Половин Р.В. Об устойчивости ударных волн в магнитной гидродинамике // ЖЭТФ. 1958. Т. 25. № 3. С. 731.
59. Синкевич О.А. Волны ионизации и рекомбинации в неравновесной замагниченной плазме // ПММ. 1973. Т. 37. № 5. С. 830.
60. Синкевич О.А. Характер потери устойчивости в неравновесной замагниченной плазме // ПММ. 1974. Т. 38. № 4. С. 656.
61. Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Миронов А.Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 414 с.
62. Popov V.A., Zhimerin D.G., Mironov E.A., Kiselev Yu.N., Sinkevich O.A. Some Technical Aspects of Gaseous Detonation // Acta Astronautica. 1974. V. 1. № 9. P. 1201.
63. Баженова Т.В., Гвоздева Л.Г., Лагутов Ю.П., Ляхов В.Н., Фаресов Ю.В., Факеев В.П. Нестационарные взаимодействия ударных и детонационных волн. М.: Наука, 1986. 314 с.
64. Ebeling W., Fortov V.E., Filinov F.S. Quantum Statistic of Dense Gases and Nonideal Plasmas. Springer Int. Publ., 2017. 562 p.

УДК 532.529

РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕРХКОРОТКОГО ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИМПУЛЬСА С ВЫСОКОЙ АМПЛИТУДОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ОБРАЗЦЕ КРЕМНИЯ

© 2021 г. А. А. Юркевич¹ *, А. В. Овчинников², М. Б. Агранат²¹ООО “Инрегмед”, Москва, Россия²Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: aayurk12@gmail.com

Поступило в редакцию 29.06.2021 г.

После доработки 29.06.2021 г.

Принято к публикации 23.11.2021 г.

Представлена расчетная модель динамики ТГц-импульса, падающего на образец беспримесного кремния, с амплитудой электрического поля до 23 МВ/см. Показано, что движении двухпериодного ТГц-импульса будет сопровождаться в результате ударной ионизации резким ростом концентрации свободных носителей до уровня $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ на входной поверхности и медленным спадом по глубине до $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ на выходе из образца. Показана необходимость подтверждения расчетной модели экспериментальными измерениями скорости ударной ионизации при заданных параметрах ТГц-импульса.

DOI: 10.31857/S0040364421060193

ВВЕДЕНИЕ

Генерация свободных носителей заряда в полупроводниках, происходящая при воздействии субпикосекундными ТГц-импульсами с высокой амплитудой электрического поля, представляет значительный интерес в области физики полупроводников, а также в прикладных задачах создания сверхбыстрых электронных и оптоэлектронных устройств [1–5].

Основным механизмом генерации свободных носителей является ударная ионизация. Исследования механизма ударной ионизации в кремнии, вызванной электрическими полями ТГц-импульса до 3.6 МВ/см, проводились в работах [2, 3], где было показано, что скорость ионизации сильно зависит от начальной концентрации свободных носителей и уменьшается с увеличением начальной концентрации. В [4] с помощью метода Монте-Карло исследуется механизм ударной ионизации в InAs, вызванной однопериодным ТГц-импульсом. Рассмотрена зависимость порога ударной ионизации от частоты и длительности импульса. В работе [5] исследовались процессы, связанные с ударной ионизацией в кристалле GaAs, вызванные воздействием ТГц-импульсами с напряженностью электрического поля до 1 МВ/см.

В связи с возникновением новых методов генерации малопериодных ТГц-импульсов с напряженностью поля, достигающей максимальных значений 25–30 МВ/см [1], представляет интерес проведение численного анализа задачи

движения ТГц-импульса в полупроводниковом материале (кремнии) и происходящих при этом процессов генерации свободных носителей.

В данной работе представлены результаты численного моделирования динамики процесса образования электрон-дырочных пар в кремнии при воздействии на него ТГц-импульса с максимальной напряженностью электрического поля до 23 МВ/см.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ИМПУЛЬСА ТЕРАГЕРЦЕВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ОБРАЗЦЕ КРЕМНИЯ

Для анализа процессов, происходящих в кремнии под действием ТГц-импульса, проведены расчеты динамики заполнения зоны проводимости свободными электронами. Для расчета зависимости от времени концентрации электронов проводимости N_e использованы дифференциальные уравнения для скорости изменения концентраций с использованием модели ударной ионизации Келдыша [6] для электронов зоны проводимости:

$$\dot{N}_e = C_e(\varepsilon - \varepsilon_{th})^n \varepsilon_{th}^{-2} N_e \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{th}), \quad (1)$$

где $\Theta(\varepsilon - \varepsilon_{th})$ – функция Хевисайда с пороговой энергией $\varepsilon_{th} = 1.1 \text{ эВ}$ и $n = 2$ [7].

Для расчета дополнительной энергии свободных носителей используется дифференциальное уравнение

$$\dot{\epsilon} = -C_e(\epsilon - \epsilon_{th})^n \epsilon_{th}^{-2} N_e \Theta(\epsilon - \epsilon_{th}) - \epsilon/\tau_e + f(E_{ins}), \quad (2)$$

где первое слагаемое выражает скорость потери энергии, идущей на ударную ионизацию дополнительных носителей, второе слагаемое – скорость релаксации дополнительной энергии за счет процессов, не связанных с ударной ионизацией, и $f(E_{ins})$ с соответствующим индексом представляет скорость увеличения энергии свободных носителей под действием поля ТГц-импульса, E_{ins} – мгновенное значение амплитуды электрического поля импульса. Скорость увеличения энергии, следуя [8], рассматривается в виде

$$f(E_{ins}) = \frac{e^2}{2m} E_{ins}^2 \tau_\gamma,$$

где m – эффективная масса соответствующего носителя, τ_γ – среднее время между последовательными столкновениями электрона с решеткой, обеспечивающими акт ударной ионизации при его движении в кристалле под действием внешнего поля. Такой выбор $f(E_{ins})$ обосновывается тем, что частота γ электрон-фононного взаимодействия в образце кремния, находящемся под действием поля ТГц-импульса, для свободных носителей с высокими значениями дополнительной энергии (1.5–5 эВ) значительно превышает частоту ω ТГц-импульса и, следовательно, в каждый момент времени скорость электронов равна дрейфовой скорости

$$v_d = eE_{ins}/(m\gamma), \quad f(E_{ins}) = e^2 E_{ins}^2 / (2m_{eff} \gamma).$$

Подобная модель для электронов зоны проводимости использовалась в работе [9] при исследовании динамики генерации свободных носителей в InSb за счет механизма ударной ионизации.

Численное моделирование осуществлялось в пространственно-временной области переменных t и z (ось z направлена по глубине пластины). Для численного решения используемых в модели дифференциальных уравнений применялся конечно-разностный метод в пространственно-временной области на сетке с шагом дискретизации по времени $\Delta t = 0.05$ пс и шагом по пространственной координате $\Delta z = \frac{c}{n_{Si}} \Delta t = 4.5$ нм, где c – скорость света, $n_{Si} = 3.32$ – показатель преломления кремния на частоте ТГц-импульса.

Концентрация свободных носителей $N_e(t_i, z_j)$ в каждой точке (t_i, z_j) пространственно-временной сетки может быть получена в результате решения системы конечно-разностных уравнений

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}(t_i, z_j) &= \epsilon(t_{i-1}, z_j) + \Delta t f(E_*(t_i, z_j)), \\ N_e(t_i, z_j) &= N_e(t_{i-1}, z_j) + \\ &+ \left\{ \exp \left[C_e (\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th})^2 \epsilon_{th}^{-2} \Theta(\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th}) \Delta t \right] - 1 \right\} \times \\ &\quad \times N_e(t_{i-1}, z_j), \\ \epsilon(t_i, z_j) &= \tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \left\{ \exp \left[C_e (\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th})^2 \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \epsilon_{th}^{-2} \Theta(\tilde{\epsilon}(t_i, z_j) - \epsilon_{th}) \Delta t \right] - 1 \right\} N_e(t_{i-1}, z_j) + \tilde{\epsilon}(t_i, z_j) / \tau_e. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\epsilon(t_i, z_j)$ – значения средней дополнительной энергии электронов проводимости и дырок соответственно, полученные в результате воздействия ТГц-импульсом на i -м шаге по времени в j -м слое образца; τ_e – феноменологический параметр времени релаксации энергии электронов зоны проводимости. Начальные условия для дополнительной энергии свободных носителей – $\epsilon(t_0, z_j) = 0$ для всех слоев в образце.

Напряженность поля $E(t, z)$ ТГц-импульса, проходящего j -й слой, считается постоянной в слое, но, поскольку, в соответствии с законом Бугера, в начале и в конце слоя с показателем поглощения α поле изменяется, в расчетах берется среднее интегральное значение $(E_*(t, z) = E(t, z) (1 - e^{-0.5\alpha\Delta z}) (0.5\alpha\Delta z)^{-1}$, где $E(t, z)$ – напряженность поля в начале слоя.

Таким образом, считая, что на текущем i -м шаге расчета по времени в j -й слой входит поле $E(t_i, z_j)$, получаем значение $E_*(t_i, z_j)$ для расчетов по (3). На текущем i -м шаге расчета по времени в j -м слое создается повышенная концентрация свободных носителей и изменяется показатель поглощения материала α , который будет учитываться в расчете на следующем шаге по времени для следующего значения амплитуды поля, входящего в слой. Поле $E(t_i, z_j)$, входящее в слой, на выходе будет ослаблено текущим значением показателя поглощения $\alpha_{i,j}$, т.е. в следующий слой будет входить поле $E(t_i, z_j) e^{-0.5\alpha_{i,j}\Delta z}$.

Известно [10, 11], что при возрастании энергии свободных носителей в кремнии растет частота столкновений носителей. В области образца, где происходит воздействие ТГц-импульсом, частота столкновений, включающая в себя все возможные виды $e-e$, $e-ph$, $e-h$ взаимодействий, принималась равной $\gamma = 2.0 \times 10^{14}$ Гц [10, 11]. После прекращения воздействия электрического поля ТГц-импульса на среду энергия носителей рассеивается и частота столкновений релаксирует к значениям, определяемым достигнутым уровнем концентрации свободных носителей [12].

Рассмотрим образец беспримесного кремния толщиной 235 мкм. Временная форма возбуждающего ТГц-импульса показана на рис. 1 с макси-

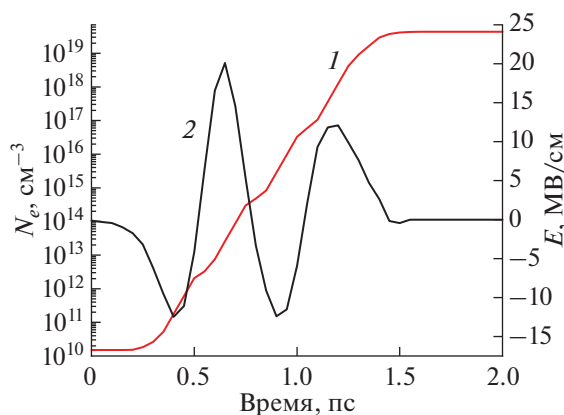


Рис. 1. Зависимость изменения концентрации свободных электронов (1) от времени в зоне проводимости в поверхностном слое глубиной 4.5 мкм пластины кремния; временная форма падающего на образец ТГц-импульса (2).

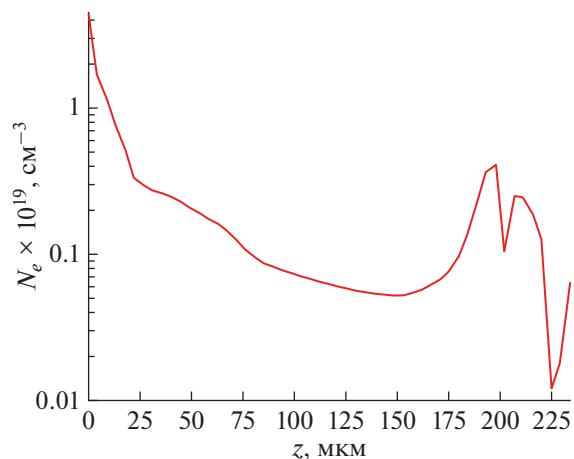


Рис. 2. Распределение концентрации носителей по глубине образца после выхода ТГц-импульса из образца кремния.

мальной амплитудой электрического поля до 23 МВ/см [13].

Одновременно с рассчитанными значениями концентрации носителей $N_e(t_i, z_j)$ и частоты столкновений $\gamma(t_i, z_j)$ по формулам Друде [14] рассчитываются компоненты диэлектрической проницаемости $\epsilon_1(t_i, z_j)$, $\epsilon_2(t_i, z_j)$ и показатель поглощения $\alpha(t_i, z_j)$, а также коэффициент поглощения Бугера в текущем слое толщиной Δz : $b_{ij} = \exp(-\alpha_{ij}\Delta z)$.

На рис. 1 представлены полученные в результате расчетов зависимости от времени концентрации электронов проводимости N_e во входном слое пластины кремния глубиной 4.5 мкм и временной профиль напряженности электрического поля ТГц-импульса с максимальной амплитудой $E_{\max} = 20$ МВ/см на входе в образец.

Для беспримесного кремния рост концентрации свободных носителей начинается в районе 200 фс, и концентрации достигают максимума к концу действия ТГц-импульса в слое. Концентрация свободных носителей к концу действия ТГц-импульса в слое достигает уровня $(4 \pm 0.1) \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

В расчете константа C_e полагалась равной 10^{12} с^{-1} , и, таким образом, среднее значение показателя $K_{IMI} = \ln(N_{\max}/N_0)/\Delta T$ скорости роста концентрации N_e за период действия ТГц-импульса ΔT составляет $K_{IMI} = 1.6 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$. Уточнить значение константы C_e будет возможно после проведения экспериментальных исследований пропускания кремния под действием ТГц-излучения. Вместе с тем рассчитанное значение показателя K_{IMI} находится в хорошем соответствии с теоретическими исследованиями [15, 16] скорости

ударной ионизации в кремнии в зависимости от дополнительной энергии свободных носителей.

Распределение концентрации носителей по глубине после выхода ТГц-импульса из образца представлено на рис. 2. В начальных слоях глубиной ~20 мкм концентрация свободных носителей резко спадает до уровня $\sim 3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, и в дальнейшем происходит плавное уменьшение концентрации до уровня $\sim 6 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Небольшой подъем и колебания концентрации до значений $(2.5 \pm 1.5) \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ на противоположном краю образца в слое толщиной ~60 нм обусловлен воздействием отраженного ТГц-импульса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная расчетная модель динамики ТГц-импульса с высокой амплитудой электрического поля в образце кремния показывает, что движение ТГц-импульса сопровождается резким ростом концентрации свободных носителей в результате ударной ионизации под действием квазистационарного электрического поля ТГц-импульса. Показано, что концентрация свободных носителей имеет существенно неоднородный характер, начиная с $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ на входной и до $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ на противоположной поверхности образца.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 075-00892-20-00). Эксперименты проводились на уникальной научной установке “Лазерный тераваттный фемтосекундный комплекс”, входящей в состав ЦКП “Лазерный фемтосекундный комплекс” ОИВТ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Romashevskiy S.A., Ovchinnikov A.V., Chefonov O.V., Agranat M.B.* Subpicosecond Terahertz Radiation with an Electric Field Above 1 MV/cm: Interaction with Condensed Matter and Its Applications // *High Temp.* 2017. V. 55. № 6. P. 859.
2. *Tarekegne A.T., Iwaszczuk K., Zalkovskij M., Strikwerda A.C., Jepsen P.U.* Impact Ionization in High Resistivity Silicon Induced by an Intense Terahertz Field Enhanced by an Antenna Array // *New J. Phys.* 2015. V. 17. 043002.
3. *Tarekegne A.T., Hirori H., Tanaka K., Iwaszczuk K., Jepsen P.U.* Impact Ionization Dynamics in Silicon by MV/cm THz Fields // *New J. Phys.* 2017. V. 19. 123018.
4. *Ašmontas S., Raguotis R., Bumelienė S.* Monte Carlo Study of Impact Ionization in *n*-type InAs Induced by Intense Ultrashort Terahertz Pulses // *Opt. Quantum Electron.* 2018. V. 50. 264.
5. *Hirori H., Shinokita K., Shirai M., Tani S., Kadoya Y., Tanaka K.* Extraordinary Carrier Multiplication Gated by a Picosecond Electric Field Pulse // *Nat. Commun.* 2011. V. 2. P. 594.
6. *Келдыш Л.В.* К теории ударной ионизации в полупроводниках // *ЖЭТФ.* 1965. Т. 48. № 6. С. 1692.
7. *Sano N., Yoshii A.* Impact-ionization Model Consistent with the Band Structure of Semiconductors // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 77. № 5. P. 2020.
8. *Boyd R.* *Nonlinear Optics.* Elsevier Science. 2nd ed. Acad. Press, 2003.
9. *Hoffmann M.C., Hebling J., Hwang H.Y., Yeh K.Lo, Nelson K.A.* Impact Ionization in InSb Probed by Terahertz Pump-terahertz Probe Spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 79. № 16. 161201(R).
10. *Sano N., Aoki T., Tomizawa M., Yoshii A.* Electron Transport and Impact Ionization in Si // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. № 17. P. 12122.
11. *Restrepo O.D., Varga K., Pantelides S.T.* First-principles Calculations of Electron Mobilities in Silicon: Phonon and Coulomb Scattering // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 94. 212103.
12. *Meng F., Thomson M.D., Sernelius B.E., Jörger M., Roskos H.G.* Ultrafast Dynamic Conductivity and Scattering Rate Saturation of Photoexcited Charge Carriers in Silicon Investigated with a Midinfrared Continuum Probe // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 91. № 7. 075201.
13. *Chefonov O.V., Ovchinnikov A.V., Agranat M.B., Fortov V.E., Efimenko E.S., Stepanov A.N., Savel'ev A.B.* Nonlinear Transfer of an Intense Few-cycle Terahertz Pulse Through Opaque *n*-doped Si // *Phys. Rev. B.* V. 94. № 16. 165206.
14. *Ashcroft N.W., Mermin N.D.* *Solid State Physics.* 1st ed. Philadelphia: Saunders College Publ., 1976.
15. *Cartier E., Fischetti M.V., Eklund E.A., McFeely F.R.* Impact Ionization in Silicon // *Appl. Phys. Lett.* 1993. V. 62. P. 3339.
16. *Redmer R., Madureira J.R., Fitzer N., Goodnick S.M., Schattke W., Schöll E.* Field Effect on the Impact Ionization Rate in Semiconductors // *J. Appl. Phys.* 2000. V. 87. № 2. P. 781.

УДК 533.93

АНАЛИТИЧЕСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВЫРОЖДЕННОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

© 2021 г. В. П. Коновалов^{1, 2, *}, Э. Е. Сон^{1, 2}¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский физико-технический институт, Москва, Россия

*E-mail: konovalov.vp@mipt.ru

Поступило в редакцию 22.10.2021 г.

После доработки 16.11.2021 г.

Принято к публикации 23.11.2021 г.

Получено уравнение состояния вырожденного электронного газа в явной форме из распределения Ферми–Дирака с помощью аналитических разложений по параметру вырождения. Для подтверждения полученных аналитических аппроксимаций выполнен прямой компьютерный расчет по точным интегральным формулам распределения Ферми–Дирака. Предложены практические уравнения состояния и выражения для химического потенциала вырожденного электронного газа.

DOI: 10.31857/S0040364421060107

ВВЕДЕНИЕ

Помимо хорошо известных примеров вырожденного электронного газа, таких как электронный газ в обычных металлах и в недрах звезд белых карликов, имеются области существования этого газа в плазме при определенных условиях, доступных экспериментально [1, 2]. Квантовое вырождение электронов в достаточно плотной плазме приводит к увеличению давления, при этом уравнение состояния вещества существенно видоизменяется. Монография [3] представляет модель Томаса–Ферми и самосогласованный потенциал для плотного вещества многокомпонентного состава (атомы, электроны, ионы). Запутанность (сцепленность) квантовых состояний в вырожденном электронном газе может трактоваться как термодинамическая величина [4], способная связывать соотносительное межэлектронное расстояние с давлением и температурой. Аналитический метод разложения предложен в работе [5] для оценки уравнения состояния слабoreлятивистского, частично вырожденного электронного газа. Однородный вырожденный электронный газ при конечной температуре численно моделировался в работе [6] методом интегрирования по траекториям, исходя из первых принципов, чтобы получить точные термодинамические данные. В исследованиях [7, 8] разрабатывалось уравнение состояния релятивистского электронного газа при его произвольном вырождении и под действием магнитного поля. В настоящее время термодинамические свойства однородного электронного газа могут быть установлены посредством сложного численного интегрирования по траекториям мето-

дом Монте-Карло [9] в широком диапазоне плотностей и температур. В то же время желательны возможные простые оценки таких свойств. В настоящей работе учитывается именно электронная компонента плазмы, являющейся основной при эффекте вырождения.

НЕЯВНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ФЕРМИ-ГАЗА

Функция распределения электронов по кинетическим энергиям $f(\epsilon)$, описывающая квантовые свойства, определяется распределением Ферми–Дирака

$$f(\epsilon) = \frac{gm^{3/2} \sqrt{\epsilon}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3} \left(e^{\frac{(\epsilon-\mu)}{T}} + 1 \right)}. \quad (1)$$

Здесь m , ϵ , μ – масса электрона, энергия и химический потенциал соответственно; T – температура, измеренная в энергетических единицах; \hbar – постоянная Планка; g – статистический вес электрона ($g = 2$).

На этом основании концентрация электронов n вместе с внутренней энергией E и давлением p могут быть выражены посредством неявных интегральных формул через химический потенциал μ , температуру T и объем V [10]

$$n = \int_0^\infty f(\epsilon) d\epsilon = \frac{gm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon} d\epsilon}{\left(e^{\frac{(\epsilon-\mu)}{T}} + 1 \right)}, \quad (2)$$

$$E = \int_0^\infty f(\epsilon)\epsilon d\epsilon = \frac{gm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{\left(e^{\frac{\epsilon-\mu}{T}} + 1\right)}, \quad (3)$$

$$p = \frac{2E}{3V}. \quad (4)$$

Формула (4) представляет общее соотношение между давлением, внутренней энергией и объемом любого идеального газа.

Здесь появляется ключевой безразмерный параметр задачи – параметр вырождения $A = n(2\pi\hbar^2/(mT))^{3/2}$. Он имеет ясную физическую интерпретацию, выражая количество частиц (электронов) в кубике размером с тепловую длину волны де Бройля $\lambda_B = (2\pi\hbar^2/(mT))^{1/2}$. Параметр вырождения определяется только электронной плотностью и температурой $A = A(n, T)$, он передает квантовое отличие от классического бoльцмановского газа и просто связан с энергией Ферми ϵ_F : $A = (8/3\pi^{1/2})(\epsilon_F/T)^{3/2}$. Можно выделить три типичных случая: идеальный невырожденный классический бoльцмановский газ, $A \geq 0$; слабoвырожденный газ, $A \ll 1$, и сильновырожденный газ, $A \gg 1$.

С помощью параметра вырождения A вместе с безразмерными переменными $x = \epsilon/T$ и $z = \mu/T$ формулы (2)–(4) преобразуются в следующую систему двух уравнений:

$$A = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{(e^{-z}e^x + 1)}, \quad (5)$$

$$\left(\frac{p}{nT}\right)A = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{(e^{-z}e^x + 1)}. \quad (6)$$

Здесь имеются две неизвестные переменные: безразмерное электронное давление $p/(nT)$ и безразмерный электронный химический потенциал z . Если исключить переменную z , то зависимость безразмерного давления $p/(nT)$ от A проявит себя как уравнение состояния для электронов в явной форме $p = p(n, T)$.

Невырожденный классический газ описывается распределением Максвелла, которое просто следует из распределения Ферми–Дирака (1) при устрaнении единицы в знаменателе. В этом случае интегралы (5), (6) выражаются через Γ -функцию:

$$A = \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^z \int_0^\infty e^{-x} x^{1/2} dx = \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^z \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = 2e^z,$$

$$\left(\frac{p}{nT}\right)A = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} e^z \int_0^\infty e^{-x} x^{3/2} dx = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} e^z \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = 2e^z.$$

Отсюда сразу следуют стандартные соотношения для классического идеального газа: уравне-

ние состояния $p/(nT) = 1$ и химический потенциал $\mu/T = \ln(A/g)$, для электронов $g = 2$. Следует осознавать, что химический потенциал идеального газа равен большому отрицательному значению, так что множитель $e^{-\mu/T}$ является чрезвычайно большим и устрaнение единицы в знаменателе распределения Ферми–Дирака (1) разумно.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В случае слабoвырожденного электронного газа $A \ll 1$ и параметр z является отрицательной величиной, так что соответствующий член $e^{-z}e^x$ в интегралах (5), (6) велик. Тогда разложение в ряд по малой величине $e^z e^{-x} \ll 1$ позволяет провести интегрирование и дает следующий результат:

$$\frac{1}{e^{-z}e^x + 1} \cong e^z e^{-x} (1 - e^z e^{-x}),$$

$$\int_0^\infty \frac{x^s dx}{e^{-z}e^x + 1} \cong e^z \left(\int_0^\infty x^s e^{-x} dx - e^z \int_0^\infty x^s e^{-2x} dx \right) =$$

$$= e^z \Gamma(s+1) \left(1 - \frac{e^z}{2^{s+1}} \right), \quad e^z \ll 1,$$

где s – произвольный действительный показатель степени.

Таким образом, система уравнений (5), (6) принимает форму

$$A = \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^z \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left(1 - \frac{e^z}{2^{3/2}} \right), \quad (7)$$

$$\left(\frac{p}{nT}\right)A = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} e^z \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \left(1 - \frac{e^z}{2^{5/2}} \right) \quad (8)$$

со значениями Γ -функции, равными $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$, $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$.

Уравнение (7) может быть решено как квадратное уравнение для малого параметра $e^z \ll 1$, и затем из (7), (8) получаются следующие формулы:

$$z \cong \ln\left(\frac{A}{2}\right) + \frac{A}{4\sqrt{2}}, \quad \frac{p}{nT} = \frac{1 - e^z/2^{5/2}}{1 - e^z/2^{3/2}} \cong 1 + \frac{e^z}{4\sqrt{2}}.$$

Они ведут непосредственно к уравнению состояния и химическому потенциалу для слабoвырожденного электронного газа в явной безразмерной форме

$$\frac{p}{nT} \cong 1 + \frac{A}{8\sqrt{2}}, \quad A \ll 1; \quad (9)$$

$$\frac{\mu}{T} \cong \ln\left(\frac{A}{2}\right) + \frac{A}{4\sqrt{2}}, \quad A \ll 1. \quad (10)$$

В противном случае – сильно вырожденного электронного газа, $A \gg 1$, параметр z оказывается

большим, $z \gg 1$, $e^{-z} \ll 1$, и интегрирование в (5), (6) заметно усложняется. Требуется замена переменной $\xi = x - z$ и последующее разложение числителя в ряд по этой переменной ξ [10]. Подобное интегрирование может быть представлено следующей формулой:

$$\int_0^\infty \frac{x^s dx}{e^{-z} e^x + 1} \cong \frac{z^{s+1}}{s+1} + \frac{s\pi^2}{6} z^{s-1}, \quad z \gg 1.$$

С учетом данного соотношения система уравнений (5), (6) принимает вид

$$A = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{3} z^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} z^{-1/2} \right) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} z^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8z^2} \right), \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{p}{nT} \right) A &= \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{5} z^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} z^{1/2} \right) = \\ &= \frac{16}{15\sqrt{\pi}} z^{5/2} \left(1 + \frac{5\pi^2}{8z^2} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

В рассматриваемом случае с большой величины $z \gg 1$ уравнение (11) для переменной z может быть решено последовательными итерациями, и это решение удобно выражается через безразмерную энергию Ферми ϵ_F/T следующим образом:

$$z \cong \frac{\epsilon_F}{T} - \frac{\pi^2 T}{12 \epsilon_F}, \quad \frac{\epsilon_F}{T} = \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{8} A \right)^{2/3}. \quad (13)$$

Безразмерное давление следует из уравнений (11), (12):

$$\frac{p}{nT} = \frac{2}{5} z \left(\frac{1 + \frac{5\pi^2}{8z^2}}{1 + \frac{\pi^2}{8z^2}} \right) \cong \frac{2}{5} z + \frac{\pi^2}{5z}, \quad z \gg 1.$$

Подстановка решения (13) в последнее соотношение дает значение давления, выраженное через безразмерную энергию Ферми ϵ_F/T

$$\frac{p}{nT} \cong \frac{2\epsilon_F}{5T} + \frac{\pi^2 T}{6\epsilon_F}. \quad (14)$$

Как и предсказывает теория [3, 10], в пределе полного вырождения ($T \geq 0$) давление электронного газа не зависит от температуры, а его химический потенциал стремится к энергии Ферми. Найденные решения (13), (14) позволяют явно выписать аппроксимации уравнения состояния и химического потенциала для сильно вырожденного электронного газа через безразмерный параметр вырождения A :

$$\frac{p}{nT} \cong \left(\frac{3^{2/3} \pi^{1/3}}{10} \right) A^{2/3} + 2 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{5/3} \frac{1}{A^{2/3}}, \quad A \gg 1; \quad (15)$$

$$\frac{\mu}{T} \cong \left(\frac{3^{2/3} \pi^{1/3}}{4} \right) A^{2/3} - \left(\frac{\pi}{3} \right)^{5/3} \frac{1}{A^{2/3}}, \quad A \gg 1. \quad (16)$$

Следует упомянуть замечательную особенность вырожденного электронного газа как фермиевского газа. По мере вырождения электронов их кинетическая энергия сильно возрастает так, что заметно превосходит энергию потенциального кулоновского взаимодействия. Таким образом, плотный вырожденный электронный газ оказывается идеальным, и эффектом неидеальности можно пренебречь.

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ

Чтобы проверить и подтвердить полученные аналитические аппроксимации, был проведен прямой численный расчет по точным интегральным формулам распределения Ферми–Дирака (5), (6) в диапазоне параметра вырождения $10^{-2} < A < 10^2$. По сути, компьютерный код широко варьирует параметр e^{-z} в уравнениях (5), (6) и затем собирает расчетные данные для переменных p/nT и A . Результаты численного расчета показаны на рис. 1 и 2 в сравнении с аналитическими аппроксимациями (9), (10) и (15), (16). Эти аппроксимации оказываются в весьма хорошем соответствии с численным расчетом во всем диапазоне параметра A , включая промежуточную область $A \sim 1$.

Сочленение двух ветвей полученной аппроксимации происходит при $A \sim 10$. Более точно, согласно компьютерному анализу, практическое “сглаживание” двух ветвей уравнения состояния (9) и (15) осуществляется при значении $A = 9.85$, а “сглаживание” двух ветвей химического потенциала (10) и (16) происходит при значении $A = 7.15$. Ветви аппроксимаций, объединенные подобным образом,

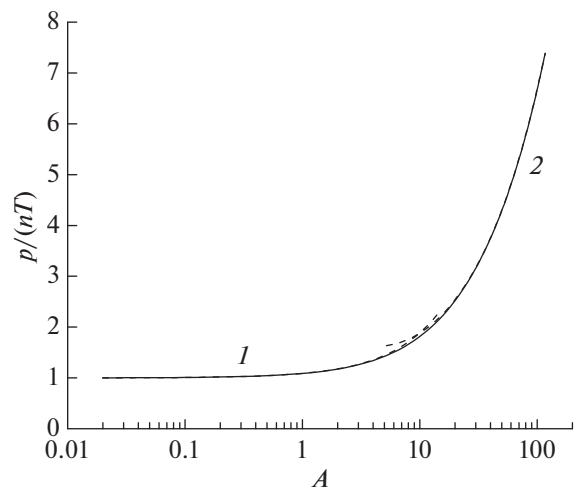


Рис. 1. Аппроксимация уравнения состояния вырожденного электронного газа: сплошная линия – точный компьютерный расчет, 1 – слабовырожденные электроны (9), 2 – сильновырожденные электроны (15).

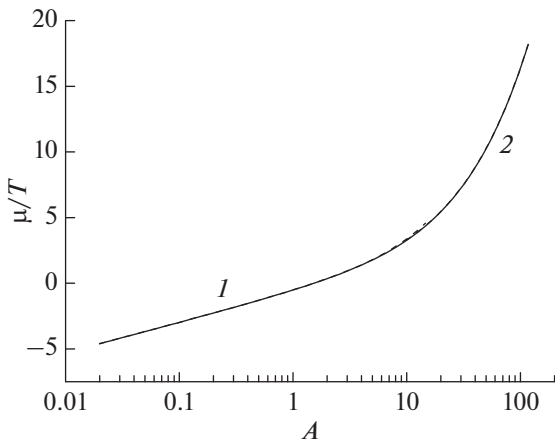


Рис. 2. Аппроксимация химического потенциала вырожденного электронного газа: сплошная линия – точный компьютерный расчет, 1 – слабовырожденные электроны (10), 2 – сильновырожденные электроны (16).

по существу представляют собой гладкие функции во всем диапазоне параметра A .

Ниже приведены удобные аппроксимационные формулы для практических расчетов, их относительная ошибка ~2%.

Непрерывная аппроксимация уравнения состояния по формулам (9), (15):

$$\frac{p}{nT} = 1 + \frac{A}{11.3}, \quad A \leq 9.85;$$

$$\frac{p}{nT} = 0.305A^{2/3} + \frac{2.16}{A^{2/3}}, \quad A \geq 9.85.$$

Непрерывная аппроксимация химического потенциала по формулам (10), (16):

$$\frac{\mu}{T} = \ln\left(\frac{A}{2}\right) + \frac{A}{5.66}, \quad A \leq 7.15;$$

$$\frac{\mu}{T} = 0.762A^{2/3} - \frac{1.08}{A^{2/3}}, \quad A \geq 7.15.$$

Единственный безразмерный параметр в этих формулах – параметр вырождения A , численно равный:

$$A = n \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mT} \right)^{3/2} = 4.14 \times 10^{-16} \frac{n}{T^{3/2}}$$

(концентрация электронов n дана в обратных кубических сантиметрах см^3 , температура T – в К).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные аппроксимации оказываются в приличном соответствии со строгим численным расчетом во всем диапазоне параметра вырождения A . Поэтому уравнение состояния вырожденного электронного газа принимает ясное аналитическое представление с помощью единственного параметра вырождения A в широком диапазоне концентраций и температур.

Тема исследования была поставлена академиком В.Е. Фортовым. Работа поддержана грантом Российского научного фонда (проект № 21-79-30062).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под ред. Фортова В.Е. Т. 1. М.: Наука, 2000. С. 6.
2. Фортов В.Е. Экстремальные состояния вещества. М.: Физматлит, 2009. С. 14.
3. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. Quantum-statistical Models of Hot Dense Matter. Basel–Boston–Berlin: Birkhauser, 2005. P. 287.
4. Lunkes C., Brukner Č., Vedral V. Equation of State for Entanglement in a Fermi Gas // Phys. Rev. A. 2007. V. 71. 034309.
5. Haug E. Simple Equation of State for Partially Degenerate Semirelativistic Electrons // Astron. Astrophys. 2003. V. 407. P. 787.
6. Schoof T., Groth S., Vorberger J., Bonitz M. Ab initio Thermodynamic Results for the Degenerate Electron Gas at Finite Temperature // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. P. 130402.
7. Faussurier G. Equation of State of the Relativistic Free Electron Gas at Arbitrary Degeneracy // Phys. Plasmas. 2016. V. 23. P. 122704.
8. Faussurier G. Equation of State of the Free Electron Gas in a Magnetic Field at Arbitrary Degeneracy // Phys. Plasmas. 2020. V. 27. 022709.
9. Filinov V.S., Larkin A.S., Levashov P.R. Uniform Electron Gas at Finite Temperature by Fermionic-path-integral Monte Carlo Simulations // Phys. Rev. E. 2020. V. 102. № 3-1. 033203.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Физматлит, 2002. С. 187.

УДК 535.3

ИЗМЕРЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОПУСКАНИЯ КРЕМНИЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ ИНТЕНСИВНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН В КСЕНОНЕ

© 2021 г. М. И. Кулиш¹ *, В. Б. Минцев¹, С. В. Дудин¹,
Д. Н. Николаев¹, И. В. Ломоносов¹, В. Е. Фортгов¹

¹Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

*E-mail: kulishm@icp.ac.ru

Поступило в редакцию 09.04.2021 г.

После доработки 22.10.2021 г.

Принято к публикации 23.11.2021 г.

Измерен коэффициент пропускания образцов кремния под воздействием излучения интенсивных ударных волн в ксеноне. Ударные волны генерировались с помощью энергии конденсированных взрывчатых веществ. Интенсивность прохождения излучения на длине волны 1500 нм измерялась пирометрическими методами. Предложена модель процесса, основанная на появлении за счет фотоионизации поглощающего слоя в кремнии.

DOI: 10.31857/S0040364421060120

ВВЕДЕНИЕ

При воздействии на полупроводники интенсивными импульсами излучения с энергией фотонов, превышающей энергию запрещенной зоны, генерируется большое количество свободных носителей, которые кардинально изменяют транспортные и оптические свойства этих материалов [1]. Возбужденные излучением полупроводники с успехом используются в качестве электрооптических переключателей в инфракрасном диапазоне спектра [2].

В настоящей работе проведены исследования влияния излучения с фронта ударной волны, распространяющейся в ксеноне при нормальном давлении со скоростью ~ 8 км/с, со спектром, близким к излучению черного тела, с яркостной температурой $T \sim 30000$ К. Для описания экспериментальных данных предложена теоретическая модель генерации свободных носителей в кремнии вследствие взаимодействия решетки кристалла с проникающим излучением.

СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТА И РЕЗУЛЬТАТЫ

Для генерации сильных ударных волн использовалась техника взрывных ударных труб [3]. Схема проведенных экспериментов приведена на рис. 1. После инициирования в 1 заряда конденсированного взрывчатого вещества 2 детонационная волна проходит по всей длине заряда и выходит на свободный торец, граничащий с объемом, где находится ксенон с начальным давлением 0.1 МПа. При этом в ксеноне формируется ударная волна 3 , скорость

которой поддерживается расширяющимися продуктами детонации в цилиндрическом объеме 4 диаметром 80 мм на уровне 8 км/с со спектром, близким к излучению черного тела с яркостной

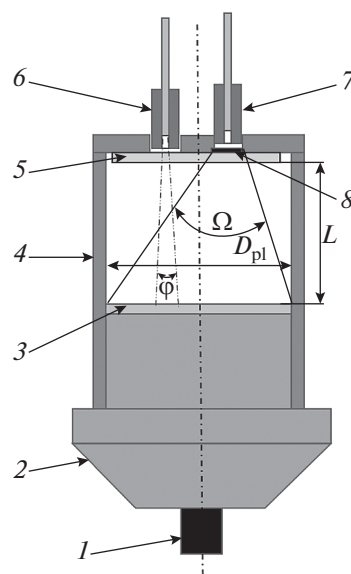


Рис. 1. Схема эксперимента с ксенонем: 1 – точка инициирования взрывчатого вещества; 2 – цилиндрический заряд взрывчатого вещества; 3 – слой плазмы за фронтом ударной волны диаметром 80 мм; 4 – цилиндрический стакан, заполненный ксенонем при атмосферном давлении; 5 – кварцевое окно; 6, 7 – ограниченные диафрагмами световоды; 8 – образец кремния.

температурой $T \approx 30000$ К. На расстоянии 120 мм от среза заряда на торце трубки расположено кварцевое окно 5. На этом окне с внешней стороны камеры установлены два световода во втулках 6 и 7 и образец кремния δ толщиной $d = 1.5$ мм. Регистрация излучения обоими световодами производится параллельно оси цилиндрического стакана и перпендикулярно поверхности ударной волны в ксеноне. Регистрация излучения фронта ударной волны в ксеноне производится по двум каналам пирометра: световод 6 регистрирует излучение, прошедшее только через кварц, а световод 7 — через кварц и кремний. Величина телесного угла φ , ограничивающего поле зрения пирометра, задавалась диафрагмами, размещенными на приемных концах световодов. Так как угол выбран достаточно малым, в поле зрения пирометра попадает поверхность ударной волны в ксеноне диаметром ~ 10 мм. Измерения на длине волны $\lambda = 1500$ нм проводились с помощью InGaAs PIN фотодиода с диаметром фотоприемной площадки ≈ 500 мкм. Выделение спектрального участка выполнялось интерференционным фильтром с полосой ~ 10 нм. Сигнал фотодиода усиливался трансимпедансным усилителем с коэффициентом преобразования ≈ 7000 В/Вт. Время нарастания сигнала фотоприемного тракта — не более 15 нс. Перед экспериментом пирометр калибровался по эталонной ленточной вольфрамовой лампе с температурой излучающего тела 2700 К. Мощность излучения, поглощающаяся в образце, зависит от плотности мощности излучения плазменного слоя за фронтом ударной волны ($I_0 \approx 4.6$ МВт/см²) и телесного угла Ω , который увеличивался по мере приближения плазменного диска диаметром D_{pl} к образцу на расстояние $L(t)$, что приводило к нарастанию мощности излучения во времени.

Коэффициент пропускания кремния определялся по отношению интенсивности излучения, прошедшего через кварц и кремний, к интенсивности излучения, прошедшего только через кварц. Кварц полагался прозрачным для рассматриваемых длин волн, что проверялось в специальной серии экспериментов. На рис. 2 приведены значения определенного таким образом коэффициента пропускания кремния в зависимости от времени — кривая 1. Видно, что на начальных стадиях эксперимента значения коэффициента пропускания кремния соответствуют табличным значениям $T \approx 50\%$ на длине волны $\lambda = 1500$ нм. При достижении ~ 11 мкс процесса происходит резкая отсечка излучения, образец кремния становится непрозрачным.

Для объяснения этого эффекта предложена следующая модель образования свободных носителей в кремнии под действием интенсивного излучения и, следовательно, изменения его оптических свойств. Кремний является фактически прозрачным для квантов излучения с энергией,

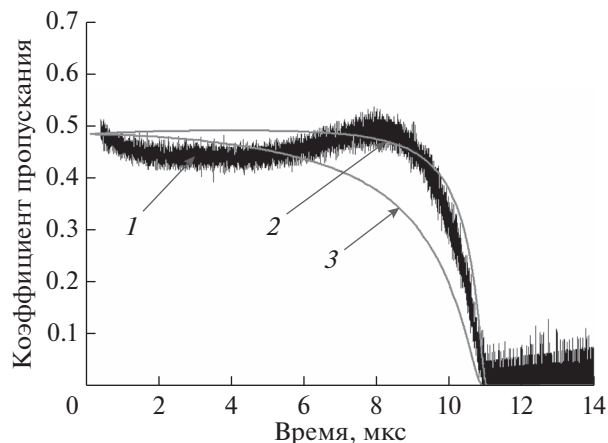


Рис. 2. Коэффициент пропускания кремния: 1 — эксперимент, 2 — результаты расчета по модели при $\nu = 2 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$, 3 — 5×10^{11} .

меньшей энергии запрещенной зоны (для кремния ≈ 1.12 эВ). Коэффициент поглощения излучения кремния на длине волны $\lambda = 1100$ нм, соответствующей этой энергии, равен $\alpha_1 \approx 3.5 \text{ см}^{-1}$, что гораздо меньше его значений при $\lambda = 250$ и 500 нм, составляющих соответственно $\alpha_1 \approx 1.8 \times 10^6 \text{ см}^{-1}$ и 1.2×10^4 [4]. Кванты в диапазоне $\lambda = 160-1100$ нм, приходящие на образец, поглощаются в тонком слое кремния l , толщина которого определяется коэффициентом поглощения излучения, и создают пары свободных носителей зарядов. Эти заряды диффундируют в глубь образца на глубину $X(t) = \sqrt{Dt}$, где коэффициент диффузии определяется из соотношения Эйнштейна $D = \frac{kT}{q} \mu$, μ — подвижность зарядов в кремнии (для электронов в кремнии при комнатной температуре она составляет $\mu \approx 1450 \text{ см}^2/(\text{В с})$ и $\mu \approx 400 \text{ см}^2/(\text{В с})$ для дырок [5]), t — время от начала освещения образца. Отметим, что в настоящих условиях диффузионная длина составляет $X \sim 0.1$ мм при $t \sim 10$ мкс и значительно превосходит длину пробега высокоэнергетических квантов света в кремнии $l \sim \alpha_1^{-1} \sim 10$ нм.

Предположим далее, что под действием излучения в кремнии образуется электрон-дырочная плазма с равномерно распределенными свободными носителями по диффузионной толщине (слой X на рис. 3), определяемой подвижностью дырок. Полагая, что каждый квант с энергией, превосходящей энергию запрещенной зоны, рождает электрон-дырочную пару, плотность свободных носителей, генерируемых в единицу времени в этом слое, в пренебрежении процессами рекомбинации можно оценить как [1]

$$dN_{eX}(t)/dt = \frac{1}{X(t)} \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{(1 - R_{10}(\omega)) F(\omega, t) d\omega}{\hbar\omega}$$

Здесь $R_{10}(\omega)$ – коэффициент отражения от поверхности воздух–кремний; $F(\omega, t) = I_{0p}(\omega) \sin^2[\vartheta(t)]$ – спектральная плотность мощности потока излучения на поверхности образца [6]; $I_{0p}(\omega)$ – спектральная планковская плотность мощности потока излучения плазменного слоя с яркостной температурой $T = 30000$ К; $\vartheta(t) = \text{arctg}\left(\frac{D_{pl}}{2L(t)}\right)$; ω_1, ω_2 – частоты излучения, соответствующие ширине запрещенной зоны кремния ≈ 1.12 эВ и кварца ≈ 7.6 эВ.

Излучение проходит из слоя воздуха 0 слева, через диффузионный слой X со свободными носителями, через слой кремния 1 и выходит в воздух – слой 0 справа. Поглощение излучения для волны $\lambda = 1500$ нм учитывается только для области X , тогда, пренебрегая переотражениями, коэффициент пропускания для $\lambda = 1500$ нм можно определить как

$$T_r = \frac{I(t, \lambda = 1500)}{I_0(\lambda = 1500)} = [1 - R_{0X}(t)] \times [1 - R_{X1}(t)][1 - R_{10}] \exp(-\alpha_X(t) X(t)).$$

Здесь R_{ij} – коэффициенты отражения на границе сред i и j (индексы i и j пробегает значения 0, X , 1 – рис. 3), определяемые через показатели преломления n_i и поглощения k_i среды с относительной диэлектрической проницаемостью $\epsilon_i(t) = \epsilon_{iR}(t) + i\epsilon_{iI}(t)$ по формулам Френеля [7]:

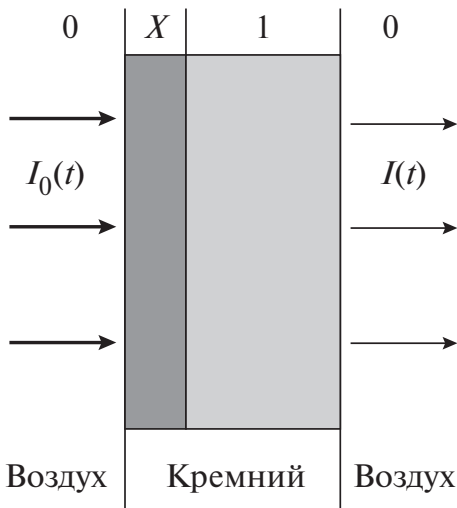


Рис. 3. Образец кремния с диффузионным слоем X .

$$R_{ij}(t) = \frac{|\sqrt{\epsilon_i(t)} - \sqrt{\epsilon_j(t)}|^2}{|\sqrt{\epsilon_i(t)} + \sqrt{\epsilon_j(t)}|^2} = \frac{[n_i(t) - n_j(t)]^2 + [k_i(t) - k_j(t)]^2}{[n_i(t) + n_j(t)]^2 + [k_i(t) + k_j(t)]^2},$$

$$n_i(t) = \sqrt{\frac{\epsilon_{iR}(t) + \sqrt{\epsilon_{iR}^2(t) + \epsilon_{iI}^2(t)}}{2}},$$

$$k_i(t) = \sqrt{\frac{-\epsilon_{iR}(t) + \sqrt{\epsilon_{iR}^2(t) + \epsilon_{iI}^2(t)}}{2}},$$

$$\epsilon_{XR}(t) = \epsilon_0 - \frac{\omega_p^2(t)}{\omega^2 + \nu^2}, \quad \epsilon_{XI}(t) = \frac{\nu}{\omega} \frac{\omega_p^2(t)}{\omega^2 + \nu^2},$$

$$\epsilon_{1R} = \epsilon_0, \quad \epsilon_{1I} = 0.$$

Здесь $\alpha_i(t) = \frac{4\pi k_i(t)}{\lambda}$ – коэффициент поглощения i -й среды, ν – частота столкновений электронов в кремнии, $\omega_p(t) = \sqrt{\frac{4\pi N_{eX}(t)}{\epsilon_0 m_{eff}^*}}$ – плазменная частота, $m_{eff}^* = 0.18m_e$ – эффективная масса электрона в кремнии при высоких концентрациях носителей [1], $\epsilon_0 = 12.159$ – статическая диэлектрическая проницаемость кремния [4], ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума.

Результат расчетов по модели сопоставлен с данными эксперимента на рис. 2. Для частоты столкновений $\nu = 2 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$ расчет очень близко описывает эксперимент с эффектом отсечки излучения на 11 мкс (кривая 2), когда плотность свободных зарядов достигает критических значений для длины волны 1500 нм – $n_e = 1.2 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Изменение параметра частоты столкновений ν меняет диссипативную долю в пропускании слоя X . На рис. 2 показан также ход кривой для $\nu = 5 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$ (кривая 3). Для образца кремния без отсвечивания потоком излучения от слоя ксеноновой плазмы коэффициент пропускания постоянен и равен $T_r = 0.5$ из-за отражений на границах.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе впервые обнаружено резкое уменьшение пропускания в кремнии оптического излучения на длине волны $\lambda = 1500$ нм под действием интенсивного излучения с фронта ударной волны в ксеноне. С помощью предлагаемой модели возникновения поглощающего диффузионного слоя при появлении свободных носите-

лей за счет фотоионизации удастся удовлетворительно описать экспериментальные данные.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785). Все эксперименты проведены с использованием приборной базы Московского регионального взрывного центра коллективного пользования ИПХФ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Toyoda Y., Elias L.R., Yen W.M.* Time-resolved Reflectance and Transmittance Measurements of Laser-induced Free Carriers in Germanium, Silicon, and Zinc Selenide at 10.6 μm // *Appl. Opt.* 2007. V. 46. № 5. P. 785.
2. *Alcock A.J., Corkum P.B.* Ultra-fast Switching of Infra-red Radiation by Laser-produced Carriers in Semiconductors // *Can. J. Phys.* 1979. V. 57. № 9. P. 1280.
3. *Мицнев В.Б., Фортвов В.Е.* Взрывные ударные трубы // *ТВТ.* 1982. Т. 20. № 4. С. 745.
4. *Schinke C., Peest P.C., Schmidt J. et al.* Uncertainty Analysis for the Coefficient of Band-to-band Absorption of Crystalline Silicon // *AIP Adv.* 2015. V. 5. № 6. 67168.
5. *Зеегер К.* Физика полупроводников. М.: Мир, 1977. 616 с.
6. *Цикулин М.А., Понов Е.Г.* Излучательные свойства ударных волн в газах. М.: Наука, 1977. 176 с.
7. *Mintsev V.B., Zaporoghets Yu.B.* Reflectivity of Dense Plasma // *Contrib. Plasma Phys.* 1989. V. 29. № 4/5. P. 493.

УДК 53.01

ВЛИЯНИЕ ЗАПАЗДЫВАНИЯ НА ЭВОЛЮЦИЮ ЭПИДЕМИЙ

© 2021 г. А. М. Игнатов¹ *, С. А. Тригер², Е. Б. Чернявский²

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

²Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: satron@mail.ru

Поступило в редакцию 28.09.2021 г.

После доработки 04.11.2021 г.

Принято к публикации 23.11.2021 г.

На основе дискретной модели распространения инфекции в замкнутой популяции найдена соответствующая ей форма дифференциальных уравнений с запаздыванием. Показано, что развитие эпидемии определяется четырьмя ключевыми параметрами: количеством заразных, средним числом опасных контактов одного заразного человека в день, вероятностью заражения в результате такого контакта и средней длиной отрезка времени, в течение которого заболевший способен заражать. Решение зависит также от размера популяции и от начального количества зараженных. Четыре названных параметра имеют ясный смысл и связаны с известной концепцией репродуктивного числа в непрерывных моделях SIR и SEIR. Условия насыщения эпидемии установлены путем решения полученных дифференциальных уравнений. Показано, что из-за длительного вирусносительства, характерного для COVID-19, предлагаемые здесь решения существенно отличаются от модели SIR.

DOI: 10.31857/S0040364421060065

ВВЕДЕНИЕ

Большинство существующих моделей распространения инфекции моделируют спонтанное развитие эпидемии и описывают все ее стадии. Есть два типа таких моделей: модели SIS и модели SIR и SEIR. Первые относятся к пионерской работе [1] и используют предположение, что выздоровевшие люди могут немедленно снова заразиться. Модели SIR построены на предположении, что выздоровевшие имеют иммунитет и выпадают из эпидемии (см., например, [2]). Модели SIS используются в математической эпидемиологии [3]. Обзор приведен в [4] (см. также приведенные там ссылки). Баланс между восприимчивыми к инфекции и инфицированными членами популяции при различных условиях передачи инфекции является предметом исследования в [5]. В настоящее время эти базовые модели развиваются с учетом процесса вакцинации [6–9].

Модели SIR (“восприимчивый–заразный–удаленный”) и SEIR (“восприимчивый–зараженный–заразный–удаленный”) предполагают иммунитет выздоровевших людей ([10, 11] и ссылки в них), как и в предлагаемой модели. Однако возможность немедленного выздоровления, содержащаяся в моделях типа SIR и SEIR, весьма сомнительна для заболевания COVID-19. Наличие в этих моделях производной числа инфекционных людей по времени dI/dt определяется, в частности, членом $-\gamma I$ (где γ^{-1} – средняя продолжительность заболевания). Следовательно, суще-

ствует вероятность немедленного выздоровления, что противоречит данным о течении COVID-19.

В данной работе учтены некоторые особенности COVID-19, следующие из недавней дискретной модели эпидемии [12]. Важной особенностью используемой модели является запаздывание, учитывающее подтвержденное клиническими данными длительное вирусносительство. В отличие от запаздывания, рассматриваемого в [13], предлагаемая модель с запаздыванием предполагает, что переболевший является иммунным и в этом отношении соответствует модели SIR, а не SIS. В то же время рассматриваемая модель запаздывания не предполагает выделения отдельной категории скрытых вирусносителей (см., например, SEIR-модель с запаздыванием в [14]). Скрытые носители вируса могут заражать окружающих без запаздывания и в этом смысле подобны инфицированным, в отличие от модели SEIR. Цель данной работы заключается в получении простой оценки для минимальной величины насыщения эпидемии в условиях модели, приближенной к реальности, где есть лишь носители вируса, способные заражать в течение времени d вне зависимости от своего субъективного состояния, иммунные переболевшие и не иммунные здоровые, способные заразиться. Различие между зараженными и заразными для вируса SARS-CoV-2 и его мутантов в данной модели не предполагается существенным. Вследствие этого, в отличие от моделей типа SIR,

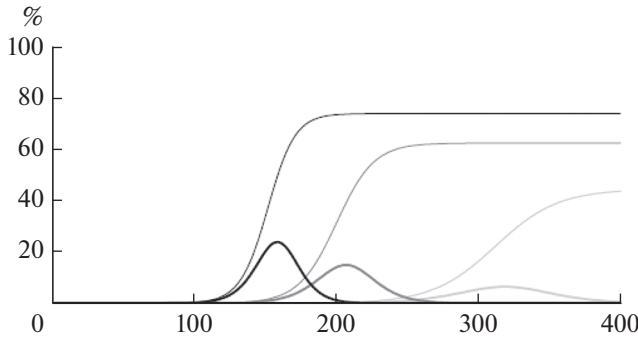


Рис. 1. Общее число заражений (тонкие кривые, выходящие на насыщение) и текущее количество зараженных (кривые с максимумами), вычисленные по формуле (1) дискретной модели [12] как функции прошедших с начала эпидемии дней.

рассматриваемая модель для замкнутой популяции имеет три независимых параметра. Один из них — средняя продолжительность заболевания d , понимаемая как продолжительность того времени, в течение которого зараженный заразен. Другой параметр, скорость передачи инфекции p , подобен числу репродуктивности R_0 в моделях SIR. Параметр p есть произведение $p = n_c k$, где n_c — среднее количество опасных контактов в день для одного инфицированного человека, а k — средняя восприимчивость к вирусу здорового человека.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Поскольку уже на ранней стадии эпидемии власти прибегают к изоляции, здесь рассматриваются замкнутые популяции (страна, регион, город и т.д.). При этом необходимо знать исходное состояние популяции, а именно количество инфицированных в начале эпидемии.

Согласно [12], дискретные уравнения, описывающие эпидемию день за днем (как и официальная статистика [8], которая здесь учитывается), имеют при $l > d$ вид

$$\begin{aligned} N_T(l) &= N_T(l-1) + N_I(l)n_c k [1 - N_T(l)/N], \\ N_I(l) &= N_T(l) - N_T(l-d+1), \end{aligned} \quad (1)$$

где $N_I(l)$ — количество инфицированных людей (носителей вируса, способных инфицировать окружающих) в день l , $N_T(l)$ — общее количество заразившихся ко дню l с начала эпидемии. При $l \leq d$ предполагается, что удаленных (выздоровевших или умерших) нет, поэтому $N_I(l) = N_T(l)$. Фактор $n_c k [1 - (N_T(l)/N)]$ отражает постепенное изменение параметра $p = n_c k$, поскольку заражение зараженного, а также удаленного (так или иначе переболевшего) предполагается невозможным.

Исключая $N_I(l)$, получаем нелинейное уравнение относительно $N_T(l)$:

$$N_T(l) = N_T(l-1) + \{N_T(l) - N_T(l-d+1)\}n_c k [1 - N_T(l)/N]. \quad (2)$$

На рис. 1 показаны кривые, соответствующие уравнениям (1) для свободно текущей эпидемии в ограниченной популяции, как процент от ее численности. Используются параметры $p = 0.15$ (черные кривые), 0.13 (темно-серые), 0.11 (светло-серые) и $d = 14$ суток. Ось x показывает число суток после первого заражения, ось y — долю затронутых членов популяции. Для расчетов использовалось начальное условие $N_I(l=1) = N_T(l=1) = 1 + n_c k$. Теория (рис. 1) описывает достижение коллективного иммунитета, зависящего от характерных параметров. Можно строго показать, что учет специальных карантинных мероприятий сводится к замене в уравнениях (1), (2) $n_c k \rightarrow n_i k$, где фактор n_i отражает снижение среднесуточного числа опасных контактов вследствие принятых карантинных мер.

В уравнении (2) можно перейти от дискретного времени l к непрерывному времени. Для этого обозначим $t = \Delta t(l-1)$, где Δt — единица времени, равная одному дню, и положим $N_T(l) = x(t)N$, $N_T(l) - N_T(l-1) = x'(t)N$. Тогда уравнение (2) переписывается как

$$x'(t) = p[x(t) - \theta(t-T)x(t-T)][1 - x(t)], \quad (3)$$

где $\theta(t)$ — ступенчатая функция Хевисайда, а $T = d-1$. Здесь предполагается, что время по-прежнему измеряется в днях, т.е. $\Delta t = 1$, иначе коэффициент p следует перенормировать.

На начальной стадии эпидемии $0 \leq t \leq T$ уравнение (3) имеет вид

$$x'(t) = px(t)[1 - x(t)], \quad (4)$$

а его решение равно

$$x_0(t) = \frac{\epsilon e^{pt}}{\epsilon e^{pt} - \epsilon + 1}, \quad (5)$$

где $x(0) = \epsilon$ определяется начальной долей вирусоносителей в популяции, способных инфицировать.

Решение (5) служит начальной функцией для уравнения (3), т.е. $x(t) = x_0(t)$ при $0 \leq t \leq T$.

Есть два стационарных решения уравнения (4), а именно неустойчивое решение $x_0(t) = 0$ и устойчивое решение $x_0(t) = 1$, которое является пределом $x_0(t)$ (5) при $t \rightarrow \infty$. Напротив, дифференциальное уравнение с запаздыванием (3) имеет произвольное стационарное решение $x(t) = C$ при $t > T$ ($0 \leq C \leq 1$). Очевидно, что в течение длительного времени любое решение уравнения (3) стремится к некоторому стационарному стабильному значению насыщения, как показано на рис. 1.

Минимальное значение насыщения можно оценить путем линеаризации уравнения (3) вблизи произвольного стационарного решения $x(t) = C$. Пусть $x(t) = C + \Delta x(t)$, тогда линеаризованное

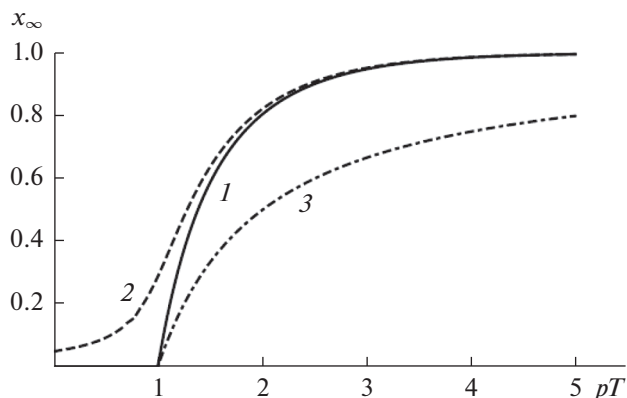


Рис. 2. Зависимость значения уровня насыщения эпидемии x_∞ от pT : 1 – $\epsilon = 10^{-6}$, 2 – 5×10^{-2} , 3 задается уравнением (7).

уравнение $\Delta x'(t) = p(1 - C)[\Delta x(t) - \Delta x(t - T)]$. Полагая, что $\Delta x(t) = \exp(\lambda t/T)$, приходим к характеристическому уравнению

$$\lambda + (e^{-\lambda} - 1)Tp(1 - C) = 0. \tag{6}$$

Один из корней этого уравнения $-\lambda = 0$. Другой действительный корень уравнения (6) отрицательный $\lambda < 0$, если $Tp(1 - C) < 1$. Другими словами, стационарное решение $x(t) = C$ устойчиво, если

$$C > \begin{cases} 0, & Tp \leq 1, \\ 1 - \frac{1}{Tp}, & Tp > 1. \end{cases} \tag{7}$$

Следовательно, значение насыщения $x_\infty(p) = \lim_{t \rightarrow \infty} x(t)$ должно превышать значение, заданное уравнением (7). На рис. 2 показана зависимость асимптотического значения решения уравнения (3) от pT , вычисленная для двух значений начального возмущения $\epsilon = 10^{-6}$ и 5×10^{-2} . Если $pT < 1$, значительного роста эпидемий нет. Для больших значений pT уровень насыщения всегда больше, чем значение, заданное уравнением (7), и стремится к единице при $pT \gg 1$. При достаточно малом значении $\epsilon \ll 1$ функция $x_\infty(p)$ стремится к универсальной кривой, не зависящей от начального возмущения (например, кривая 1 на рис. 2). Однако время, необходимое для достижения значения насыщения, зависит от начального возмущения.

Сравним полученные результаты с предсказаниями модели SIR (см., например, [11]). В рамках этой модели динамика роста доли заразившихся с начала эпидемии может быть записана как $dx(t)/dt = F(x(t))$, где

$$F(x) = p(1 - x) \left(\frac{\lg(1 - x)}{pT} + x + \epsilon \right). \tag{8}$$

Примеры роста эпидемии, рассчитанные с использованием предложенной модели (3) и SIR-модели (8), показаны на рис. 3. Для достаточно малого начального возмущения ϵ модель SIR предсказывает примерно вдвое большее время насыщения.

Как уже упоминалось, существует бесконечное количество стационарных состояний уравнения с запаздыванием (3). Напротив, помимо корня $x = 1$, существует только один корень уравнения $F(x_1) = 0$, который можно записать как $x_1(\epsilon, pT) = 1 + W(-pT\epsilon^{-pT(\epsilon + 1)})/(pT)$, где $W(z)$ – функция Ламберта [15]. Легко проверить, что стационарное состояние устойчиво, т.е. $F'(x_1) > 0$. Численно установлено, что для наиболее интересного случая малого начального возмущения $\epsilon \ll 1$ уровни насыщения, заданные обеими моделями, практически равны.

Реальное течение эпидемии требует учета характерных особенностей COVID-19, что важно для определения стратегии карантинных мероприятий. Вместо модели SIR-типа, основанной на обыкновенных дифференциальных уравнениях, получено дифференциальное уравнение с запаздыванием, вызванным большой продолжительностью COVID-19.

Данная работа ограничена закрытыми популяциями (страна, регион, город и т.д.). Конечно, между рассматриваемыми популяциями существует постоянный обмен. Однако уже на ранней стадии эпидемии власти используют меры изоляции, чтобы свести такие потоки к минимуму. Точно рассчитать трансграничную передачу инфекции до карантина невозможно. Эту первую стадию эпидемии можно условно назвать свободно текущей эпидемией, когда карантинные меры практически отсутствуют. Анализ влияния потока людей между регионами на эпидемию – отдельная задача, которую можно рассмотреть, в том числе на основе предложенной модели.

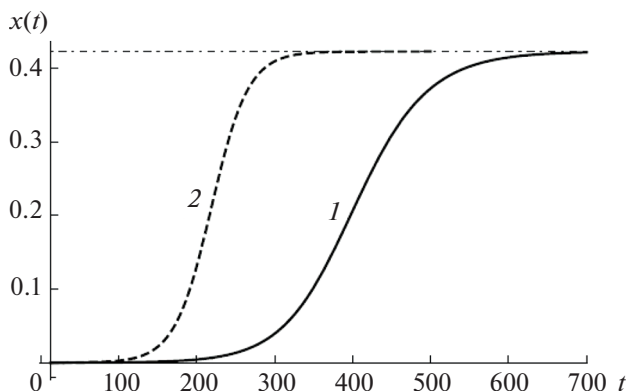


Рис. 3. Сравнение двух моделей $\epsilon = 10^{-5}$, $p = 0.1$, $T = 13$: 1 – модель SIR, 2 – уравнение с запаздыванием (3).

Существенно, что полученные результаты позволяют изучить влияние карантинных мероприятий в общем виде через зависящую от времени “функцию внешнего воздействия” путем замены p на функцию времени $p(t)$ по аналогии с дискретной моделью [12], где функции $n_i(p(t))$ находились на основе реальных статистических данных по заболеваемости в ряде стран. Роль различных карантинных мер и количественная оценка их влияния все еще не ясны и обсуждаются. Тем не менее, рассматриваемая модель позволяет найти эту функцию на начальном этапе свободного течения эпидемии обратным расчетом [12] на основе имеющихся дискретных статистических данных [16].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты таких расчетов с функцией $p(t)$ могут быть использованы для оценки воздействия карантинных мер и вакцинации для отдельных регионов и стран в целом, поскольку известны даты и типы правил административных карантинных ограничений и кампаний вакцинации. Это способ понять эффективность вводимых ограничений. В настоящей работе анализ устойчивости решений ограничен постоянным значением p для оценки того, как насыщение зависит от этой величины.

Также показано и исследовано появление коллективного иммунитета в условиях карантина. Это свойство рассматриваемой детерминированной модели с запаздывающим процессом перехода от подмножества носителей вируса V к подмножеству выздоровевших людей R , которое, как отмечено выше, отличается от известных SIR- и SEIR-моделей, включая и их модификации с запаздыванием [13, 14]. Запаздывание является характерной особенностью COVID-19, хотя в менее выраженной форме может наблюдаться и при иных инфекциях. Показано, как коллективный иммунитет может поддерживаться на низком уровне.

Представленная теория может описать весь эпидемический процесс, в том числе новые волны заражений COVID-19, наблюдаемые в настоящее время, и периодическое изменение баланса между карантинными мерами и снижением карантинных ограничений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kermack W.O., McKendrick A.G.* A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics // Proc. Royal Soc. A. 1927. V. 115. P. 700. <https://doi.org/10.1098/rspa.1927.0118>
2. *Brauer F., Castillo-Chavez C.* Mathematical Models in Population Biology and Epidemiology. Springer, 2000.
3. *Ball F.* Stochastic and Deterministic Models for SIS Epidemics Among a Population Partitioned into Households // Math. Biosci. 1999. V. 156. P. 41.
4. *Bedford J., Farrar J., Ihekweazu C., Kang G., Koopmans M., Nkengasong J.* A New Twenty-first Century Science for Effective Epidemic Response // Nature. 2019. V. 575. P. 130.
5. *Frey F., Ziebert F., Schwarz U.* Stochastic Dynamics of Nanoparticle and Virus Uptake // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122. P. 088102.
6. *Гринчук П.С., Фисенко С.П.* Физическая кинетика и моделирование распространения эпидемий // ИФЖ. 2021. Т. 94. Вып. 1. С. 1.
7. *Шнип А.И.* Кинетическая модель динамики эпидемий и ее тестирование на данных распространения эпидемии COVID-19 // ИФЖ. 2021. Т. 94. Вып. 1. С. 9.
8. *Гринчук П.С., Фисенко С.П., Шнип А.И.* Математическое моделирование влияния вакцинации на распространение эпидемии COVID-19 // Электронный препринт, апрель 2021. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.35536.64004>
9. *Rella S.A., Kulikova Y.A., Dermizakis E.T. et al.* Rates of SARS-CoV-2 Transmission and Vaccination Impact the Fate Vaccine-resistant Strains // Sci. Rep. 2021. V. 11. P. 15729.
10. *Murray J.D.* Mathematical Biology. N.Y.: Springer, 1993.
11. *Sander L.M., Warren C.P., Sokolov I.M.* Epidemics, Disorder, and Percolation // Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications. 2003. V. 325. № 1.
12. *Trigger S.A., Czerniawski E.B.* Equation for Epidemic Spread with the Quarantine Measures: Application to COVID-19 // Physica Scripta. 2020. V. 95. P. 105001.
13. *Arino J., van den Driessche P.* Time Delays in Epidemic Models. In: Delay Differential Equations and Applications / Eds. Arino O. et al. Springer, 2006. P. 539.
14. *WanJun Xia1, Soumen Kundu, Sarit Maitra.* Dynamics of a Delayed SEIQ Epidemic Model // Advances in Difference Equations. 2018. V. 336.
15. *Weisstein E.W., Lambert W.* Function, MathWorld Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/LambertW-Function.html>
16. Worldometer counter. <https://www.worldometers.info/coronavirus/2020>

УДК 621.22

НАУЧНЫЕ АСПЕКТЫ ТЕХНОГЕННОЙ АВАРИИ И ВОССТАНОВЛЕНИЯ САЯНО-ШУШЕНСКОЙ ГЭС

© 2021 г. М. П. Федоров¹, Ю. К. Петреня¹, *

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: petrenya.yk@gmail.com

Поступила в редакцию 30.12.2020 г.

После доработки 30.12.2020 г.

Принята к публикации 19.05.2021 г.

DOI: 10.31857/S0040364421060041

По масштабу, последствиям, влиянию на энергообеспечение Сибири и социально-экономические условия авария, которая произошла 17 августа 2009 г. в 8 ч 13 мин на крупнейшей гидроэлектростанции России и одной из самых мощных в мире – Саяно-Шушенской ГЭС (СШГЭС), является крупной техногенной аварией. Погибло 75 человек, произошла потеря 6400 МВт мощности, возникла угроза обледенения плотины в зимний период времени, с рисками ее повреждения и возникновения волны затопления на сотни километров [1].

Для организации аварийно-восстановительных работ, обеспечения надежности гидротехнических сооружений, восстановления и ввода в эксплуатацию СШГЭС была создана Правительственная комиссия под руководством заместителя Председателя Правительства РФ И.И. Сечина, которая в рекордные сроки обеспечила решение сложнейших задач. Работы по СШГЭС находились на постоянном контроле В.В. Путина, который много раз бывал непосредственно на СШГЭС. Знакомился с состоянием дел, проводил рабочие совещания с руководителями и участниками работ. На разных этапах в этих работах принимали участие и получили огромный опыт С.И. Шматко, Н.Г. Кутын, В.М. Зимин и другие руководители, в том числе А.В. Новак и Н.Г. Шульгинов, которые в настоящее время являются заместителем Председателя Правительства РФ и Министром энергетики РФ соответственно. Справедливо отметить ключевую роль И.И. Сечина, который организовал определение, постановку и оптимальное решение уникального комплекса проблем, не имеющих аналогов в мировой практике гидроэнергетики (рис. 1). Как членам Правительственной комиссии и комиссии Ростехнадзора авторам это хорошо известно.

Было очевидно, что без глубокого междисциплинарного научного исследования причин и условий возникновения техногенной аварии нельзя бу-

дет выйти на оптимальные решения по ликвидации ее последствий, восстановлению станции и обеспечению условий надежного функционирования всей гидроэнергетики. Как показывает длительный опыт развития техники, промышленности и энергетики, глубокое осознание важности и роли науки быстро приходит, когда возникают кризисные ситуации, аварии, пандемии. Авария на СШГЭС в этом смысле не была исключением.

Российская Академия наук активно включилась в работы на СШГЭС. Энергетика, в том числе и гидроэнергетика, относится к сфере научных интересов Секции энергетики, входящей в состав Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН (ОЭММПУ РАН). В немалой степени осознанию важности научного подхода в решении вышеуказанных проблем способствовали высокий личный авторитет академи-



Рис. 1. Председатель Правительственной комиссии, заместитель Председателя Правительства РФ И.И. Сечин и члены комиссии на Саяно-Шушенской ГЭС.



Рис. 2. Академик В.Е. Фортов – научный руководитель от РАН на СШГЭС.

ка В.Е. Фортова (рис. 2) в научных, инженерно-технических и управленческих кругах, активная позиция академиков Ю.С. Васильева, А.А. Саркисова, В.А. Глухих, С.В. Алексеенко, О.Н. Фаворского, Э.Е. Сона и других членов Секции энергетики и ОЭММПУ РАН.

Академиком-секретарем Отделения и членом Секции энергетики был тогда академик В.Е. Фортов. Он представлял Российскую Академию наук, координировал и руководил научным обеспечением всего комплекса работ от установления причин аварии, обеспечения надежности, разработки и создания нового оборудования, восстановления и запуска в эксплуатацию. Академик Фортов неоднократно в тот период времени приезжал на СШГЭС, в том числе и в первые дни после аварии, принимал личное участие в разработке и представлении результатов исследований и рекомендаций как на станции, так и в Правительстве РФ. Важная работа по изучению причин и условий развития аварии в условиях ГЭС была выполнена при его участии и под его руководством экспертной группой РАН, оперативное управление работой которой было возложено на члена-корреспондента РАН Н.А. Махутова (ОЭММПУ РАН) [2–4].

Саяно-Шушенская ГЭС им. П.С. Непорожного расположена на границе Республики Хакасия и Красноярского края, в верховьях р. Енисей (рис. 3). Плотина имеет высоту 242 м и длину по гребню 1074 м. Объем водохранилища – более 30 км³. Установленная мощность ГЭС – 6400 МВт. Десять гидроагрегатов ГЭС имеют номинальную мощность 640 МВт каждый при расчетном напоре 194 м. Общая пропускная способность турбин 3400–3600 м³/с. В 2000 г. было официально завершено строительство, которое началось в 1963 г. (при этом включение в сеть первого гидроагрега-



Рис. 3. Общий вид Саяно-Шушенской ГЭС.

та с временным рабочим колесом на пониженном напоре состоялось в 1978 г.) [5].

Десять гидроагрегатов ГЭС объединяли гидротурбину и генератор. Гидравлическая турбина типа РО230/833-В имеет параметры: мощность номинальная – 650 МВт, нормальная частота вращения – 142.8 об/мин, разгонная частота – 280 об/мин, диаметр рабочего колеса – 6.77 м, масса турбины – 154 т. Гидрогенератор типа СВФ1285/275-42 имеет параметры: полная мощность – 711 МВ А, напряжение – 15.75 кВ, диаметр расточки ротора – 11.85 м, масса генератора – 1790 т, масса ротора – 912 т. Эксплуатация под управлением группового регулирования активной и реактивной мощности (ГРАРМ) проводилась с многократным переходом не рекомендованных зон работы (210 раз), в день аварии – 6 раз.

Накануне аварии девять агрегатов СШГЭС работали под автоматическим управлением. Агрегат ГА-2 был введен в работу под автоматическим управлением в качестве приоритетного в 23:14 (16.08.2009 г.). В период времени с 23:14 (16.08.2009 г.) до момента аварии в 8:3 (17.08.2009 г.) агрегат ГА-2 пять раз проходил nereкомендуемую режимную зону II, которая характеризуется повышенным уровнем динамических нагрузок и вибраций. Во время шестого прохода зоны II произошла авария (рис. 4).

Произошел обрыв крепления крышки турбины и выталкивание вверх многотонного агрегата. Большой объем воды, который успел поступить до закрытия затвора, затопил машинный зал. В результате аварии часть машинного зала была разрушена, несколько агрегатов были повреждены, часть агрегатов, электротехническое и вспомогательное оборудование были залиты водой и вышли из строя. Вес “поднявшейся вверх” части агрегата ~1700 т (колесо турбины – 154 т, крышка турбины – 379 т, ротор генератора – 912 т, вал с подшипниками и подпятником – 242 т).



Рис. 4. Вид гидроагрегата ГА-2 после аварии.

Крышка турбины крепилась 80 шпильками М80. Материал шпилек – Ст35 с пределом прочности 530 МПа. Большинство разрушившихся шпилек имели усталостный характер, свидетельствующий о разрушении в условиях действия переменных нагрузок (асимметричного усталостного нагружения). Шесть шпилек имели полную длину и сохранили резьбу, что с учетом особенностей конструкции крепления крышки турбины и его разрушения может свидетельствовать об отсутствии (самоотвинчивании) на них гаек в момент разрушения. Средняя площадь усталостного излома обследованных шпилек составляла ~65%, что говорит о временном характере развития усталостных трещин. В определенной степени время роста усталостной трещины должно коррелировать с временем роста вибрации (рис. 5).

Над выяснением причин возникновения, характера и условий развития аварии работало большое количество ученых, специалистов и инжене-

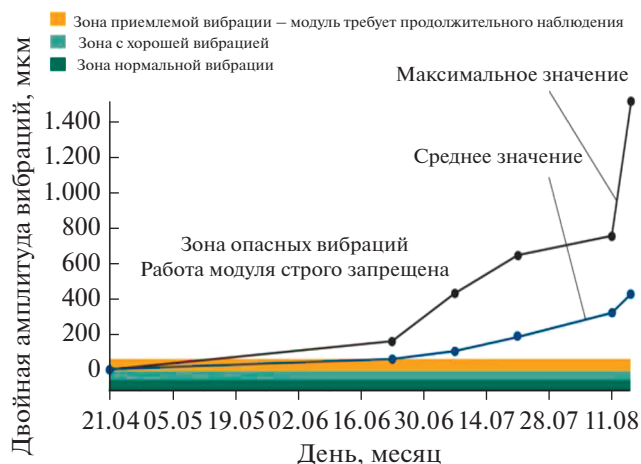


Рис. 5. Изменение вибрации со временем.

ров, представляющих академическую, вузовскую и отраслевую науку, промышленность и эксплуатацию. Их работа и выводы в очередной раз подтвердили ключевое значение глубокого знания и понимания фундаментальных основ физических процессов и явлений, протекающих в сложном оборудовании. Без этого невозможны разработка, создание и обеспечение эффективной и надежной эксплуатации гидрооборудования и гидротехнических сооружений. Для гидроагрегата это сложная комбинация гидродинамики, механики конструкций и материалов, материаловедения, электромагнетизма, процессов управления и других областей науки применительно к многокомпонентной динамической системе, имеющей большую массу и габариты.

Крупногабаритный массивный ротор при вращении является одним из основных источников возникновения вибраций. Нормируемым показателем вибрационного сигнала является размах перемещений ротора (их двойная амплитуда). Кроме источников вибрации, характерных для электромеханической динамической системы, какой является гидроагрегат, рассматривались внешние источники вибрации. Учеными СО РАН подробно исследовался вопрос корреляции сейсмических воздействий и вибрационного состояния гидроагрегата [6].

Гидродинамические процессы в гидравлическом тракте, которые в течение ряда лет исследовались в совместных работах Института теплофизики СО РАН и “Силовых машин”, также приводят к возникновению дополнительных, в том числе переменных и динамических, нагрузок на конструктивные элементы гидроагрегата. При прохождении потока через рабочее колесо гидротурбины возникают нестационарные гидродинамические процессы в виде вихревых дорожек, сбегаящих с выходных кромок лопастей (рис. 6). Такого рода пространственные эффекты на кромках лопастей относятся к вихрям Кармана.

В гидравлическом тракте гидроагрегата высоконапорной ГЭС, включающем спиральную камеру,

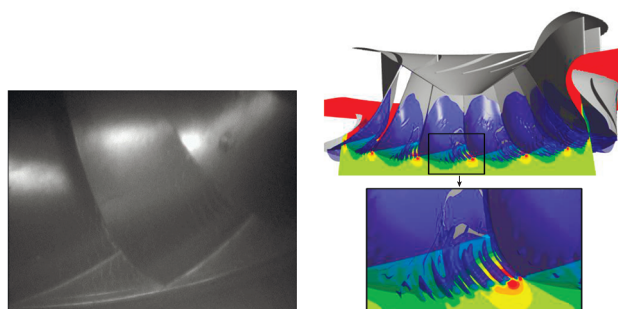


Рис. 6. Вихри Кармана на выходных кромках лопастей рабочего колеса радиально-осевой гидротурбины.

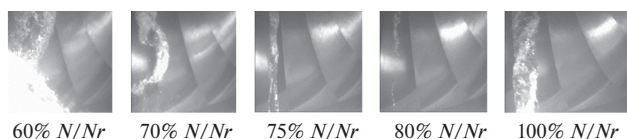


Рис. 7. Вихревая (жгутовая) структура потока за рабочим колесом радиально-осевой гидротурбины для различных уровней нагрузки.

направляющий аппарат, рабочее колесо и отсасывающую трубу, происходят сложные нестационарные процессы, которые приводят к пульсациям давления, кавитации и гидравлическим ударам. В отсасывающей трубе за рабочим колесом возможно образование мощного вихревого (кавитационного) жгута (рис. 7). При развитии гидродинамической неустойчивости в интенсивном вихре жгут начинает вращаться (прецессировать) вокруг центральной оси потока.

Гидродинамические возмущения могут привести к возникновению в отсасывающей трубе резонансных колебаний, которые называют гидроакустическим резонансом [7, 8]. Кроме гидроакустического резонанса в водяном тракте в работе ВТИ было предложено рассмотреть возможность возникновения “органных” гидроупругих колебаний [9]. Нестационарные гидродинамические процессы, проявляющиеся при работе гидроагрегата, практически не моделируются в условиях стендовых испытаний моделей рабочих колес. Характерный уровень частоты для пульсаций потока и собственных частот составляет единицы герц и близок к частоте затухающих колебаний активной мощности, вызванных переходными электро-механическими процессами. Уменьшению натяга шпилек разъема могут способствовать не характерные для нормальной эксплуатации гидроагрегата частоты нагружения, а частоты на один—два порядка превышающие типичные частоты вибрации.

Зоны нестационарности с высоким уровнем вибраций характерны для высоконапорных радиально-осевых гидротурбин (рис. 8). При увеличении напора и подъеме мощности в пределах зоны 1 вибрационное состояние гидроагрегата является удовлетворительным. При переходе в зону 2 резко возрастают пульсации потока, увеличивается амплитуда вибраций, поэтому зона 2 считается переходной и не рекомендуемой для длительной эксплуатации. После выхода из зоны 2 и переходе в зону 3 пульсации потока и уровень вибраций опять возвращаются к приемлемому. Как правило, эти зоны, рекомендуемые и не рекомендуемые для длительной эксплуатации, определяются и регламентируются при натурных испытаниях гидроагрегата. Научная проблема адекватного расчетного определения и моделирования этих зон при стендовых

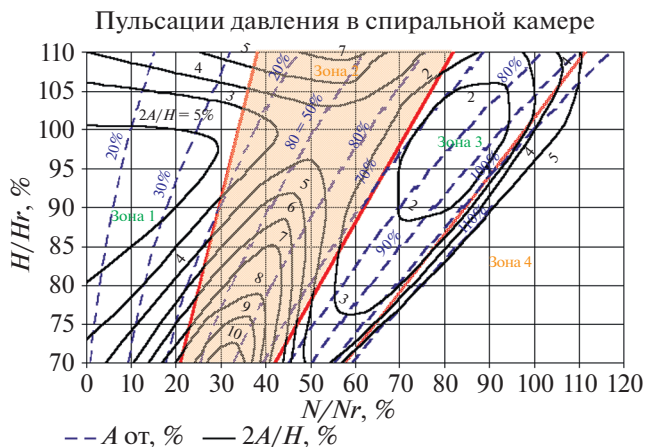


Рис. 8. Зоны нагрузок (рекомендованных и не рекомендованных для длительной эксплуатации) радиально-осевой гидротурбины.

испытаниях для натуральных условий сохраняет свою актуальность и в настоящее время.

Выполненный комплекс научных исследований, экспертиза результатов и предложенных мероприятий позволили провести восстановление СШГЭС на принципиально новом техническом уровне. Например, конструкция нового гидроагрегата позволила в разы снизить уровень вибраций (рис. 9). Были расширены рекомендуемые диапазоны работы и сужен диапазон работы, не рекомендуемой для длительной эксплуатации гидроагрегата. Впервые в мировой гидроэнергетике система виброконтроля состояния гидроагрегата включена в систему защит ГЭС. Она имеет 3 канала дублирования, обеспечивает получение достоверных результатов измерений, в том числе и при низких частотах (0,8–1 Гц). При этом важно отметить, что дальнейшее развитие методов моделирования динамического поведения таких сложных

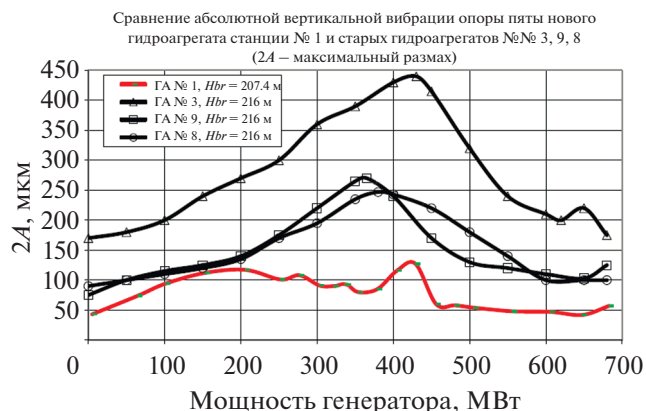


Рис. 9. Амплитуда вертикальной вибрации опоры подпятника ГА-1 новой конструкции и ГА-3, ГА-8 и ГА-9 старой конструкции.



Рис. 10. Машинный зал Саяно-Шушенской ГЭС.

электромеханических систем, как гидроагрегаты, продолжает сохранять свою актуальность, особенно с учетом перспективных требований к вторичному регулированию частоты и мощности с участием ГЭС.

Вышеперечисленные работы и исследования составляют важную часть, но не закрывают весь комплекс исследований по СШГЭС, которые позволили отметить необходимость дальнейших фундаментальных работ по таким темам, как разработка принципов оптимального формирования сложных природно-технических систем с гидроэнергетическими объектами, разработка правил каскадного регулирования и оптимизации управления водными ресурсами на многоагрегатных ГЭС, расчет условий и параметров запроектных аварий и выработка рекомендаций по их предотвращению и снижению ущерба и др.

Полное восстановление ГЭС с заменой всех 10 гидроагрегатов было завершено в декабре 2014 г., т.е. практически через пять лет после аварии [10, 11] (рис. 10). Огромную роль в успешном выполнении всех восстановительных работ сыграли ученые РАН, в первую очередь представляющие Отделение энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН. Академик В.Е. Фортов в сложнейших условиях, в том числе очень трудных морально и психологически на пер-

вых этапах работ, организовал работу Академии наук по научному обеспечению и успешному решению комплекса крупных проблем, включая полное восстановление и запуск в эксплуатацию СШГЭС. Конечно, этому способствовал огромный научный и личный авторитет Владимира Евгеньевича Фортова среди руководителей, ученых, специалистов и инженерно-технических работников гидроэнергетики и в целом энергетической отрасли страны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Акт технического расследования причин аварии, произошедшей 17 августа 2009 года в филиале Открытого акционерного общества "РусГидро – Саяно-Шушенская ГЭС им. П.С. Непорожного".
2. *Фортов В.Е., Федоров М.П., Елистратов В.В.* Научно-технические проблемы гидроэнергетики после аварии на Саяно-Шушенской ГЭС // Вестник РАН. 2011. Т. 81. № 7. С. 579.
3. *Petrenya Y.K.* Restoration of Hydro Units for Sayano-Shushenskaya Hydro Power Plant // Int. Conf. "Hydro-Vision Brazil 2011". Rio de Janeiro, Sept. 2011. P. 56.
4. *Махутов Н.А., Петреня Ю.К., Гаденин М.М., Иванов С.В.* Факторы оценки напряженных состояний, прочности и ресурса ответственных резьбовых соединений // Заводская лаборатория. 2014. № 07(80). С. 44.
5. *Ковалев Н.Н.* Гидротурбины. Л.: Машиностроение, 1971.
6. *Курзин В.Б., Селезнев В.С.* О механизме возникновения высокого уровня вибраций турбин Саяно-Шушенской ГЭС // ПМТФ. 2010. Т. 51. № 4. С. 166.
7. *Лобановский Ю.И.* Автоколебания напорных систем и разрушение гидроагрегатов // Гидротехническое строительство. 2010. № 7. С. 39.
8. *Окулов В.А., Пылев И.М.* Неустойчивость напорных систем // Докл. РАН. Энергетика. 1995. Т. 341. № 4. С. 470.
9. *Тарасов В.Н.* Гидроупругие колебания агрегатов ГЭС // Гидротехническое строительство. 2012. № 1. С. 13.
10. *Демьянов В.А., Богуш Б.Б., Петреня Ю.К.* Разработка, изготовление, поставка и приемка гидротурбинного оборудования, выполнение услуг для Саяно-Шушенской ГЭС. 1885-19-1т. 2009. 71 с.
11. *Новожилов В.Ю., Богуш Б.Б., Петреня Ю.К.* Разработка, изготовление, поставка и приемка гидрогенераторного оборудования, выполнение услуг для Саяно-Шушенской ГЭС. 1885-26-1т. 2009. 71 с.

XXXVI МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ “ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИНТЕНСИВНЫХ ПОТОКОВ ЭНЕРГИИ С ВЕЩЕСТВОМ”

E-mail: elbrus@ihed.ras.ru

DOI: 10.31857/S004036442106020X

XXXVI Международная конференция “Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом” (XXXVI International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter) проводилась с 1 по 6 марта 2021 г. онлайн и в пансионате “Чегет” на поляне Чегет в поселке Терскол, сельское поселение Эльбрус, Кабардино-Балкария, Россия. В этом году мероприятие было посвящено 75-летию со дня рождения академика Владимира Евгеньевича Фортова (23.01.1946–29.11.2020). Конференция продолжила серию заседаний по физике высоких плотностей энергии, начатую на I Всесоюзном совещании по уравнениям состояния, состоявшемся в “Чегете” в октябре 1978 г.

В 2021 г. мероприятие было организовано Объединенным институтом высоких температур (ОИВТ) РАН, Москва, Институтом проблем химической физики (ИПХФ) РАН, Черноголовка, и Кабардино-Балкарским государственным университетом им. Х.М. Бербекова (КБГУ), Нальчик, при финансовой поддержке Кабардино-Балкарского научного центра РАН, Нальчик, и технической поддержке ООО “Форум-СМ”, Черноголовка.

Организационный комитет конференции возглавили председатели академик В.Е. Фортов (ОИВТ РАН) и проф. Б.С. Карамурзов (КБГУ). В состав оргкомитета вошли заместители председателя К.В. Хищенко (ОИВТ РАН) и В.Г. Султанов (ИПХФ РАН), ученый секретарь конференции М.А. Кадатский (ОИВТ РАН), еще тридцать два ученых из России, Великобритании, Германии, Китая и США, в том числе присутствующие на заседаниях проф. Н.Е. Андреев, проф. Л.Г. Дьячков, проф. В.В. Стегайлов (ОИВТ РАН), акад. Г.Н. Рыкованов (Российский Федеральный ядерный центр [РФЯЦ] – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. Е.И. Забахина, Снежинск), проф. А.П. Савинцев (КБГУ) и проф. С.И. Кривошеев (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург).

Программа конференции состояла из 7 пленарных, 77 обычных устных и 185 стендовых докладов. В них представлены результаты работ 676 соавторов из 131 института из 12 стран (Россия, Беларусь, Великобритания, Германия, Китай, Румы-

ния, США, Турция, Франция, Чехия, Швейцария, Япония). Для участия в заседаниях в поселок Терскол приехали 115 ученых из разных городов России; еще 65 ученых из России, Германии, Китая и США участвовали в заседаниях онлайн.

Тематика докладов включала взаимодействие интенсивного электромагнитного излучения и мощных корпускулярных пучков с веществом; физику ударных волн, детонации и горения; уравнения состояния и определяющие соотношения для вещества в экстремальных условиях при высоких давлениях и температурах; экспериментальные методы генерации и диагностики экстремальных состояний вещества; методы математического моделирования в физике экстремальных состояний вещества; высокоэнергетические астрофизические явления; физику низкотемпературной плазмы; физико-технические проблемы энергетики, технологические аспекты.

На устных заседаниях был представлен 91 доклад, в том числе 7 пленарных обзорных докладов (из них 3 онлайн), 57 устных докладов (34 онлайн) и 27 кратких онлайн-презентаций стендовых докладов. Обзорные доклады прозвучали об уравнениях состояния Фортова (К.В. Хищенко); об особенностях фазовых переходов в неидеальной плазме (И.Л. Иосилевский, ОИВТ РАН); о структурировании, ковке и изготовлении микроламината с помощью лазера (Н.А. Иногамов, Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка); об атомистическом моделировании генерации наночастиц путем короткоимпульсной лазерной абляции двухслойной серебряно-медной мишени в жидкости (Л. Жигилей, Университет Виржинии, Шарлотсвилл, США); о бескислородном горении – одной из недавних идей В.Е. Фортова (А.В. Еремин, ОИВТ РАН); о законе подобия атомных номеров в индивидуальных электронных оболочках всех природных элементов (Г.В. Шпатаковская, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва); о термодинамике неидеальной плазмы в модели SAHA (В.К. Грязнов, ИПХФ РАН).

Среди молодых участников был проведен традиционный конкурс на лучший стендовый доклад. Победителями признаны четверо: Я.М. Андреева

(Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург) со стендом о лазерном контроле оптических свойств нанокompозитов на основе TiO_2 ; Н.А. Грачёва (Челябинский государственный университет, Челябинск) — о моделировании ударно-волновых процессов в гранецентрированных кубических металлах с помощью искусственной нейронной сети; Е.В. Суханова (Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва) — об индуцированной спиновой поляризации в графене за счет взаимодействия с монослоями MoS_2 и MoSe_2 , легированными галогенами; И.К. Некрасов (Казанский федеральный университет, Казань) — об экспериментальном исследовании индуктивно связанной высокочастотной плазмы в широком диапазоне частот.

Сборник тезисов доступен на сайте <http://www.ihed.ras.ru/elbrus21>. Труды конференции издаются в журналах *Mathematica Montisnigri* и *Journal of Physics: Conference Series*.

На заключительном заседании участниками было единогласно принято решение о присвоении этой серии научных встреч имени академика В.Е. Фортова.

Следующая XXXVIII Фортовская международная конференция “Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом” (XXXVIII Fortov International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter) запланирована в Приэльбрусье с 1 по 6 марта 2023 г. (<http://www.ihed.ras.ru/elbrus23>).

Заместитель председателя К.В. Хищенко