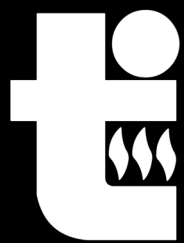


Вестник ОИВТ РАН
Том 8 №2 (2022)



Вестник Объединенного института высоких температур

Vestnik Obedinennogo Instituta Vysokih Temperatur

Том 8

Декабрь 2022

ВЕСТНИК ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

Рецензируемый научный журнал “Вестник ОИВТ РАН” — электронное научное издание, созданное в 2018 г. Журнал публикует оригинальные исследования и обзоры по следующим тематикам:

- низкотемпературная плазма,
- теплофизические свойства веществ,
- теплообмен и физическая газодинамика,
- горение и детонация,
- экстремальные состояния вещества,
- проблемы энергетики,
- методы экспериментальных исследований и измерений.

Главный редактор: академик РАН Петров О.Ф.

Редакционная коллегия:

д.ф.-м.н. Амиров Р.Х.,
д.ф.-м.н. Андреев Н.Е.,
член-корр. РАН Вараксин А.Ю.,
д.ф.-м.н. Васильев М.М.,
д.ф.-м.н. Гавриков А.В.,
д.ф.-м.н. Ерёмин А.В.,
д.ф.-м.н. Жук А.З.,
д.т.н. Зейгарник Ю.А.,
д.ф.-м.н. Кобзев Г.А. (зам. главного редактора),
к.ф.-м.н. Левашов П.Р.,
к.ф.-м.н. Морозов И.В.,
д.ф.-м.н. Стегайлов В.В.,
к.ф.-м.н. Хищенко К.В.,
д.ф.-м.н. Храпак А.Г.

Адрес редакции:

125412, Москва, ул. Ижорская 13, стр.2

Тел.: (495) 485-94-09

e-mail: vestnik@jiht.ru

<http://vestnik.jiht.ru>

Содержание

Низкотемпературная плазма

Валинуров М. А., Гавриков А. В., Лизякин Г. Д., Ойлер А. П., Тимирханов Р. А., Распространение фронта азимутальных колебаний потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом 4

Теплофизические свойства веществ

Шейндлин М. А., Брыкин М. В., Бгашева Т. В., Васин А. А., Вержишико П. С., Петухов С. В., Фролов А. М., Поведение карбида тантала при его интенсивном лазерном нагреве в воздухе 9

Гальцов И. С., Минаков Д. В., Влияние учета спиновой поляризации на *ab initio* расчеты теплового расширения твердого железа 13

Смирнов О. М., Ленёв Д. Ю., Писарев В. В., Изучение транспортных свойств н-нонана в модели SAFT- γ Mie . 18

Теплообмен и физическая газодинамика

Яковенко И. С., Котельников А. Л., Киверин А. Д., Оптимизация процесса холодного напыления металлов для аддитивных технологий 22

Васильяк Л. М., Гаджиев М. Х., Куликов Ю. М., Панов В. А., Моделирование взаимодействия высокоэнтальпийной струи газа с материалом образца 28

Хохлов В. А., Иногамов Н. А., Формирование цилиндрической полости под действием узкого пучка жесткого рентгеновского лазера 38

Мочалов А. А., О возможности использования PIV для изучения двухфазных нестационарных вихрей 45

Горение и детонация

Яковенко И. С., Котельников А. Л., Киверин А. Д., Влияние дисперсных капель воды на ускорение пламени и переход к детонации 48

Экстремальные состояния вещества

Бухарский Н. Д., Корнеев Ф. А., Особенности взаимодействия фемтосекундного релятивистского лазерного импульса с поверхностью при больших углах падения в двумерной и трехмерной геометрии 53

Рязанцев С. Н., Скобелев И. Ю., Куликов Р. К., Пикуз С. А., К вопросу об измерении потенциала ионизации в неидеальной плазме путем резонансного зондирования рентгеновским лазером 59

Методы экспериментальных исследований и измерений

Овчинников А. В., Чефонов О. В., Динамика генерации свободных носителей в кремнии под действием ультракоротких интенсивных терагерцевых импульсов 64

Селивонин И. В., Моралев И. А., Повышение пространственного разрешения при измерении поверхностного заряда методом емкостных зондов 68

Распространение фронта азимутальных колебаний потенциала плазмы в отражательном разряде с термокатодом

М. А. Валинуров^{1,2}, А. В. Гавриков¹, Г. Д. Лизякин¹, А. П. Ойлер^{1,2} и
Р. А. Тимирханов¹

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

² Московский физико-технический институт (государственный университет),
Институтский пер., 9, Долгопрудный 141701, Россия

E-mail: valinurov.ma@phystech.edu

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2022 г.

Аннотация. Присутствие скрещенных электрического и магнитного полей в плазме вызывает дрейфовое движение в направлении, перпендикулярном обоим полям. Конфигурация из радиального электрического поля и аксиального магнитного поля порождает азимутальное вращение плазмы и при этом могут возникать различные плазменные неустойчивости. Данная работа посвящена изучению азимутальных колебаний потенциала плазмы в плазменном столбе отражательного разряда. В работе при помощи зондовых методов были экспериментально получены и проанализированы временные зависимости плавающего потенциала плазмы. Было обнаружено, что происходит периодическое возмущение потенциала плазмы, которое может быть объяснено в рамках гипотезы о возникновении в объеме разряда вращающейся спицевой структуры. Определена азимутальная скорость распространения этого возмущения и показано, что она, при учете вращения плазмы как целого, совпадает со скоростью ионного звука. <https://doi.org/10.33849/2022201>

1. ВВЕДЕНИЕ

В наши дни одним из популярных направлений для исследований является плазма в скрещенных электрическом и магнитном полях, так как такая конфигурация применяется во множестве современных устройств [1]. В качестве примеров можно привести ускоритель Холла [2] или устройства для масс-сепарации, такие как масс-фильтр Т. Окавы [3] и масс-сепаратор В.П. Смирнова [4, 5]. Одной из распространенных проблем, зачастую возникающих в подобных устройствах, являются различные волны и неустойчивости [6], которые могут существенно влиять на результат работы конкретного устройства. В случае масс-сепаратора В.П. Смирнова [4, 5], ионы разделяемых веществ движутся в скрещенных полях в плазме, при этом важную роль играет ее потенциал [7]. Его колебания могут существенно повлиять на траектории ионов и изменить место их осаждения, тем самым ухудшая результат сепарации. Изучение пространственных и временных зависимостей распространения возмущений потенциала плазмы позволит лучше понять их физическую природу и учесть влияние при конструировании плазменных устройств. Настоящая статья посвящена экспериментальному исследованию азимутальной составляющей такого возмущения в цилиндрической геометрии в отражательном разряде с термокатодом.

2. МЕТОДЫ

Исследования проводились в цилиндрической установке длиной 230 см, с внутренним диаметром 86 см, и диаметром плазменного столба 50 см, при наличии аксиального магнитного поля 1.4 кГс. Схема установки приведена на рисунке 1. На противоположных торцах установки расположены два катода, один из них имеет диаметр 50 см, другой — 70 см. Анодом служит заземленная цилиндрическая поверхность вакуумной камеры. В центре одного из катодов установлен термокатод из гексаборида лантана (LaB_6). Таким об-

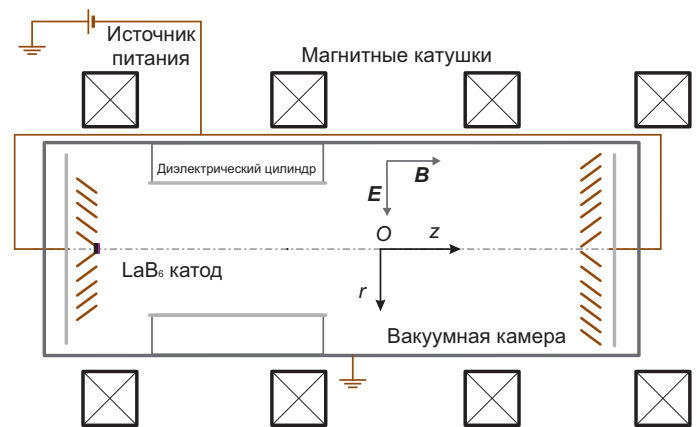


Рисунок 1. Схема экспериментальной установки.

разом в установке формируется отражательный разряд с термоэмиссионным катодом. Характерное радиальное электрическое поле, возникающее в таком разряде, составляло 15 В/см [5]. В установку с постоянным натеканием 3.5 SCCM (Standard Cubic Centimeter per Minute) подается рабочий газ — аргон. Для изучения колебаний потенциала плазмы использовался одиночный зонд, находящийся под плавающим потенциалом [8]. Для исследования распространения фронта волны в азимутальном направлении использовался четырехканальный плавающий зонд, расположенный в круговом сечении разрядной камеры. Фактически он представляет собой четыре изолированных друг от друга одиночных плавающих зонда. Схема его расположения в сечении экспериментальной установки приведена на рисунке 2, также на нем изображена траектория дрейфа заряженного иона аргона под действием скрещенных электрического и магнитного полей. Полученные при помощи зондов временные зависимости потенциала плазмы от времени анализировались при помощи методов Фурье-анализа, а также кросс- и автокорреляций [9].

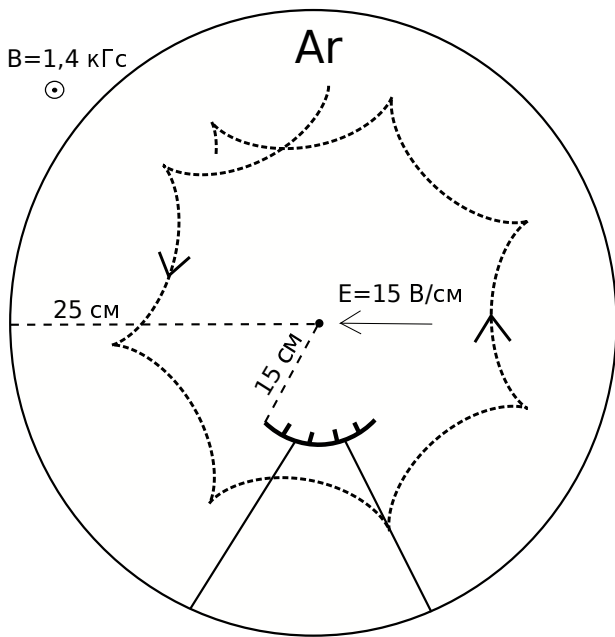


Рисунок 2. Схема расположения четырехканального плавающего зонда.

3. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Первая серия экспериментов проводилась с одиночным плавающим зондом. Давление составляло 0.34 мТорр, ток разряда 10 А, напряжение на катодах — 550 В. Данные снимались при четырех значениях радиальной координаты (т.е. расстояниях r от оси камеры): 5, 10, 15 и 20 см. Характерный вид получаемой временной зависимости плавающего потенциала при фиксированной координате расположения зонда приведен на рисунке 3(a). Каждый сигнал записывался в течение 100 мс с шагом дискретизации 0.1 мкс. Вторая серия экспериментов проводилась со статичным четырехканальным плавающим зондом на радиальной координате $r = 15$ см. Рабочее давление аргона составляло 0.25 мТорр, ток разряда 12 А, напряжение — 550 В. В первом эксперименте этой серии расстояния между регистрирующими элементами зонда составили 1.8 см, 1.8 см и 5.4 см, во втором — все расстояния составили 7.2 см. На рисунке 3(б) приведены типичные временные зависимости плавающего потенциала, получаемые с двух соседних элементов. Хорошо заметно, что сигналы в значительной мере повторяют друг друга, но при этом один немного отстает от другого. Каждый сигнал записывался в течение 1 мс с шагом дискретизации 0.4 мкс.

4. ОБРАБОТКА И АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для зависимостей плавающего потенциала от времени, полученных в первой серии экспериментов, были рассчитаны среднеквадратичные отклонения от среднего значения (абсолютное и относительное). Графики зависимостей этих величин от радиальной координаты приведены на рисунке 4. Кроме того, для них были построены спектры, которые сглаживались методом скользящего среднего с окном 750 Гц. Получившиеся спектры и их усреднение приведены на рисунке 5. В качестве характерных особенностей можно выделить су-

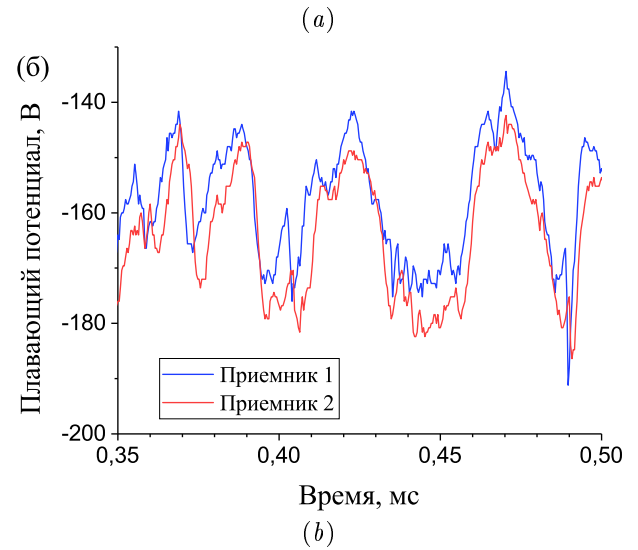
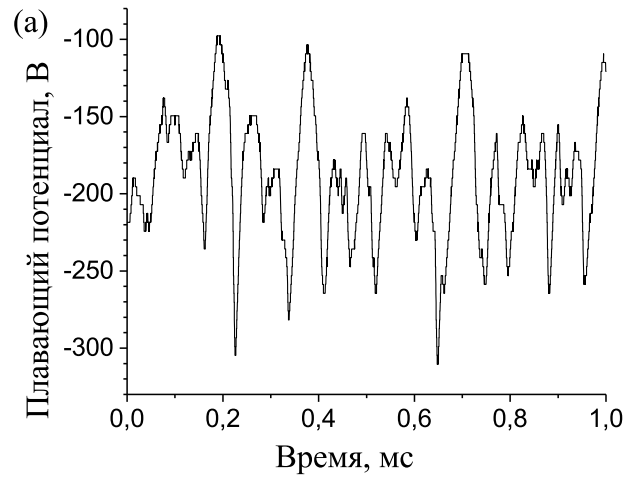


Рисунок 3. Характерный вид сигнала, полученного: (a) одиночным плавающим зондом, (b) регистрирующими элементами четырехканального зонда.

щественный спад амплитуды спектральных компонент при частотах более 20 кГц. Также для полученных в этой серии экспериментов зависимостей плавающего потенциала от времени был рассчитана автокорреляционная функция

$$\zeta(f, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)f(t+T)dt, \quad (1)$$

здесь f — функция сигнала (плавающий потенциал плазмы), T — время запаздывания. При интегрировании рассматривались участки сигнала длиной 0.1–1 мс. Пример полученной функции приведен на рисунке 6. Можно видеть, что пики автокорреляционной функции расположены эквидистантно. Это значит, что возмущение повторяется в данной точки пространства с некоторой периодичностью. В ходе анализа данных, полученных во второй серии экспериментов, был проведен кросскорреляционный анализ зависимостей плавающего потенциала от времени, получаемых с разных приемников четырехканального зонда:

$$\xi(g_1, g_2, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(t)g_2(t+T)dt, \quad (2)$$

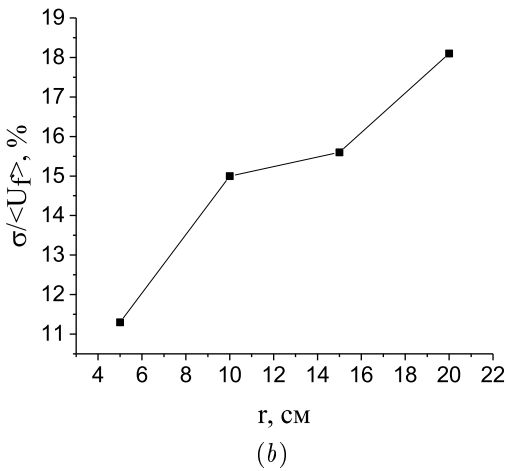
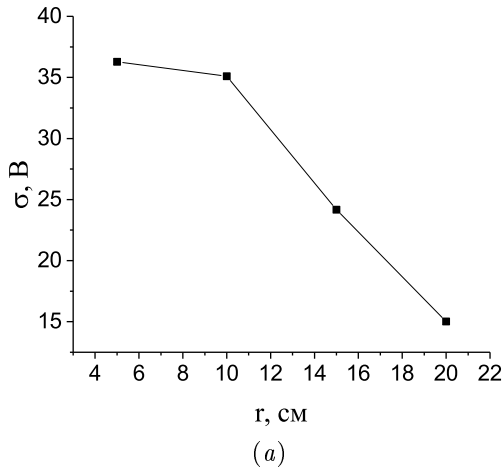


Рисунок 4. Зависимость (а) среднеквадратичного и (б) относительного среднеквадратичного отклонений плавающего потенциала плазмы от среднего значения.

где g_1, g_2 — функции сигнала с двух разных каналов, T — время смещения одного из сигналов относительно другого. Пример кросскорреляционной функции приведен на рисунке 7, в этом случае наблюдается ярко выраженный пик кросскорреляционной функции при $T = T_{max} = 5.2$ мкс. Это время может быть интерпретировано как время прохождения фронта возмущения плавающего потенциала плазмы от одного канала четырехканального зонда к другому (т.е. вдоль азимутальной координаты). Скорость распространения такого возмущения может быть оценена следующим образом: $v_f = l/T_{max} = 7.2 \text{ см}/5.2 \text{ мкс} = 14 \text{ км/с}$, где l — расстояние между регистрирующими элементами зонда, которое в рассматриваемом случае равно 7.2 см. Во всех экспериментах второй серии эта скорость оказывалась близкой к 14 км/с. Сравним полученную скорость с ионно-звуковой и магнито-звуковой скоростями, а также со скоростью вращения плазмы. Результаты расчетов приведены в таблице 1, при этом значения скорости вращения плазмы v_{rot} и температуры электронов $T_e = 6$ эВ взяты из работы [10]. По полученным результатам видно, что магнито-звуковая скорость существенно больше найденной скорости распространения возмущения потенциала v_f , в то время как

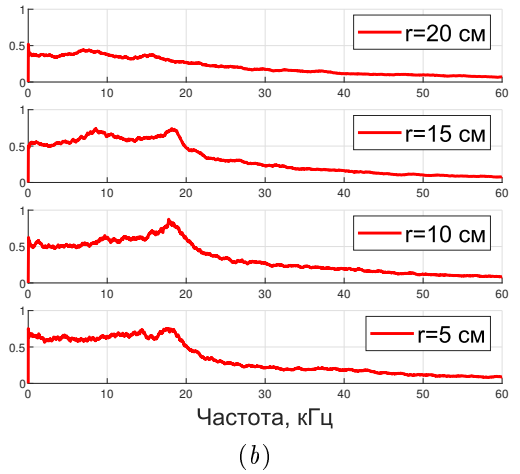
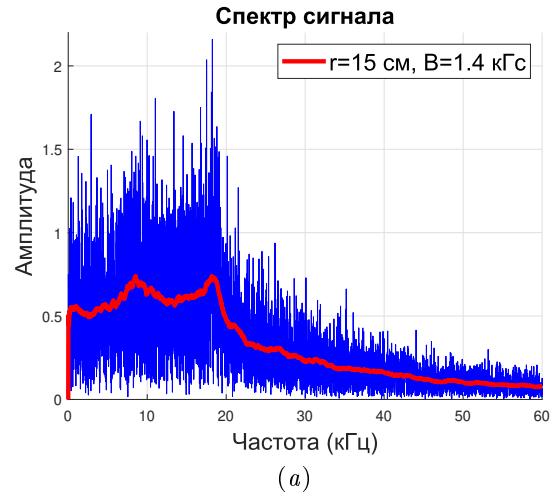


Рисунок 5. (а) Пример спектра колебаний потенциала плазмы, (б) усредненные спектры на различных координатах.

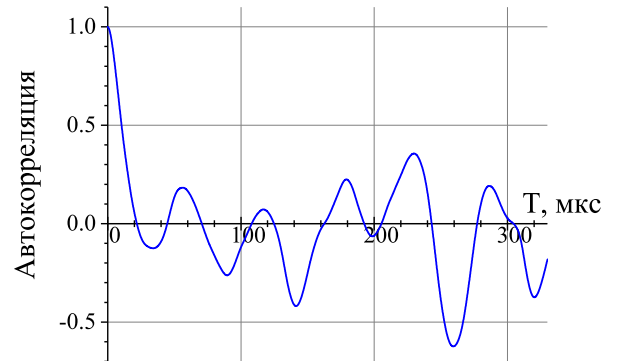


Рисунок 6. Автокорреляционная функция зависимости плавающего потенциала от времени.

ионно-звуковая скорость и скорость вращения плазмы близки к ней по порядку величины. Более того, их сумма составляет $v_{rot} + v_{ion-s} = 13 \text{ км/с} \approx v_f$. Рассмотрение суммы этих скоростей имеет смысл, так как ионно-звуковая скорость рассчитывается относительно неподвижной плазмы, в то время как в эксперименте у плазмы присутствует дополнительная компонента скорости вдоль азимутальной оси.

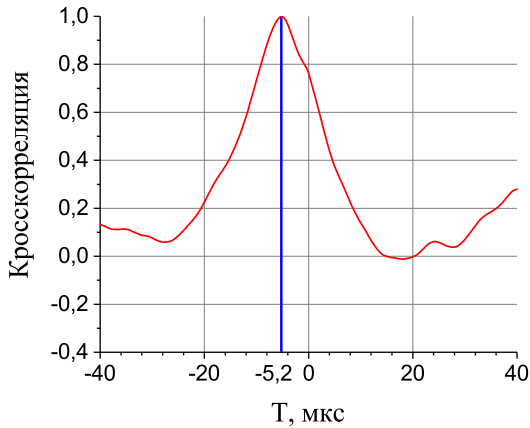


Рисунок 7. Пример кросскорреляционной функции сигналов с двух соседних регистрирующих элементов четырехканального плавающего зонда, находящихся на расстоянии 7.2 см.

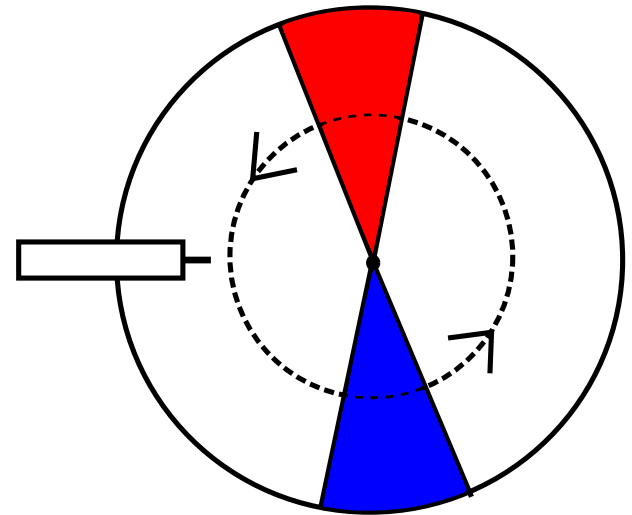


Рисунок 8. Схематичное изображение спицы. Красным цветом показано положительное возмущение потенциала, синим — отрицательное.

Таблица 1. Сравнение скорости распространения фронта с другими характерными скоростями.

Измеренная скорость фронта	Ионно-звуковая скорость	Магнито-звуковая скорость	Скорость вращения плазмы
v_f	$\sqrt{\frac{T_e}{m_i}}$	$\frac{B}{\sqrt{4\pi\rho}}$	v_{rot}
14	4	150	9

В качестве возможного объяснения всех приведенных выше наблюдений может быть выдвинута гипотеза о существовании некоторой спицевой структуры [11], вращающейся в круговом сечении разрядной камеры со скоростью, близкой к сумме скорости вращения плазмы и ионно-звуковой скорости. Под спицей в данном случае подразумевается некоторая пространственная структура, формирующаяся в плазме вдоль диаметра разряда и вращающаяся в первом приближении твердотельным образом. Схематичное изображение спицы приведено на рисунке 8. Подобные крупномасштабные структуры встречаются в разрядах со скрещенными ЕхВ полями [12]. Гипотеза о существовании спицы объясняет постоянство частот пиков на спектре колебаний потенциала плазмы на различных координатах (см. рисунок 4(б)). Полученные выше результаты позволяют оценить количество одновременно существующих в разряде таких спицевых структур. Автокорреляционные зависимости позволяют сделать предположение о симметричном расположении и синхронном вращении спицевых структур. Тогда, если предположить одновременное существование k спиц, то характерная частота изменения сигнала на зонде (с учетом найденной скорости $v_f=14$ км/с): $v_k = v_f k / 2\pi r = k \times 15$ кГц. Отметим, что 15 кГц входит в основную часть спектра исследуемых сигналов, в то время как уже на 30 кГц спектр иссякает, т.е. $k = 1$ и в рассматриваемых экспериментах существовала только одна спица. Следует отметить, что гипотеза о существовании спицы также

позволяет на базе рассматриваемой автокорреляционной функции оценить скорость распространения возмущения в азимутальном направлении (или скорость вращения спицевой структуры): среднее расстояние между максимумами автокорреляционной функции (рисунок 6) $\langle T_f \rangle = 58$ мкс. Тогда скорость распространения возмущения $v_f = 2\pi r / T_f = 16$ км/с, что в пределах погрешности совпадает с полученным выше значением 14 км/с, что также подтверждает предположение о наличии спицевой структуры. Предположение о твердотельном вращении спицевой структуры имеет также и слабые стороны. Исходя из него, можно утверждать, что азимутальная компонента скорости фронта возмущения плазмы со спицевой структурой должна расти пропорционально радиусу. При этом было показано, что скорость распространения фронта зависит от скорости вращения плазмы и ионно-звуковой скорости. И хотя первая растет с увеличением радиуса (см. [10]), темпов ее роста недостаточно для создания твердотельного вращения спицы. Данное замечание, вероятно, может быть устранено, если принять во внимание возможные “деформации” спицы, связанные с радиальными перетеканиями заряда и возникающими в связи с этим возмущениями потенциала, распространяющимися и в радиальном направлении. Рассмотрение подобных явлений было представлено, например, в результатах численного моделирования [13].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполненных исследований было установлено, что в зависимости потенциала плазмы отражательного разряда с термокатодом от времени существенна роль периодической составляющей. При помощи четырехканального зонда была определена скорость, с которой бежит в азимутальном направлении волна, отвечающая за возмущение плавающего потенциала плазмы $v_f = (14 \pm 2)$ км/с. Было проведено сравнение данной скорости со скоростью вращения плазмы, а также ионно-звуковой и магнито-звуковой скоростями, в результате которого было показано, что скорость вол-

ны относительно покоящейся плазмы близка к ионно-звуковой скорости. Наблюдаемые в работе эффекты могут быть объяснены гипотезой о наличии спицевой неустойчивости. Показано, что в рамках этой гипотезы в условиях рассматриваемых экспериментов присутствует только одна спица.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kaganovich I D *et al* 2020 *Physics of Plasmas* **27** 120601
2. Choueiri E 2001 *Physics of Plasmas* **8** 1411–1426
3. Ohkawa T and Miller R 2002 *Physics of Plasmas* **9** 5116–5120
4. Ворона Н А, Гавриков А В, Самохин А А, Смирнов В П и Хомяков Ю С 2014 *Ядерная физика и инжиниринг* **5** 944–944
5. Liziakin G *et al* 2021 *Journal of Physics D: Applied Physics* **54** 414005
6. Михайловский А Б 1975 *Теория плазменных неустойчивостей* (Атомиздат)
7. Oiler A P, Liziakin G D, Gavrikov A V and Smirnov V P 2022 *Molecules* **27** 6824
8. Райзер Юрий Петрович 1987 *Физика газового разряда* (Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.)
9. Пергамент Михаил Иосифович 2010 *Методы исследований в экспериментальной физике* (Интеллект)
10. Ойлер А П, Лизякин Г Д, Гавриков А В и Смирнов В П 2022 *Журнал Технической Физики* **92** 1529–1536
11. Kim J Y, Jang J Y, Choi J, Wang J i, Jeong W I, Elgarhy M, Go G, Chung K J and Hwang Y 2021 *Plasma Sources Science and Technology* **30** 025011
12. Smolyakov A, Chapurin O, Frias W, Koshkarov O, Romadanov I, Tang T, Umansky M, Raitses Y, Kaganovich I and Lakhin V 2016 *Plasma Physics and Controlled Fusion* **59** 014041
13. Powis A T, Carlsson J A, Kaganovich I D, Raitses Y and Smolyakov A 2018 *Physics of Plasmas* **25** 072110

Поведение карбида тантала при его интенсивном лазерном нагреве в воздухе

М. А. Шейндлин, М. В. Брыкин, Т. В. Бгашева, А. А. Васин,
П. С. Вервикишко, С. В. Петухов и А. М. Фролов

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: a.m.froloff@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 4 декабря 2022 г.

Аннотация. В работе представлены результаты комплексного исследования поведения карбида тантала при нагреве его лазером в воздухе до температуры 2500 К. Формирование оксидной пленки на поверхности карбида тантала изучалось различными оптическими методами с последующим анализом зоны нагрева с помощью методов РФА, электронной микроскопии и рамановской спектроскопии. Показано, что толщина и структура образовавшегося оксида зависят от стехиометрического состава исходного образца карбида. <https://doi.org/10.33849/2022202>

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхтугоплавкие керамики (более известные, как УНТС — ultra high temperature ceramics) — класс веществ, способных сохранять механическую устойчивость при воздействии экстремальных тепловых нагрузок. Прежде всего, это касается высокотемпературных карбидов, которые сохраняют устойчивость вплоть до температур порядка 3500–4000 К. При этом их стойкость к воздействию кислородосодержащей атмосферы существенно выше, чем у металлов, что делает их привлекательными для использования в наиболее теплонапряженных технических устройствах. Однако, и эти материалы подвержены достаточно интенсивному окислению при высоких температурах, что ограничивает области их возможного применения [1]. Задачей настоящей работы явилось изучение процесса формирования оксидной пленки на поверхности наиболее тугоплавкого карбида — карбида тантала [2]. В отличие от ранее проведенных работ, в которых изучались условия образования оксидной пленки на поверхности карбидов в стационарных условиях, основное внимание было уделено изучению кинетики образования слоя оксида на поверхности карбида тантала, для чего была применена высокоскоростная спектроскопия в видимой и в ближней ИК области спектра в сочетании со скоростной видеорегистрацией в отраженном свете и лазерной рефлектометрии в ходе интенсивного лазерного нагрева.

2. ПРИГОТОВЛЕНИЕ И АНАЛИЗ ОБРАЗЦОВ

Образцы карбида тантала были получены по методу самораспространяющегося высокотемпературного (СВС) синтеза, совмещенного с горячим прессованием, то есть синтез и спекание проходили одновременно в графитовой пресс-форме горячего пресса. Делалось это для уменьшения количества стадий получения образцов, так как на каждой стадии в материал образцов происходил занос примесей, в основном кислорода. Для получения образцов карбида навески порошков тантала и ацетиленовой сажи смешиваются в шаровой мельнице, после чего в смесь вводится временная технологическая связка — цетан. Полученная смесь переносится в пресс-форму горячего пресса, где при давлении 60 МПа и температуре 2123 К под вакуумом происходит синтез и уплотнение образцов. В результате получает-

Таблица 1. Характеристики образцов карбида тантала

	C, масс%	O, масс%	N, масс%	a, Å	Пористость, %
TaC _{0.79}	4.98	0.17	0.33	4.433	3.40
TaC _{0.92}	5.72	0.09	0.10	4.448	4.23

ся цилиндр плотного карбида высотой 4–5 мм и диаметром 12 мм. Затем этот цилиндр разрезается с помощью прецизионного отрезного станка на сегменты толщиной 1.5 мм, после чего они обрабатываются на шлифовальном станке. Из шлифованных сегментов на станке лазерно-эрозионной обработки вырезаются образцы диаметром 5 мм, после чего эти образцы подвергаются повторному шлифованию. В результате получают образцы диаметром 5 мм и толщиной 1.5 мм. Содержание углерода в образцах карбида определялось методом динамической вспышки на элементном анализаторе Combustion Master CS (NCS, Германия). Кислород и азот определялись методом восстановительного плавления на элементном анализаторе Fusion Master ON (NCS, Германия). Значения пористости образцов получены после измерений линейных размеров и массы образцов и пересчета с использованием величины теоретической плотности в зависимости от стехиометрии. Рентгенофазовый анализ (РФА) образцов карбида тантала проводился на дифрактометре SmartLab SE (Rigaku, Япония) с использованием Cu K α -излучения. РФА анализ образцов TaC_{0.92} и TaC_{0.79} показал, что в них содержится только одна фаза. Результаты анализа образцов приведены в таблице 1.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ МЕТОДИКА

Экспериментальная методика, примененная в данной работе, аналогична использованной в работе [3] для исследования окисления карбида циркония. Схема экспериментальной установки показана на рисунке 1. Образец из карбида диаметром около 5 мм и толщиной 1.5 мм находился в потоке воздуха, направленном перпендикулярно поверхности со скоростью около 1 м/с для исключения влияния свободной конвекции на картину формирования оксида на поверхности образца. Образцы подвергались лазерному воздействию в следующем режиме:

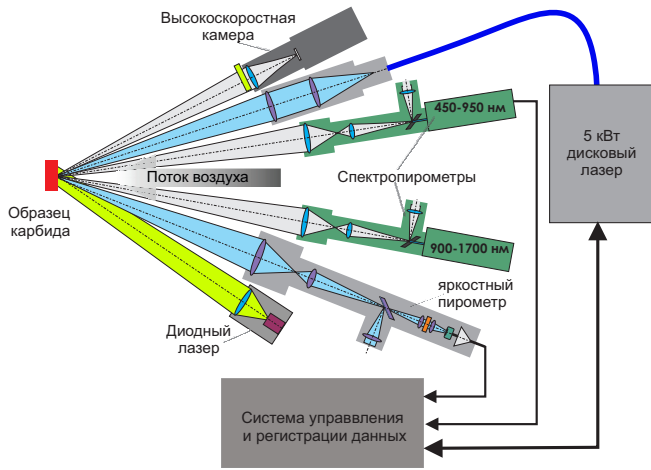


Рисунок 1. Схема эксперимента.

длительность импульса 4 с, линейное нарастание мощности от 20 Вт до 240 Вт. Для определения оптических характеристик поверхности и ее истинной температуры в ходе нагрева применялся метод спектропирометрии. Основные принципы измерения истинной температуры и спектральной излучательной способности с помощью спектропирометра изложены в [3, 4]. При этом использовался специальный спектропирометр, созданный на базе коммерческого ИК-спектрометра с многоканальным InGaAs-детектором с областью чувствительности 900–1700 мкм и быстродействием около 1000 спектров/с. Чувствительность прибора позволяет регистрировать тепловые спектры, начиная с 800 К, что позволяет уверенно проводить измерения в области начала окисления карбида (около 1000 К). Калибровка спектропирометра осуществлялась до температуры 3300 К с использованием высокотемпературной модели черного тела, истинная температура которой измерялась прецизионным пирометром CHINO IR-RST65H. Пятно визирования пирометров составляло около 0.3 мм, таким образом, измерялась температура изотермичной зоны в центре образца. Яркостный пирометр позволял измерять яркостную температуру, начиная примерно с 1200 К. Точное время эксперимента в каждом отдельном “выстреле” определялась временем достижения температуры 2500 К, контролируемой яркостным пирометром.

Контроль процессов на поверхности, происходящих в ходе эксперимента, осуществлялся с помощью высокоскоростной видеокамеры с частотой 2000 кадров в секунду при пространственном разрешении около 900×900 пикселей (что соответствует области 6×6 мм). В связи с тем, что интенсивность излучения в процессе нагрева изменялась на несколько порядков, применение видеорегистрации поверхности в собственном излучении было нецелесообразным. Поэтому поверхность образца равномерно освещалась излучением диодного лазера на длине волны 808 нм, а перед камерой был установлен соответствующий фильтр, что позволяло осуществлять видеосъемку в отраженном свете при полном блокировании собственного излучения поверхности вплоть до максимальной температуры. Отраженное излучение лазера на длине волны 808 нм, существенно превышающее фон теплового излучения, уверенно регистрировалось спектропирометром. Регистрируемый

таким образом отраженный сигнал, хотя и не прямо связан с направленно-полусферической отражательной способностью, однако позволяет получить дополнительную качественную информацию о процессах, протекающих на нагреваемой поверхности.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

На рисунке 2 показана характерная термограмма нагрева образца из карбида тантала. Здесь начало окисления (точка 1) соответствует резкому падению отражательной способности (момент 2) и, соответственно, увеличению излучательной способности. Дальнейший рост температуры сопровождается (момент времени 3) характерным пиком сигнала отражения и особенностью на термограмме, которая может соответствовать структурной модификации $\beta \rightarrow \alpha$ Ta₂O₅. Далее в ходе нагрева достигается температура плавления (точка 4), что также отражается в аномалии сигнала отражения. На рисунке 3(a, b, c) показаны отдельные кадры ско-

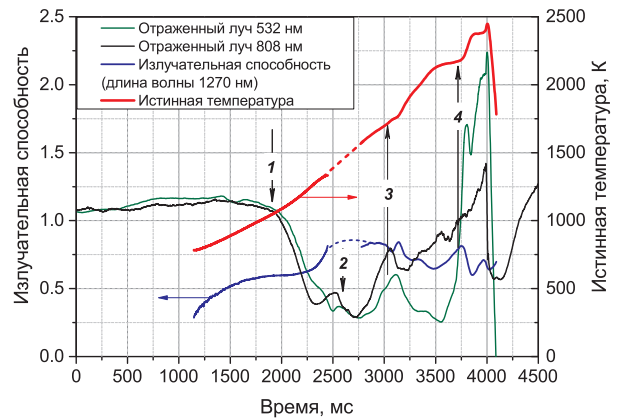
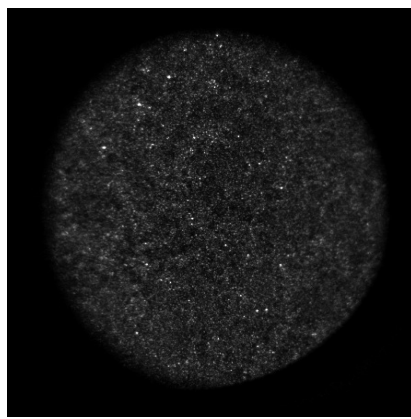


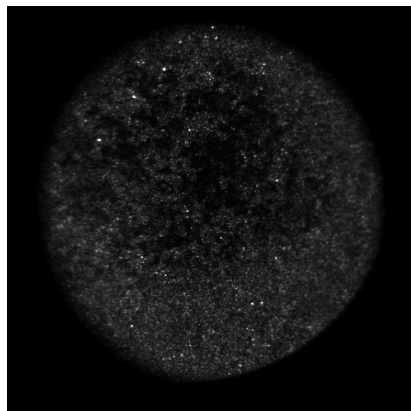
Рисунок 2. Термограмма нагрева образца TaC_{0.95} в потоке воздуха.

ростной видеосъемки. На первом кадре (рисунок 3(a)) видна чистая поверхность карбида в начале эксперимента, в то время как на втором (рисунок 3(b)) заметно характерное потемнение из-за образования оксидной пленки. Третий кадр (рисунок 3(c)), соответствующий моменту начала плавления, показывает появление на поверхности характерного блеска. Интересно, что на следующем кадре (рисунок 3(d)), соответствующем температуре примерно на 250 К выше, отчетливо наблюдается формирование пузырей в жидкости, что может соответствовать кипению оксида. Здесь следует отметить, что экспериментальные данные о температуре кипения пентоксида тантала в литературе отсутствуют.

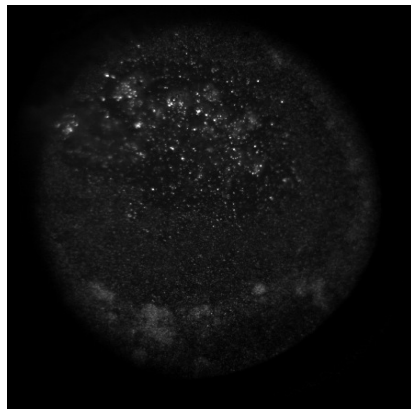
Образцы из карбида тантала после лазерного облучения в окислительной атмосфере изучались с помощью различных аналитических методов. На рисунке 4 приведены данные РФА поверхности со слоем оксида. После высокотемпературного воздействия образец TaC_{0.92} показал фазы двух разных модификаций оксидов тантала, преимущественно β -Ta₂O₅ с примесью Ta₂O₅ триклинной сингонии (такая фаза метастабильна и появляется, как правило, при закалке), а также карбида тантала TaC. Для изучения образцов после лазерного воздей-



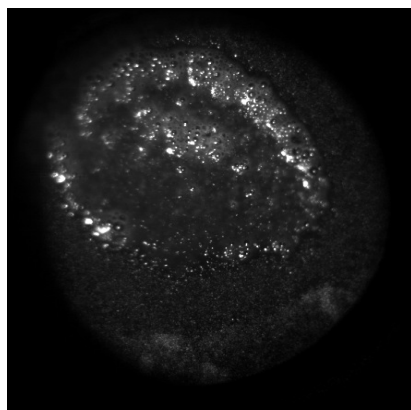
(a)



(b)



(c)



(d)

Рисунок 3. Изображение поверхности в разные моменты времени: (a) — исходная поверхность образца; (b) — начало образования оксидной пленки; (c) — появление на поверхности характерного блеска; (d) — образование пузырей на поверхности.

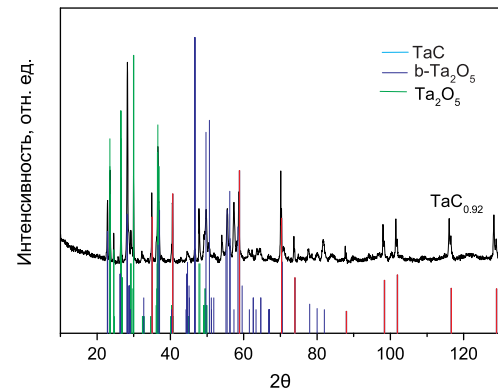


Рисунок 4. РФА образца из карбида тантала после нагрева в воздухе.

ствия были изготовлены шлифы по поперечному сечению образцов карбида тантала $TaC_{0.79}$ и $TaC_{0.92}$. На фотографиях, полученных на сканирующем электронном микроскопе, видно, что в эксперименте на поверхности образцов образовалась оксидная пленка, толщина которой сильно не изменяется при удалении от центрального пятна лазерного воздействия. Толщина образовавшейся оксидной пленки оценивалась по данным ЭДС анализа в режиме “профиль” (рисунок 5) с помощью системы энергодисперсионного анализа. В этом режиме анализируется число импульсов, накопленных в энергетических окнах элементов Ta и O. За точку отсчета 0 принята поверхность образца, за конечную точку профиля — точка около 50 мкм. Глубина профиля выбиралась до достижения стабильного уровня импульсов с тем, чтобы удостовериться, что внутренние области образца однородны по соотношению Ta и O. Оксидной пленке соответствует более низкий уровень Ta и более высокий уровень O по сравнению с внутренними “карбидными” областями образца. Для образца $TaC_{0.79}$ толщина оксидной пленки оценивается как 10–15 мкм, а для $TaC_{0.92}$ толщина оксидной пленки 30 мкм.

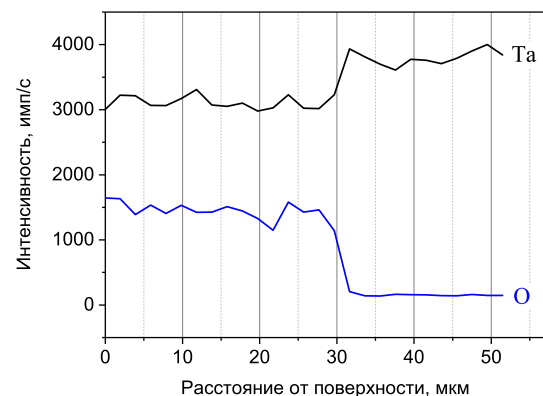
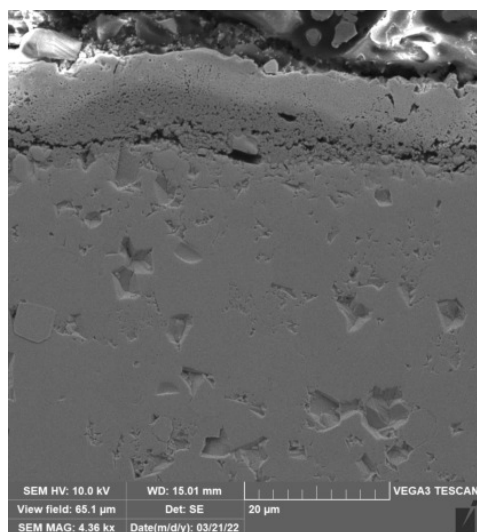
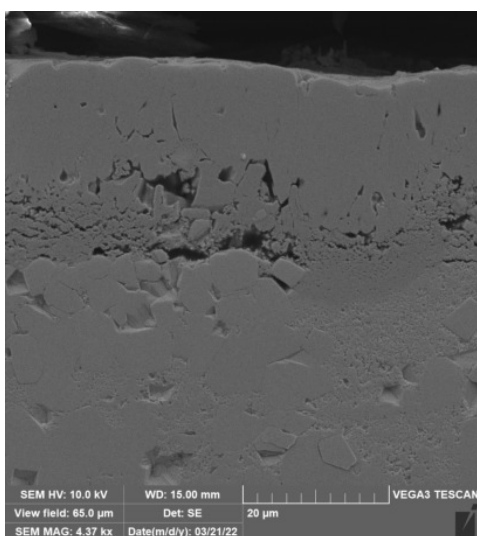


Рисунок 5. Характерные профили распределения Ta и O по глубине образца $TaC_{0.92}$.

Для более детального изучения структуры оксидной пленки шлифы карбида тантала были напыле-



(a)



(b)

Рисунок 6. Структура оксидной пленки: (a) $TaC_{0.79}$ и (b) $TaC_{0.92}$.

ны слоем углерода для уменьшения эффекта зарядки. На фотографиях СЭМ (рисунок 6(a, b)) видно, что у образца $TaC_{0.79}$ пленка более “мелкопористая”, тогда как у $TaC_{0.92}$ характер пленки более плотный с присутствием немногочисленных трещин и пор.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ изменения излучательных характеристик поверхности карбида тантала позволил проанализировать процесс окисления указанной керамики при нагреве в воздушной среде. Показано, что процесс активного формирования оксидной пленки начинается при температуре около 1100 К. При этом в ходе нагрева наблюдается изменение структурной модификации оксида $\beta \rightarrow \alpha Ta_2O_5$, его плавление, а также возможно кипение при температуре около 2380 К. Оксидная пленка, образованная на образце карбида тантала с большим количеством углерода имеет большую толщину и плотность.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации “Росатом” в рамках научного проекта №20-21-00115.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ni D, Cheng Y, Zhang J, Liu J X, Zou J, Chen B, Wu H, Li H, Dong S, Han J, Zhang X, Fu Q and Zhang G J 2022 *Journal of Advanced Ceramics* **11** 1–56
2. Sheindlin M A, Falyakhov T, Petukhov S, Valyano G and Vasin A 2018 *Advances in Applied Ceramics* **117** s48–s55
3. Шейндлин МА, Брыкин МВ, Бгашева ТВ, Васин АА, Вервикишко ПС, Петухов СВ и Фролов АМ 2022 *PHOTONICS Russia* **16** 142–154
4. Sheindlin M, Ronchi C and Heinz W 2004 Recent advances in high speed polychromatic pyrometry ed Zvizdic D, Bermanec L, Stasic T and Veliki T pp 545–550

Влияние учета спиновой поляризации на *ab initio* расчеты теплового расширения твердого железа

И. С. Гальцов^{1,2} и Д. В. Минаков^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

² Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер., 9, Долгопрудный 141701, Россия

E-mail: galtsov.is@phystech.edu

Статья поступила в редакцию 1 декабря 2022 г.

Аннотация. В данной работе мы исследуем влияние спиновой поляризации на описание теплового расширения твердого железа в рамках подхода квантовой молекулярной динамики. Данные о зависимости плотности от температуры при атмосферном давлении представлены на основе расчетов как с учетом, так и без учета спиновой поляризации. Приведено сравнение с экспериментальными данными. Особое внимание уделено зависимости термодинамических и магнитных свойств твердого железа от начального распределения магнитных моментов атомов и типа кристаллической решетки. <https://doi.org/10.33849/2022203>

1. ВВЕДЕНИЕ

Железо является широко распространенным компонентом различных конструкционных материалов, которые подвергаются интенсивным термическим и механическим нагрузкам [1]. Поэтому уравнение состояния железа имеет большое значение в связи с его многочисленными технологическими приложениями. Тем не менее, параметры теплового расширения железа, особенно в жидком состоянии, до сих пор являются предметом дискуссий. Для получения надежных данных о свойствах материалов возможно использование первопринципных (*ab initio*) расчетов. Это особенно актуально в случае, когда проведение эксперимента затруднено в исследуемой области термодинамических параметров или его результаты трудно воспроизводимы. Поскольку метод квантовой молекулярной динамики (КМД), основанный на теории функционала плотности (ТФП), учитывает как свойства электронной подсистемы, так и движение ионов, его можно использовать для моделирования поведения металлов как в твердом, так и в жидком состоянии. Однако теоретическое описание железа является трудной задачей в связи с его ферромагнитными свойствами и открытой 3d оболочкой [2]. Основное внимание в этой работе уделено применимости метода КМД для описания теплового расширения железа в твердой фазе.

В твердом состоянии железо имеет богатую фазовую диаграмму. При низких давлениях и температурах оно образует объемно-центрированную кубическую (ОЦК) решетку (ферритную или α -фазу), для которой характерно ферромагнитное упорядочение атомов. Точка Кюри для железа $T_c = 1043$ К. Помимо этого фазового перехода второго рода, при нагревании железа при атмосферном давлении в твердом состоянии [3] происходят еще два структурных перехода: при $T \sim 1185$ К в гранецентрированную кубическую (ГЦК) фазу (аустенит или γ -железо), а при $T \sim 1670$ К обратно в ОЦК-фазу (δ -железо). Железо плавится при $T_m = 1811$ К. При сжатии до давлений 10–15 ГПа при комнатной температуре железо становится парамагнитным с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) структурой (ϵ -железо).

С точки зрения затрат вычислительных ресурсов более предпочтительно проводить расчеты ТФП без

учета спиновой поляризации, так как такое моделирование требует примерно в полтора раза меньше процессорного времени, чем с учетом спина. В таких расчетах электронная плотность имеет всего одну компоненту. Однако спиновая поляризация становится существенной для моделирования материалов с определенным магнитным упорядочением. Более того, ранее Редмером и др. [4] было отмечено, что учет поляризации оказывает заметное влияние на термодинамические и транспортные свойства даже в жидком железе, где спонтанная намагниченность отсутствует.

В данной работе мы, вслед за Редмером, исследуем влияние спиновой поляризации на описание теплового расширения твердого железа. Отметим, что несмотря на популярность метода КМД для описания термодинамических свойств железа в широком диапазоне параметров [5–8], последовательного систематического изучения влияния учета спиновой поляризации на результаты моделирования до сих пор не было представлено.

Все спин-поляризованные (СП) расчеты в данной работе выполняются в приближении коллинеарных спинов, в котором учитываются только два типа электронных подсистем с соответствующими плотностями для проекции спина вверх и вниз (вдоль и против оси намагниченности). В более общем случае неколлинеарного магнетизма плотность электронов в каждой точке зависит от вектора, задающего направление спина, так как выражается через спиновую матрицу плотности [9]. При использовании этого подхода наблюдается плохая сходимость итерационного процесса в самосогласованных расчетах ТФП, поэтому в работе применяется приближение коллинеарных спинов. Сложности, возникающие при попытке описать поведение железа в парамагнитной фазе, были ранее описаны Абрикосовым и др. [10]. Мы также столкнулись с этой проблемой в текущей работе, поэтому особое внимание уделено анализу возможности аккуратного моделирования парамагнитной фазы.

2. ВЫБОР ПАРАМЕТРОВ И МЕТОДОВ РАСЧЕТА

Первопринципные расчеты в этой работе выполнены в программном пакете VASP [11–14]. При моделировании выбран псевдопотенциал проекционно-

присоединенных волн (projector-augmented waves, PAW) [15]. Для реализации метода КМД используется подход конечно-температурной ТФП (FT-DFT) [16] и приближение Борна–Оппенгеймера. Во всех расчетах в данной работе в качестве обменно-корреляционного функционала применяется обобщенно-градиентное приближение (GGA) с поправками в форме PBE [17, 18]. С целью ускорения расчетов 8 электронов ($3d^7 4s^1$) считаются в расчетах валентными и непосредственно участвуют в расчете ТФП, остальные включены в так называемый “замороженный” кор. Ограничение по энергии при разложении волновых функций по базису плоских волн для проверки сходимости берется в диапазоне $E_{\text{cut}} = 400\text{--}700$ эВ. Установлено, что ограничение по энергии должно быть не меньше 600 эВ для достижения сходимости в 1 кбар по давлению. Поэтому значение энергии обрезания $E_{\text{cut}} = 600$ эВ используется во всех расчетах.

При рассмотрении сходимости по числу N атомов задавались суперъячейки с граничными условиями Блоха, содержащие 54, 128 или 250 атомов для ОЦК-железа и 108 или 256 атомов для ГЦК-железа. Дальнейшее увеличение числа атомов не представляется возможным в связи с неприемлемо низкой скоростью расчета, особенно в СП-случае. Более 200 атомов в обоих случаях выбрано в качестве оптимального значения при расчете термодинамических свойств. Также проверялась сходимость по количеству точек в зоне Бриллюэна для различных температур. Выполнялись расчеты для одной \mathbf{k} -точки — особой точки Балдереша ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) [19], и для сетки \mathbf{k} -точек $2 \times 2 \times 2$, построенной по схеме Монкхорста–Пака [20]. Анализ показал, что использование одной особой точки Балдереша обеспечивает достаточную точность расчетов.

Расчеты в данной работе проводятся в каноническом (NVT) ансамбле, реализованном в VASP при помощи термостата Ноэ [21]. Температура электронной подсистемы T_e задается в распределении Ферми–Дирака. Параметр N_b , соответствующий количеству искомым орбиталей в уравнении Кона–Шэма, подбирается таким, чтобы число заполнения самой высокой по энергии орбитали не превышало величины 10^{-5} . В расчетах число орбиталей не меньше $N_b = 1400$. Шаг по времени в КМД-моделировании взят равным 2 фс.

В СП-расчетах необходимо задать некоторое начальное распределение магнитных моментов (плотность намагниченности) для каждого иона в ячейке. В случае приближения коллинеарных спинов каждому иону ставится в соответствие определенное положительное (вдоль оси намагниченности) или отрицательное (против нее) значение магнитного момента (в магнетонах Бора m_B). В работе рассматриваются два основных способа задания начальной намагниченности. В первом все магнитные моменты направлены вдоль оси и имеют величину $+2.5 m_B$, рисунки 1(a) и 3(a). Во втором случае одна половина всех моментов направлена вдоль положительного направления оси $+2.5 m_B$, другая — в противоположном направлении $-2.5 m_B$, рисунки 1(b), 3(b) и 5. Выбор начальной намагниченности влияет на эволюцию системы, как будет показано в разделе 3.

Мы рассчитали равновесную плотность железа при $T = 300$ К с учетом и без учета спиновой поляризации. В первом случае плотность $\rho_0^{\text{SP}} = 8.1$ г/см³, что на 3%

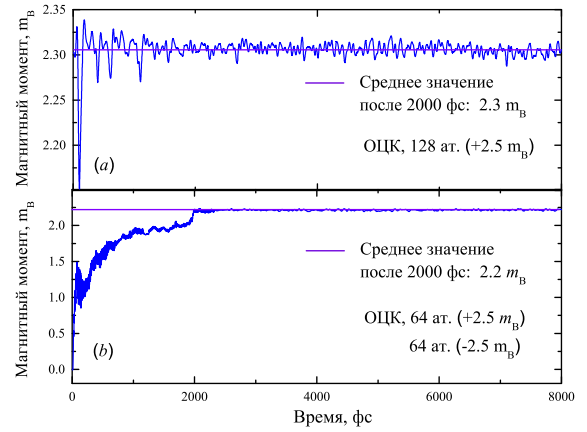


Рисунок 1. Динамика магнитного момента в расчете на один атом в ОЦК-железе при 1100 К при начальном задании (a) 128 магнитных моментов величины $+2.5 m_B$, (b) 64 величины $+2.5 m_B$ и 64 величины $-2.5 m_B$.

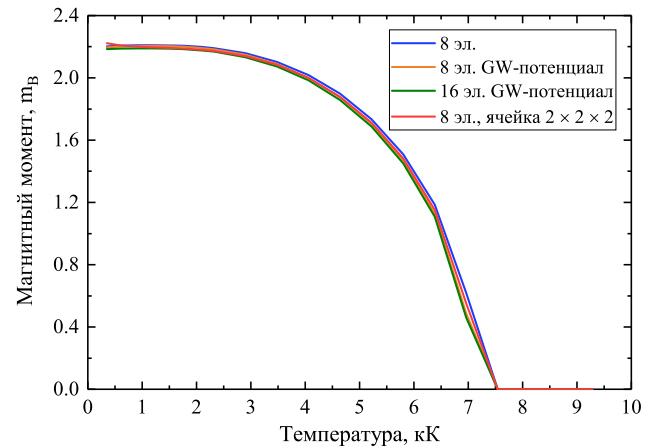


Рисунок 2. Средний магнитный момент на один атом (в m_B) в ходе моделирования нагрева электронной подсистемы замороженной ОЦК-решетки железа.

выше экспериментального значения $\rho_0^{\text{exp}} = 7.87$ г/см³, а во втором $\rho_0^{\text{NSP}} = 8.93$ г/см³, что превышает ее на 14%.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для исследования поведения средней намагниченности на один атом расчетной ячейки в VASP после каждого шага молекулярной динамики выводится величина суммарного магнитного момента в системе. Эта информация использована для воспроизведения эволюции намагниченности моделируемой системы во времени. Ниже представлены результаты по отдельности для ОЦК- и ГЦК-железа. На рисунке 1(a) приведен график для ОЦК-структуры при температуре $T = 1100$ К, которая лежит выше точки Кюри $T_c = 1043$ К. Видно, что магнитный момент сохраняет некоторое среднее значение (с учетом малых флуктуаций) на протяжении большого числа шагов молекулярной динамики. В данном расчете это среднее значение приблизительно равно $\mu = 2.3 m_B$, что на 3% превышает известное из эксперимента число $\mu_{\text{exp}} = 2.22 m_B$ [22] для железа в ферромагнитном состоянии. При попытке повлиять на установление рав-

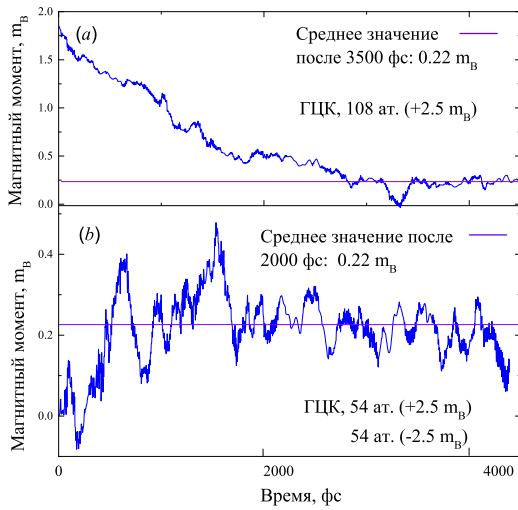


Рисунок 3. Динамика магнитного момента в расчете на один атом в ГЦК-железе при 1200 К при начальном задании (а) 108 магнитных моментов величиной $+2.5 m_B$, (б) 54 величиной $+2.5 m_B$ и 54 величиной $-2.5 m_B$.

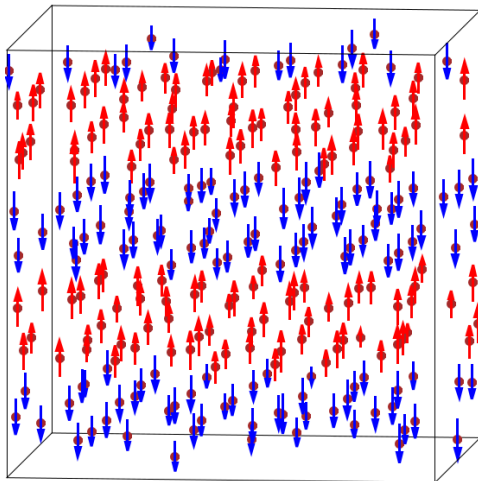


Рисунок 4. Распределение направлений магнитных моментов атомов в ГЦК-решетке железа при $T = 1200$ К и $\rho = 7.925$ г/см³ после выхода системы на равновесие.

новесного значения среднего магнитного момента путем задания начального антиферромагнитного состояния (половина моментов изначально направлена в одну сторону, половина — в противоположную), наблюдается аналогичная картина: намагниченность возрастает от нуля до значения $2.2 m_B$, рисунок 1(б). Таким образом, в рамках подхода КМД не удастся воспроизвести ситуацию потери ферромагнитного порядка и перехода в парамагнитное состояние в ОЦК-железе при температуре выше точки Кюри. Для решения этой проблемы в работе [10] предлагается использовать метод DLM (disordered local moments — неупорядоченных локальных моментов), совмещающий КМД и достаточно грубое вторжение в моделируемую систему в виде “встряхивания” (принудительного выставления разнонаправленных магнитных моментов с некоторым шагом по времени). Отметим, что после такого вмешательства моделируемая система не успевает прийти в равновесие, а

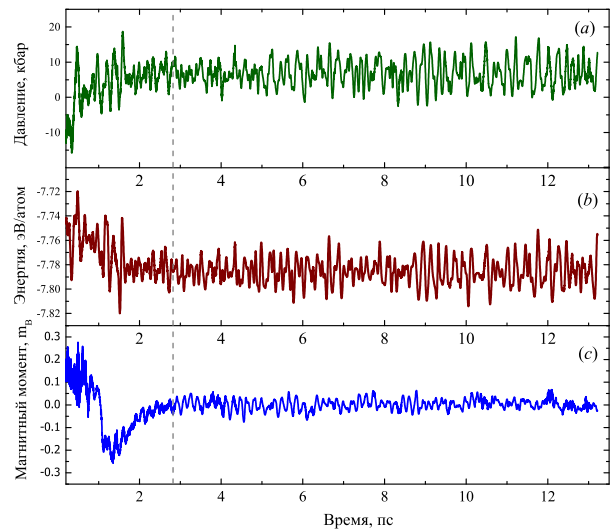


Рисунок 5. Изменение во времени (а) давления, (б) внутренней энергии на атом и (с) намагниченности в системе на протяжении одного КМД-расчета для ГЦК-железа при 1200 К, 256 атомов в расчетной ячейке, в начальный момент 128 атомов имеют магнитный момент $+2.5 m_B$ (направлен вдоль оси намагничивания) и 128 атомов $-2.5 m_B$ (направлен против). Серая вертикальная линия обозначает время, при котором намагниченность в системе достигает равновесия.

усредненные термодинамические параметры существенным образом зависят от выбранного периода “встряхивания”.

Для дальнейшего анализа и оценки температуры Кюри, которую дает ТФП в приближении коллинеарных спинов, нами было выполнено моделирование нагрева электронной подсистемы в случае “замороженных” ионов. В данном подходе температура T_e электронной подсистемы увеличивалась, а молекулярная динамика была отключена. При этом моделирование проводилось для элементарной ячейки ОЦК-решетки с использованием различных псевдопотенциалов (включая GW-потенциал с 16 валентными электронами), а также для суперъячейки $2 \times 2 \times 2$, что продемонстрировано на рисунке 2. Как показал подобный анализ, средний магнитный момент спадает до нуля лишь при температуре порядка 7500 К, что почти в 7 раз превышает справочное значение точки Кюри.

Отметим, что вопрос наличия концептуальных проблем в теории функционала плотности при описании магнитных свойств при конечных температурах ранее уже поднимался в ряде работ, например [10, 23, 24]. В обзоре [10] утверждается, что хотя СП-расчеты в рамках ТФП с хорошей точностью описывают магнитные свойства в основном состоянии, они в то же время сильно завышают температуру Кюри ферромагнитных материалов, в пять раз и более. Связано это, прежде всего, с отсутствием учета в модели спиновых флуктуаций. Для более корректного описания точки Кюри используются подходы, основанные на гамильтониане Гейзенберга. В работе [24] приводится обзор таких методов. Там же отмечено, что ТФП-расчеты не могут корректно воспроизвести вклад спиновых флуктуаций в связи с тем, что

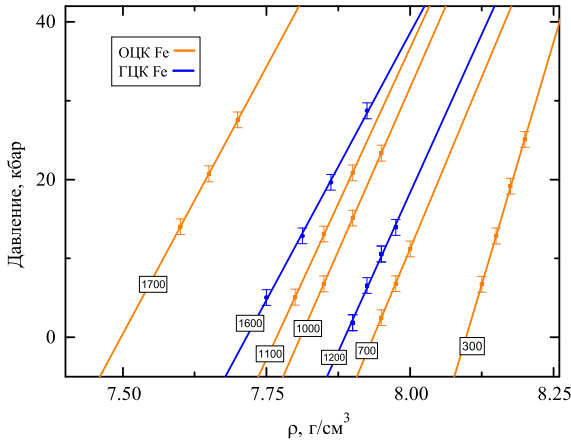


Рисунок 6. Изотермы в твердом железе из КМД-расчетов с учетом СП. Прямые — линейные аппроксимации полученных точек. Синий цвет относится к ГЦК-железу, оранжевый — к ОЦК-фазе. Температуры отмечены на изотермах (в К).

электроны, описываемые уравнениями Кона–Шэма, не взаимодействуют друг с другом. Таким образом, при описании точки Кюри необходимо учитывать спиновые флуктуации специальным образом, что не являлось основной задачей данной работы.

В то же время, в ходе КМД-моделирования железа с ГЦК-структурой (γ -железо) при $T = 1200$ К и изначально сонаправленными магнитными моментами, мы наблюдаем постепенное уменьшение начальной средней намагниченности почти до нуля, рисунок 3(a). Если вместо этого установить половину магнитных моментов в положительном направлении и половину в обратном, система достигает того же состояния намного быстрее, рисунок 3(b). При этом анализ распределения магнитных моментов на отдельных атомах свидетельствует о том, что полученное состояние независимо от начального распределения магнитных моментов обладает определенным типом упорядочения, а именно напоминает антиферромагнитное состояние. Пример установившейся картины магнитных моментов атомов приведен на рисунке 4. На рисунке 5 показано, как давление и энергия в системе меняются в течение КМД-расчета для ГЦК-железа при $T = 1200$ К, а также приведено сопоставление с сопутствующей динамикой магнитного момента в расчете на атом. Видно, что время выхода намагниченности на равновесие коррелирует с соответствующим временем для рассматриваемых термодинамических величин.

Процедуру восстановления зависимости плотности от температуры при давлении 1 атм из результатов КМД-расчетов можно разделить на две части: сначала находятся зависимости давления от плотности вдоль нескольких изотерм. Далее производится линейная экстраполяция полученных кривых в координатах (ρ, P) к нулевому давлению. Полученные аппроксимации позволяют восстановить значения плотности при атмосферном давлении [25]. На рисунке 6 приведены полученные нами изотермы для ОЦК- и ГЦК-железа в КМД-расчетах с учетом СП.

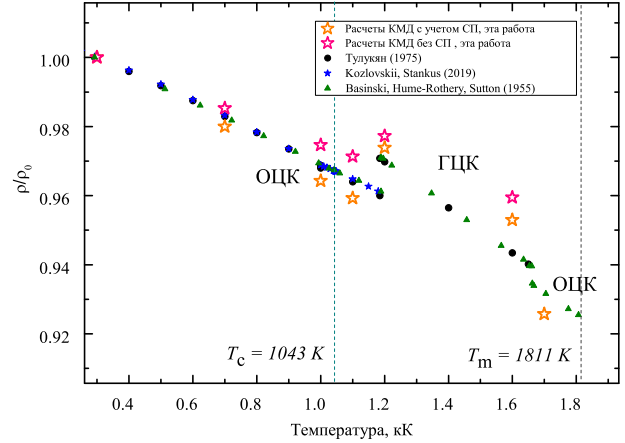


Рисунок 7. Зависимость относительной плотности от температуры для твердого железа при атмосферном давлении. Оранжевые звезды — СП-расчеты, данная работа; розовые звезды — расчеты без СП, данная работа. Эксперименты: черные круги — [26], зеленые треугольники — из работы [3], синие звезды — из [27]. Штриховыми линиями отмечены температура Кюри T_c и температура плавления T_m .

В разделе 2 было отмечено, что расчетное значение плотности при нормальных условиях отличается от экспериментального. В связи с этим кривую теплового расширения удобно приводить в координатах относительной плотности $(T, \rho/\rho_0)$, как показано на рисунке 7.

Наши результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными из работ [3, 27], а также справочника под редакцией Тулукуяна [26]. Как видно из рисунка 7, результаты спин-поляризованных расчетов ОЦК-железа дают несколько завышенную относительную плотность (на 0.5–1%) по сравнению с экспериментом, в то время как для ГЦК-железа результаты прямо противоположны: КМД-расчеты приводят к недооценке степени расширения, и относительная плотность в расчете меньше экспериментальной при той же температуре примерно на 1%. На этом же рисунке представлены результаты для расчетов без учета спиновой поляризации. Полученные точки демонстрируют недооценку теплового расширения по сравнению с экспериментальными данными во всем исследованном диапазоне температур и описывают его несколько хуже, чем в спин-поляризованном случае.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе показано, что при описании тепловых свойств железа методом квантовой молекулярной динамики, основанном на теории функционала плотности, необходимо учитывать вклад спиновой поляризации. Учет СП позволяет значительно лучше воспроизвести в расчете нормальную плотность железа. Нами продемонстрировано, как выбор начальной намагниченности рассматриваемой системы может повлиять на ее эволюцию в ходе моделирования. Кроме того, мы отметили существенную зависимость расчетных магнитных свойств твердого железа от типа решетки. К сожалению, приходится заключить, что фазовый переход в железе из ферро- в парамагнитное состояние не удастся обнару-

жить при КМД-моделировании в рамках приближения коллинеарных спинов.

Мы восстановили несколько точек на кривой зависимости плотности твердого железа от температуры при атмосферном давлении с учетом и без учета спина. Хотя в используемом приближении ОЦК-фаза остается ферромагнитной при всех температурах, а в ГЦК-фазе получается состояние, схожее с антиферромагнитным, результаты СП-расчетов лучше описывают экспериментальные данные. Однако важно отметить, что даже в этом случае расчеты методом КМД приводят к переоценке относительной плотности на 0.5–1% в ОЦК-фазе и недооценке на 1% в ГЦК-железе.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10398). Авторы выражают благодарность суперкомпьютерному центру ОИВТ РАН, Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН и Центру коллективного пользования “Дальневосточный вычислительный ресурс” ИАПУ ДВО РАН за предоставленное вычислительное время. Некоторые численные расчеты проводились на суперкомпьютере МФТИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Kadatskiy M A and Khishchenko K V 2016 *J. Phys.: Conf. Ser.* **774** 012005
- Zhang H, Lu S, Punkkinen M P J, Hu Q M, Johansson B and Vitos L 2010 *Phys. Rev. B* **82** 132409
- Basinski Z S, Hume-Rothery W and Sutton A L 1955 *Proc. R. Soc. A* **229** 459–67
- Korell J A, French A, Steinle-Neumann G and Redmer R 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 086601
- Vočadlo L, Alfè D, Gillan M and Price G 2003 *Phys. Earth Planet. Inter.* **140** 101–125
- Vočadlo L, Alfè D, Gillan M J, Wood I G, Brodholt J P and Price G D 2003 *Nature* **424** 536–539
- Belonoshko A B, Rosengren A, Burakovsky L, Preston D L and Johansson B 2009 *Phys. Rev. B* **79** 220102
- Belonoshko A B, Arapan S and Rosengren A 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 485402
- von Barth U and Hedin L 1972 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5** 1629–42
- Abrikosov I A, Ponomareva A V, Steneteg P, Barannikova S A and Alling B 2016 *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **20** 85–106
- Kresse G and Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558–61
- Kresse G and Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **49** 14251–69
- Kresse G and Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169–86
- Kresse G and Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15–50
- Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953–79
- Mermin N D 1965 *Phys. Rev.* **137** A1441–3
- Perdew J P, Burke K and Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- Perdew J P, Burke K and Ernzerhof M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1396
- Baldereschi A 1997 *Phys. Rev. B* **7** 5212–5
- Monkhorst H J and Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188–92
- Nosé S 1991 *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **103** 1–46
- Danan H, Herr A and Meyer A J P 1968 *Journal of Applied Physics* **39** 669–670
- Gyorffy B, Pindor A, Staunton J, Stocks G and Winter H 1985 *Journal of Physics F: Metal Physics* **15** 1337
- Gambino D, Arale Brännvall M, Ehn A, Hedström Y and Alling B 2020 *Phys. Rev. B* **102** 014402
- Minakov D V, Paramonov M A and Levashov P R 2018 *AIP Adv.* **8** 125012
- Touloukian Y 1975 *Thermal Expansion: Metallic Elements and Alloys* TPRC data series (Springer US)
- Kozlovskii Yu M and Stankus S V 2019 *J. Phys.: Conf. Ser.* **1382** 012181

Изучение транспортных свойств н-нонана в модели SAFT- γ Mie

О. М. Смирнов¹, Д. Ю. Ленёв^{2,1} и В. В. Писарев^{2,1,3}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет),
Институтский пер., 9, Долгопрудный 141701, Россия

² Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

³ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Мясницкая 20, Москва, Россия

E-mail: smirnov.om@phystech.edu

Статья поступила в редакцию 13 декабря 2022 г.

Аннотация. Проанализирована точность расчета коэффициентов диффузии и вязкости для н-нонана (C_9H_{20}) в модели SAFT- γ Mie. Выполнено моделирование н-нонана с помощью модели SAFT- γ Mie методом молекулярной динамики с помощью программного пакета LAMMPS. Расчеты проводились для температуры 323 К и давлений в промежутке от 10 до 80 МПа. С помощью формулы Эйнштейна–Смолуховского был определен коэффициент самодиффузии. Через формулу Грина–Кубо для автокорреляционной функции сдвиговых напряжений был получен коэффициент сдвиговой вязкости. На основании зависимости диффузии от обратной вязкости вычислен гидродинамический радиус молекулы н-нонана. Данные результаты показывают, что SAFT- γ Mie модель удовлетворительно воспроизводит транспортные свойства н-нонана. <https://doi.org/10.33849/2022204>

1. ВВЕДЕНИЕ

Молекулярная динамика является надежным методом исследования структурных и теплофизических свойств реальных молекулярных систем при условии, что для описания взаимодействия между частицами доступно соответствующее силовое поле. Алканы обладают простой структурой и высокой практической значимостью, поэтому большое количество исследований было посвящено моделированию и разработке многочисленных силовых полей для них [1–3].

Одной из первых проблем при моделировании алканов является поиск баланса между точностью модели и вычислительной сложностью. Полноатомные модели, например, OPLS-AA (Optimized potential for liquid simulation – all-atom) [4], явно воспроизводят все атомы молекулы, из-за чего они требуют значительных вычислений. В моделях объединенного атома, например, TraPPE-UA (Transferable potential for phase equilibria – united-atom) [5], тяжелые атомы (углерод, кислород, азот) объединяются со связанными атомами водорода в эффективные частицы для уменьшения вычислительных затрат, хоть и с пониженной точностью получаемых с их помощью результатов.

Крупнозернистое огрубление — следующий шаг на пути упрощения модели. Так называется подход в моделировании, который заключается в выборе целых групп атомов в качестве элементарных структурных единиц, что позволяет значительно сократить количество необходимых вычислений за счет более грубого расчета межчастичного взаимодействия. В рамках крупнозернистого формализма взаимодействие между новыми элементарными структурными единицами представляется с помощью эффективного потенциала, разработанного для сохранения точного описания интересующих свойств моделируемой молекулы.

В недавней работе [6] были получены коэффициенты для модели SAFT- γ Mie (Statistical Associating Fluid Theory using Mie potential) при представлении н-алканов в виде крупных “зерен”.

В настоящей работе изучается точность огрубленной модели для н-нонана (C_9H_{20}), молекулы которого достаточно длинные, чтобы для него было актуально крупнозернистое приближение. Свойства н-нонана хорошо изучены и при этом он является типичным представителем жидких предельных углеводородов. Таким образом, проверка его свойств в модели SAFT- γ Mie позволяет охарактеризовать точность модели для этого класса соединений.

Исследуем точность расчета уравнения состояния и транспортных свойств н-нонана: коэффициента самодиффузии и сдвиговой вязкости.

2. ОПИСАНИЕ РАСЧЕТА

2.1. SAFT- γ модель

В рассматриваемой SAFT- γ модели [6], н-нонан представляется в виде трех зерен сферической формы двух типов, соединенных в цепочку. “Зерна” соответствуют группам $CH_3-CH_2-CH_2-$ (тип Т) и $-CH_2-CH_2-CH_2-$ (тип М). Массы зерен составляют $m_1 = 43.09$ г/моль и $m_2 = 42.08$ г/моль. Взаимодействие между двумя “зернами” происходит по обрзанному Mie-потенциалу:

$$E(r_{kl}) = C_{kl}\varepsilon_{kl} \left[\left(\frac{\sigma_{kl}}{r_{kl}} \right)^{\lambda_{kl}^r} - \left(\frac{\sigma_{kl}}{r_{kl}} \right)^{\lambda_{kl}^a} \right], r_{kl} < r_c, \quad (1)$$

где r_{kl} — межцентровое расстояние между “зернами”, ε_{kl} — глубина потенциальной ямы, σ_{kl} — диаметр “зерна”, λ_{kl}^r и λ_{kl}^a — показатели степени, контролирующие величину отталкивающего и притягивающего вкладов. Использование независимых показателей степени при отталкивающем и притягивающем вкладах в Mie-потенциале позволяет универсально описывать межмолекулярные взаимодействия, что приводит к надежному описанию теплофизических свойств, что было продемонстрировано в ряде исследований [7–9]. Радиус обреза равен $r_c = 16$ Å. Другие коэффициенты для н-нонана представлены в таблице 1.

Таблица 1. Коэффициенты SAFT- γ Мисе-потенциала

k	l	$(\varepsilon_{kl}/k_B)/K$	$\sigma_{kl}/\text{Å}$	λ_{kl}^r	λ_{kl}^a
T	T	358.37	4.5012	15.947	6.00
M	M	377.14	4.1840	16.433	6.00
T	M	345.72	4.3426	16.188	6.00

Константа C_{kl} определяется как:

$$C_{kl} = \frac{\lambda_{kl}^r}{\lambda_{kl}^r - \lambda_{kl}^a} \left(\frac{\lambda_{kl}^r}{\lambda_{kl}^a} \right)^{\lambda_{kl}^a / (\lambda_{kl}^r - \lambda_{kl}^a)} \quad (2)$$

Внутримолекулярные же взаимодействия описываются гармоническими потенциалами как для энергии растяжения связей, так и для энергии углового изгиба:

$$U_{intra} = \frac{k_{bond}}{2}(r - r_0)^2 + \frac{k_{angle}}{2}(\theta - \theta_0)^2, \quad (3)$$

где $k_{bond}/k_B = 6666 \text{ K/Å}^2$ — константа жесткости связи, $k_{angle}/k_B = 2318 \text{ K/рад}^2$ — константа жесткости изгиба, $r_0 = 4.34 \text{ Å}$ — равновесная длина связи, $\theta_0 = 159^\circ$ — равновесный угол между связями.

2.2. Методика

Для расчета термодинамических свойств используется программный пакет LAMMPS (Large-scale Atomic and Molecular Massively Parallel Simulator) [10]. В начальном состоянии создается ячейка с 1000 молекул н-нонана, расположенных в узлах простой кубической решетки с ребром в 9 Å с периодическими граничными условиями. Была проведена проверка сходимости плотности по числу частиц при заданном давлении, и установлено, что она достигается примерно при вдвое меньшем числе частиц.

Молекулам придаются случайные скорости с нормальным распределением, соответствующим температуре в 423 К. Расчет происходит в системе отсчета, связанной с центром масс системы. Подключается термостат Ноэ-Гувера [11] с характерным временем выхода на целевую температуру равным 100 шагам моделирования. В изотермо-изобарическом ансамбле для интересующих давлений система релаксирует в течении 1 наносекунды с шагом в 1 фемтосекунду. Затем в течении 5 наносекунд система охлаждается с помощью термостата до 323 К и затем релаксирует при новой температуре. При каждом из рассматриваемых давлений наблюдается 15 независимых систем, сгенерированных по указанному алгоритму и отличающихся генерацией начальных скоростей, для получения лучшего статистического усреднения. При этом средняя флуктуация температуры была до 4 К.

После этого система наблюдается в течении 25 наносекунд с шагом моделирования в 5 фемтосекунд при активном термостате Ноэ-Гувера в каноническом ансамбле. Также каждые 10000 шагов выводятся координаты центра масс каждой молекулы, и каждый шаг выводятся элементы матрицы тензора давлений.

3. ТРАНСПОРТНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ

3.1. Изотерма

Сравнение полученной зависимости усредненных плотностей от усредненных давлений для вышедших на

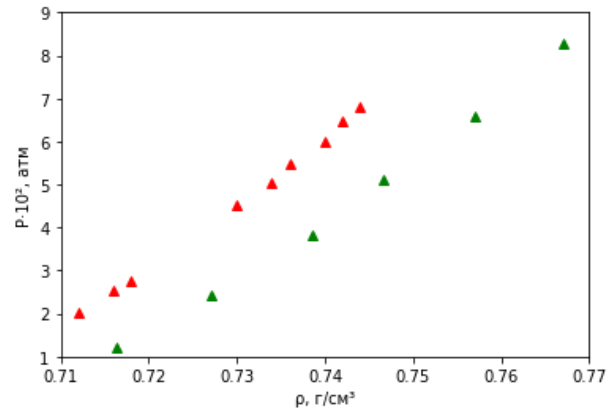


Рисунок 1. Графики зависимости давления от плотности. Зеленым представлены данные вычислений, красным — экспериментальные данные [12].

равновесие систем с экспериментально полученной зависимостью плотности от давления [12] представлено на рисунке 1.

На графике заметно отклонение получившихся при моделировании данных. Система с SAFT- γ моделью н-нонана при той же плотности обладала меньшим давлением, чем она должна была бы на основе экспериментальных данных [12]. По данным из [13] можно заметить, что подобная черта является особенностью всех моделей. Однако в случае малых давлений плотность, полученная с помощью OPLS-AA, отличается примерно на 5 процентов, а исследуемая огрубленная модель дает ошибку около 3 процентов. В случае высоких давлений результаты применения всех моделей схожи.

Следует отметить, что по данным работы [13] точность воспроизведения кривой сжатия изооктана в модели TraPPE-UA также выше, чем в OPLS-AA. Такая ситуация, когда менее подробная модель точнее описывает свойства, несколько необычна. Вероятно, это связано с тем, что в модели OPLS-AA используются одни и те же параметры Леннард-Джонсовских взаимодействий для атомов углерода и водорода в середине и в конце цепи. В огрубленных же моделях используются оптимизированные параметры невалентных взаимодействий отдельно для концевых и серединных групп.

3.2. Самодиффузия

Коэффициент самодиффузии был определен через среднеквадратичные смещения центров масс молекул по формуле Эйнштейна-Смолуховского

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta \vec{r}^2(t) \rangle}{6t} \quad (4)$$

После определения коэффициента самодиффузии для каждой траектории, результат был усреднен по ним для каждого рассматриваемого давления. Получившиеся результаты вместе с экспериментальными данными [14] представлены на рисунке 2.

Зависимость коэффициента самодиффузии для SAFT- γ модели н-нонана от плотности совпала с экспериментальными данными. Однако при тех же давлениях коэффициент диффузии был меньше, чем экспериментально полученный. Похожее отличие наблюдалось в [13] для OPLS-AA.

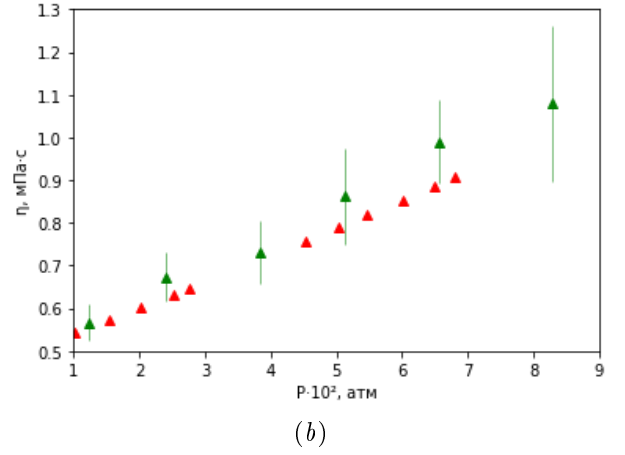
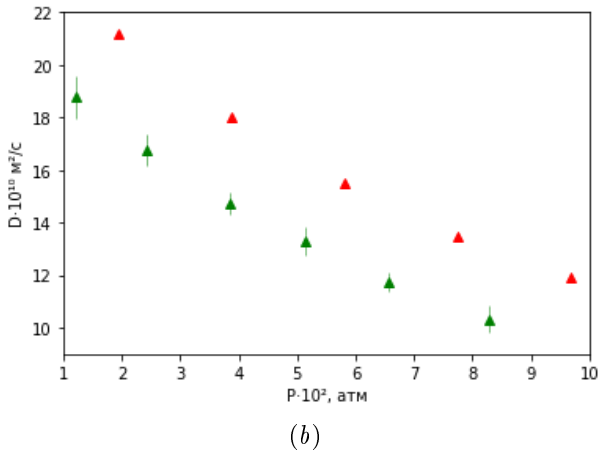
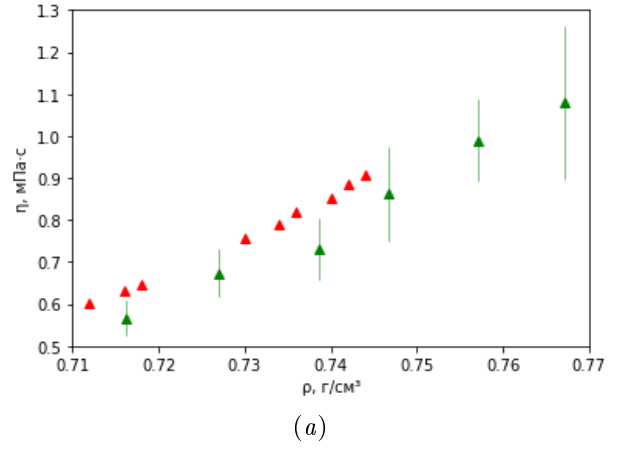
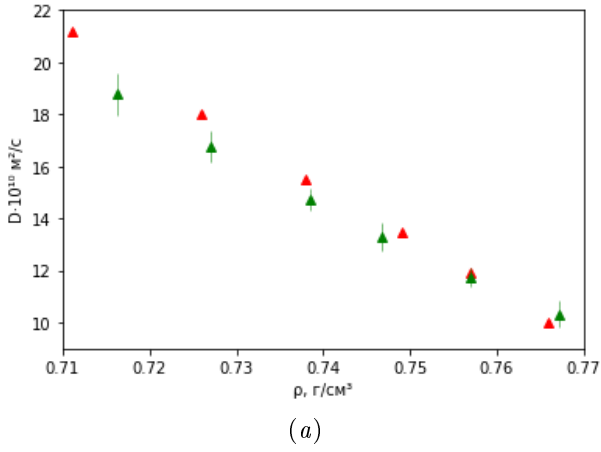


Рисунок 2. Зависимости коэффициента самодиффузии от плотности (а) и давления (b). Зеленым представлены данные вычислений, красным — экспериментальные данные [14].

Была проведена дополнительная оценка сходимости по размеру системы для коэффициента диффузии при помощи метода, описанного в [15]. Оценка разности коэффициента диффузии для бесконечной моделируемой ячейки и коэффициента диффузии в зависимости от размера ячейки становится меньше погрешности при размерах моделируемой ячейки, по порядку величины совпадающих с выбранным.

3.3. Сдвиговая вязкость

Коэффициент сдвиговой вязкости рассчитывается по формуле Грина–Кубо через автокорреляционную функцию сдвиговых напряжений:

$$\eta(P_{xy}) = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle P_{xy}(t) P_{xy}(t + \tau) \rangle d\tau, \quad (5)$$

где V — объем ячейки моделирования, P_{xy} — элемент тензора давлений. Определим коэффициент сдвиговой вязкости для элементов P_{xy} , P_{xz} и P_{yz} тензора давления после чего усредним полученный результат:

$$\eta = \frac{\eta(P_{xy}) + \eta(P_{xz}) + \eta(P_{yz})}{3}. \quad (6)$$

Кроме того, проведем усреднение по всем траекториям. Получившиеся результаты, вместе с экспериментальными данными [12] представлены на рисунке 3.

Получившаяся же зависимость коэффициента сдвиговой вязкости от давления для модели совпала с экспериментальными данными, в то время как при той же плотности у модели коэффициент вязкости полу-

Рисунок 3. Зависимости коэффициента сдвиговой вязкости от плотности (а) и давления (b). Зеленым представлены данные вычислений, красным — экспериментальные данные [12].

чался меньше, чем полученный экспериментально [12]. Наблюдается заметно лучшее совпадение с экспериментом для н-нонана (C_9H_{20}), чем в [13] TraPPE-UA и OPLS-AA для изооктана (C_8H_{18}).

4. ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЙ РАДИУС

На основе полученных значений коэффициентов самодиффузии и сдвиговой вязкости определим значение гидродинамического радиуса SAFT- γ модели н-нонана, воспользовавшись соотношением Стокса–Эйнштейна.

$$r = \frac{k_B T}{6\pi D \eta}. \quad (7)$$

Построим график зависимости коэффициентов самодиффузии от обратной вязкости, который представлен на рисунке 4.

На графиках заметно смещение полученной в расчетах зависимости от экспериментальной. При одинаковых коэффициентах самодиффузии, коэффициент обратной сдвиговой вязкости, рассчитанный для модели, получался больше, чем ожидалось.

Данное смещение, очевидно, связано с наблюдаемым смещением в изотерме на рисунке 1. Из-за того, что в системе было меньшее давление при тех же плотностях, коэффициент сдвиговой вязкости оказывался меньше. И, следовательно, коэффициент обратной вязкости — больше.

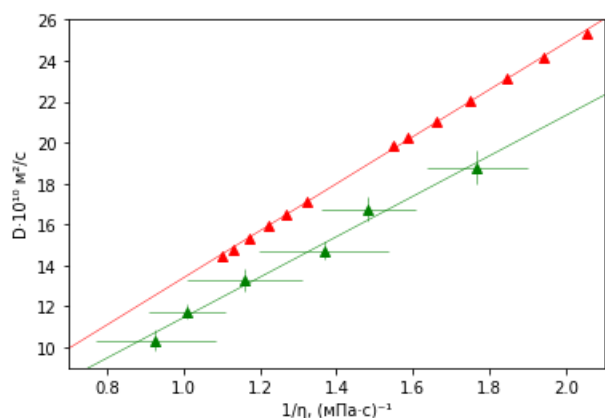


Рисунок 4. Графики зависимости коэффициента самодиффузии от обратного коэффициента сдвиговой вязкости. Зеленым представлены данные вычислений, красным — экспериментальные данные [12, 14]. Вертикальные и горизонтальные линии на символах указывают стандартную неопределенность вычисления коэффициентов самодиффузии и вязкости, соответственно.

Проведя линейную аппроксимацию с помощью метода наименьших квадратов графика на рисунке 4 для данных эксперимента и моделирования, гидродинамические радиусы получились соответственно равными: $r_1 = 2.06 \pm 0.03 \text{ \AA}$ и $r_2 = 2.41 \pm 0.18 \text{ \AA}$

Таким образом гидродинамический радиус для данных моделирования оказался больше ожидаемого результата, однако, находится в пределах 2 величин погрешности. То есть наблюдается сходство между моделируемым и экспериментальным эффективным радиусом, что отмечалось и для более точных моделей [13].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При моделировании SAFT- γ Mie модели н-нонана методом молекулярной динамики с помощью программного пакета LAMMPS для температуры 323 K и давлениях в промежутке от 10 до 80 МПа были получены зависимости давления от плотности, коэффициента самодиффузии и сдвиговой вязкости от плотности и давления. Также был вычислен гидродинамический радиус молекулы н-нонана в данной модели.

Расчет кривой изотермического сжатия показывает, что модель незначительно завышает плотность — отличие от экспериментальных данных для тех же давлений составляет не более 3% (или на 0.2 г/см^3).

Зависимость же коэффициента самодиффузии от плотности совпала с экспериментально полученной. Однако зависимость от давления оказалась заниженной. При одинаковых давлениях у модели коэффициент самодиффузии был на 20% меньше, чем в эксперименте.

Схожие результаты получились для коэффициента сдвиговой вязкости, зависимость которого от давления в рамках погрешности вычислений совпала с экспериментально полученной. Зависимость же от плотности

оказалась заниженной. У модели коэффициент вязкости был меньше, чем в эксперименте при одинаковых плотностях.

И наконец, зависимость коэффициента самодиффузии от обратного коэффициента сдвиговой вязкости оказалась смещенной относительно зависимости, полученной в эксперименте, что связано с выведенной ранее смещенной изотермой, из-за которой тем же плотностям и соответственно коэффициентам самодиффузии соответствовали большие давления и меньшие обратные вязкости. Получившийся гидродинамический радиус совпал в пределах двух σ с величиной рассчитанного радиуса для данных, полученных экспериментально [12, 14].

Подводя итоги, при помощи SAFT- γ Mie-модели для н-нонана были получены корректные зависимости коэффициента самодиффузии от плотности и коэффициента сдвиговой вязкости от давления, несмотря на отличие изотермы от ожидаемой. Величина гидродинамического радиуса продемонстрировала удовлетворительное согласие с полученной из экспериментальных данных величиной. Таким образом, рассматриваемая модель подходит для получения транспортных коэффициентов и в ряде случаев проявляет себя лучше, чем более точные модели, при этом являясь более простой для расчета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Williams D E 1967 *J. Chem. Phys.* **47** 4680–4684
- Jorgensen W L, Madura J and Swenson C 1984 *J. Am. Chem. Soc.* **106** 6638–6646
- Ungerer P, Lachet V and Tavitian B 2006 *Oil Gas Sci. Technol.* **61**
- Jorgensen W L, Maxwell D S and Tirado-Rives J 1996 *J. Am. Chem. Soc.* **118** 11225–11236
- Martin M G and Siepmann J I 1998 *J. Phys. Chem. B* **102** 2569–2577
- Rahman S U, Lobanova O R, Jiménez-Serratos G, Braga C, Raptis V, Müller E A, Jackson G, Avendaño C and Galindo A 2018 *J. Phys. Chem. Biophys.* **122** **39** 9161–9177
- Potoff J and Bernard-Brunel D 2009 *J. Phys. Chem. Biophys.* **113** 14725–14731
- Nielsen S O, Lopez C F, Srinivas G and Klein M L 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 7043–7049
- Maerzke K and Siepmann J 2011 *J. Phys. Chem. Biophys.* **115** 3452–3465
- Thompson A P *et al* 2022 *Comput. Phys. Commun.* **271** 108171
- Shinoda W, Shiga M and Mikami M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 134103
- Assael M and Papadaki M I 1991 *Int. J. Thermophys.* **12** 801–810
- Kondratyuk N, Lenev D and Pisarev V 2020 *J. Chem. Phys.* **152** 191104
- Winkelmann J Self-diffusion coefficient of nonane: Datasheet from physical chemistry · volume 15b1: “diffusion in gases, liquids and electrolytes” in springer materials (https://doi.org/10.1007/978-3-540-73735-3_210) copyright 2017 Springer-Verlag GmbH Germany
- Kondratyuk N D and Orekhov M A 2020 *J. Phys.: Conf. Ser.* **1556** 012048

Оптимизация процесса холодного напыления металлов для аддитивных технологий

И. С. Яковенко, А. Л. Котельников и А. Д. Киверин

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: yakovenko.ivan@bk.ru

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2022 г.

Аннотация. Методами численного моделирования проведено исследование многофазных течений, формируемых в ходе процесса высокоскоростного холодного напыления. На примере сопла Лавала исследовано влияние давления на входе в сопло, геометрического профиля подложки, начальной скорости микрочастиц и положения точки подвода частиц в газовый поток на эффективность процесса холодного напыления. Показано существенное повышение эффективности напыления при подаче микрочастиц за критическим сечением сопла, в области боковой поверхности струи. <https://doi.org/10.33849/2022205>

1. ВВЕДЕНИЕ

Технология холодного газодинамического напыления твердых микрочастиц на поверхность подложки, предложенная в начале 1980-х годов в Институте теоретической и прикладной механики СО РАН [1], широко используется для создания новых материалов и нанесения функциональных покрытий с заданными свойствами на элементы конструкций. В основе этой технологии лежит процесс ускорения микрочастиц в сверхзвуковой струе газа, формируемой при прохождении газового потока через сопло Лавала. Перенос частиц сверхзвуковым потоком обеспечивает ускорение частиц до высоких скоростей, но при этом температура частиц остается ниже температуры плавления, а адгезия покрытия обеспечивается за счет сильной пластической деформации микрочастиц при столкновении с подложкой [2].

Помимо нанесения покрытий, сегодня технология холодного напыления активно применяется для задач аддитивного производства [3]. Ввиду того, что процесс высокоскоростного газодинамического переноса микрочастиц не предусматривает их плавления, холодное напыление хорошо подходит для послойной печати трехмерных объектов из металлов и сплавов, в частности печати, модификации и ремонта отдельных деталей авиационной и аэрокосмической техники.

Использование технологии холодного напыления для задач аддитивного производства представляет собой относительно новое направление в промышленности. Несмотря на наличие на рынке экземпляров оборудования для трехмерной печати с использованием технологии холодного напыления, их дальнейшее совершенствование требует фундаментального анализа газодинамических процессов, развивающихся внутри сопла, внутренней и внешней баллистики при ускорении частиц и их переносе на поверхность подложки. В частности, большую важность имеют данные, на основе которых возможна оптимизация технологии, обеспечивающая миниатюризацию установки без снижения эффективности напыления. Актуальность такого направления оптимизации продиктована тем, что наиболее перспективные подходы к решению задач, связанных с трехмерной печатью и восстановлением поврежденных объектов, основаны на применении мобильных роботизированных платформ с большим числом степеней свободы [4].

Продуктивным методом анализа физических процессов, сопутствующих холодному напылению, и оптимизации этой технологии является использование подходов вычислительной газодинамики многофазных сред. Всестороннее экспериментальное исследование во многом ограничено ввиду большого количества определяющих параметров, высокой стоимости изготовления отдельных узлов и систем диагностики. Вычислительные методы, в свою очередь, хорошо зарекомендовали себя для решения задач оптимизации технологий напыления покрытий [5]. Однако технологии аддитивного производства требуют учета дополнительных факторов, в частности, пространственных размеров сопла, динамического изменения геометрии подложки при послойном напылении, точности локализации напыляемого материала. Существенным ограничением традиционных методик холодного напыления является относительно крупный размер пятна напыляемого материала (≈ 4 мм [6]), что делает невозможным печать мелкошабных объектов и структур. В целях разработки способов контроля размеров и формы пятна исследуются подходы с применением сопла нестандартной геометрии [7, 8].

В настоящей работе с применением детальных вычислительных экспериментов проведено исследование многофазных течений, формируемых при напылении микрочастиц на подложку, с целью выявления особенностей процесса для его эффективного применения в рамках задач аддитивных технологий. В частности, выполнен анализ влияния давления газа на входе в сопло, профиля подложки, начальной скорости микрочастиц и пространственного положения точки подвода частиц в газовый поток. При этом анализируется возможность использования особенностей структуры газодинамического потока, ускоренного в сопле Лавала, с более широким критическим сечением, по сравнению с традиционными методиками холодного газодинамического напыления. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации процесса холодного напыления для задач создания, модификации и ремонта трехмерных объектов из металлов.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В рамках рассматриваемой постановки задачи проведен полный анализ процесса высокоскоростного газо-

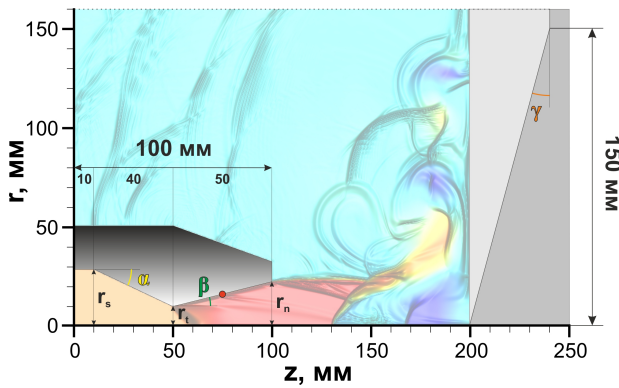


Рисунок 1. Постановка задачи вычислительных экспериментов для анализа различных аспектов процесса холодного напыления микрочастиц на твердотельную подложку.

динамического течения, формируемого в сопле Лавалья, с учетом наличия подложки и межфазного взаимодействия микрочастиц с потоком. Геометрические параметры сопла, подложки и зазора между ними схематично приведены на рисунке 1. На входе сопла задано условие на давление $P_{in} = 5, 10, 15, 20$ атм и температуру $T_{in} = 550$ К поступающего в сопло газа. В качестве рабочего газа выбран воздух, как наиболее удобный с точки зрения автономности и экономичности. Параметры несущего потока на входе в сопло далее определяются, исходя из решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва для заданных значений P_{in} и T_{in} . Достижение конечных значений давления достигается за время релаксации ($\tau = 5$ мкс), в течение которого давление нарастает по линейному закону во избежание формирования мощной ударной волны в начальный момент времени. В рамках рассматриваемой постановки параметры течения соответствуют представленным в работе [9], где обсуждаются результаты экспериментального исследования особенностей работы перспективной установки холодного газодинамического напыления низким давлением применительно к задачам аддитивных технологий. Параметры сопла были выбраны близкими к рассмотренным в работе [10], где на основе экспериментального и расчетно-теоретического анализа получены оптимальные конфигурации геометрии сопла для давлений на входе в сопло 25–30 МПа. Так, в настоящей работе рассмотрено сопло с длиной прямолинейного участка 10 мм, длиной сужающейся секции 40 мм и длиной расширяющейся секции 50 мм. Коэффициент расширения сопла, определяемый как отношение площади среза сопла к площади критического сечения, выбирался равным 5, что соответствует диапазону оптимальных значений коэффициента расширения, полученных в [10, 11]. При этом было рассмотрено две основные конфигурации сопла — с радиусом критического сечения 4 мм ($r_s = 22.9$ мм, $r_t = 4$ мм, $r_n = 8.9$ мм, $\alpha = 25^\circ$, $\beta = 5.6^\circ$) и 10 мм ($r_s = 28.9$ мм, $r_t = 10$ мм, $r_n = 22.3$ мм, $\alpha = 25^\circ$, $\beta = 13.9^\circ$). Таким образом, проведен анализ газодинамических течений как в соплах с малым критическим сечением, традиционно используемых в установках холодного напыления, так и в более широких. Использование сопла с широким критическим сечением, с одной стороны, характеризуется большим расходом рабочего газа, но в то же время может быть одним из возможных

способов уменьшить скорость износа сопла и избежать его засорения [12], что имеет принципиальную важность для автономной работы систем холодного напыления.

Плотность материала частиц выбрана равной 7700 кг/м³, близкой к средней плотности стали различных марок. Диаметр частиц задавался равным 25 мкм, что соответствует среднему размеру частиц, используемых на практике [3]. Частицы подавались в газодинамический поток одна за другой, с временным промежутком между подачами в 10 мкс. Было рассмотрено два варианта положения точки подвода микрочастиц: осевое, вблизи начала координат $\vec{r}_p = (0$ мм, 0 мм) и положение за критическим срезом сопла в области боковой поверхности сверхзвуковой струи $\vec{r}_{p,0} = (6$ мм, 75 мм) для сопла с критическим сечением 4 мм и $\vec{r}_{p,0} = (16$ мм, 75 мм) для сопла с критическим сечением 10 мм, именуемое в дальнейшем “боковым”. Схематично точка подачи за критическим сечением обозначена красным на рисунке 1. Расстояние от подложки до среза сопла составляло 10–15 см, в зависимости от ориентации подложки. Были рассмотрены профилированная подложка с наклоном $\gamma = 15^\circ$ к вертикали и вертикальная подложка без наклона.

Осесимметричная математическая модель основана на полной системе уравнений Навье–Стокса для сжимаемого вязкого газа с учетом теплопроводности. Вычислительные алгоритмы газовой динамики аналогичны использованным авторами для анализа процессов напыления микрочастиц в потоке за детонационной волной [13] или перед ускоряющимся в канале пламенем [14, 15]. Перенос частиц описывался с помощью лагранжевой модели, что позволило отследить динамику индивидуальных частиц и провести ее статистический анализ. Модель межфазного взаимодействия учитывала взаимный обмен энергией и импульсом между частицами и газом. Коэффициент сопротивления сферической микрочастицы описывался в приближении Шиллера–Наумана [16].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Особенности газодинамического течения

Рассмотрим структуру газодинамических потоков, формируемых в сопле Лавалья и в зазоре между срезом сопла и твердотельной подложкой. На рисунке 2 приведены картины потока для случая сопла с радиусом критического сечения 4 мм. Особенности струйного течения, формируемого в зазоре между подложкой и срезом сопла, определяют процесс ускорения микрочастиц, скорость, с которой они взаимодействуют с подложкой, и принципиальную возможность их осаждения на подложке. При увеличении давления на входе в сопло скорость струи увеличивается, начиная от ≈ 800 м/с для давления $p_{in} = 5$ атм и заканчивая ≈ 1500 м/с для давления $p_{in} = 20$ атм. Важной особенностью течения является положение диска Маха, где происходит резкое торможение потока. Вслед за снижением скорости течения, уменьшается также и скорость частиц в потоке. Однако, чем больше размер частиц, тем дольше время релаксации скорости частиц к скорости потока, и в случае, если расстояние от диска Маха до подложки мало, возможно успешное осаждение движущихся по инерции частиц на подложку. Для малых давлений диск Маха не

формируется и течение имеет практически однородную структуру вплоть до поверхности подложки.

В случае давлений 15 и 20 атм можно наблюдать формирование диска Маха вблизи поверхности подложки, при этом расстояние от диска Маха до поверхности подложки увеличивается по мере увеличения давления. Для широкого сопла (см. рисунок 3) с радиусом критического сечения 10 мм диск Маха формируется на большем расстоянии от поверхности подложки, при этом с ростом давления наблюдается обратная тенденция — диск Маха приближается к поверхности подложки. При этом, однако, падение скорости потока за диском Маха становится более резким.

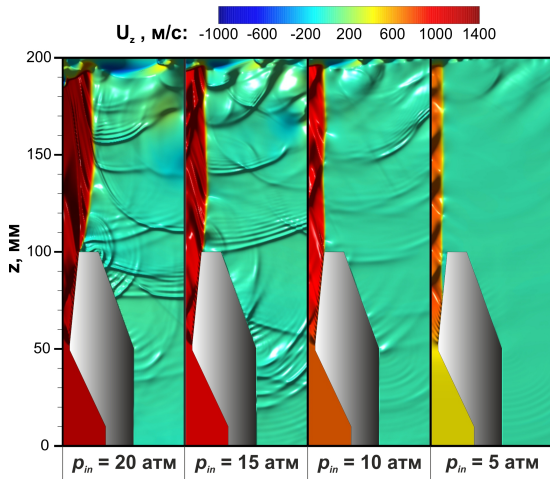


Рисунок 2. Структура газодинамического потока в случае сопла с радиусом критического сечения 4 мм. Слева направо: $p_{in} = 20, 15, 10, 5$ атм.

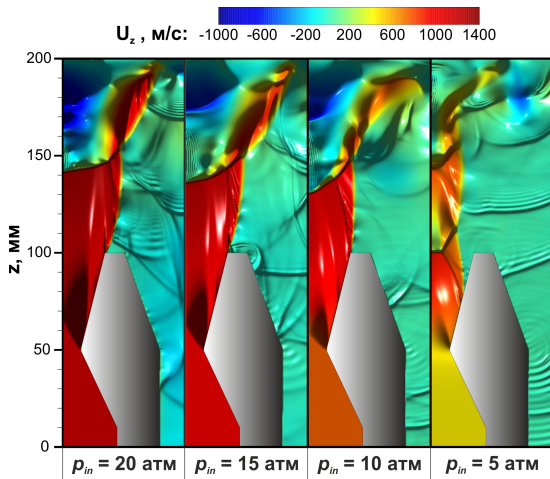


Рисунок 3. Структура газодинамического потока в случае сопла с радиусом критического сечения 10 мм. Слева направо: $p_{in} = 20, 15, 10, 5$ атм.

Влияние наклона подложки на картину течения продемонстрировано на рисунке 4. Можно видеть, что для сопла с широким критическим сечением изменение пространственной ориентации подложки приводит к приближению диска Маха к поверхности подложки и уменьшению амплитуды падения скорости за диском Маха и снижению интенсивности возвратного течения

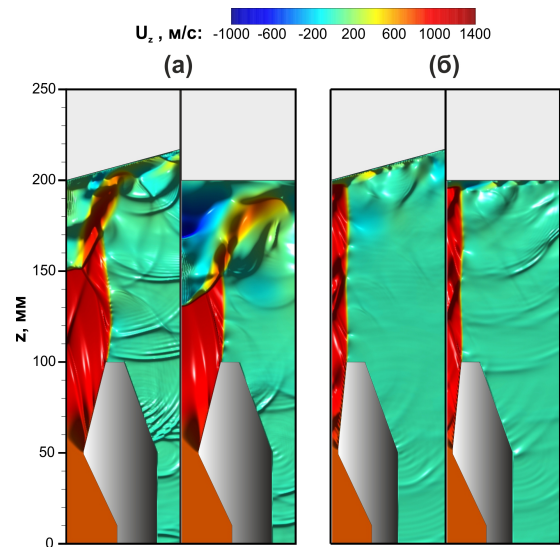


Рисунок 4. Сравнение картин течения в случае прямой и наклонной подложки $p_{in} = 10$ атм. а) Радиус критического сечения 10 мм; б) радиус критического сечения 4 мм.

вблизи подложки. Важно также отметить, что наклон подложки уменьшает радиус диска Маха, и скорость потока на боковой поверхности струи становится более равномерной. Это определяет возможное улучшение эффективности напыления при подаче частиц через боковую поверхность сопла за критическим сечением. Для сопла с меньшим критическим сечением изменение ориентации подложки влияет на структуру потока незначительно.

На рисунке 5 приведены профили распределения скорости потока вдоль оси сопла для случая плоской подложки (рисунок 5(a)) и случая наклонной подложки (рисунок 5(b)). Можно видеть, что изменение ориентации подложки в случае сопла с малым критическим сечением ведет к смещению диска Маха вверх по потоку, в то время как для сопла с большим критическим сечением наблюдается обратная тенденция. Для давления $p_{in} = 20$ атм диск Маха формируется на одинаковом расстоянии от подложки для обоих из рассмотренных вариантов сопла Лавала. Отсюда можно заключить, что увеличение критического сечения сопла может использоваться для холодного напыления под высоким давлением (high pressure cold spray) с целью снижения износа сопла и предотвращения его засорения при условии оптимального выбора ориентации подложки.

3.2. Анализ траектории микрочастиц при их ускорении в потоке

Рассмотрим динамику движения микрочастиц в несущем потоке воздушной струи. На рисунке 6 приведены: (a) характерные траектории микрочастиц и (b) профили осевой проекции вектора скорости микрочастиц U_z^p , а также распределения этих величин на поверхности подложки. На рисунке 7 представлены гистограммы радиальной координаты частиц при их осаждении на подложку для нормальной и наклонной взаимной ориентации подложки и сопла с критическим сечением 4 мм. Можно видеть, что влияние пространственной ориентации подложки на траекторию частиц незначи-

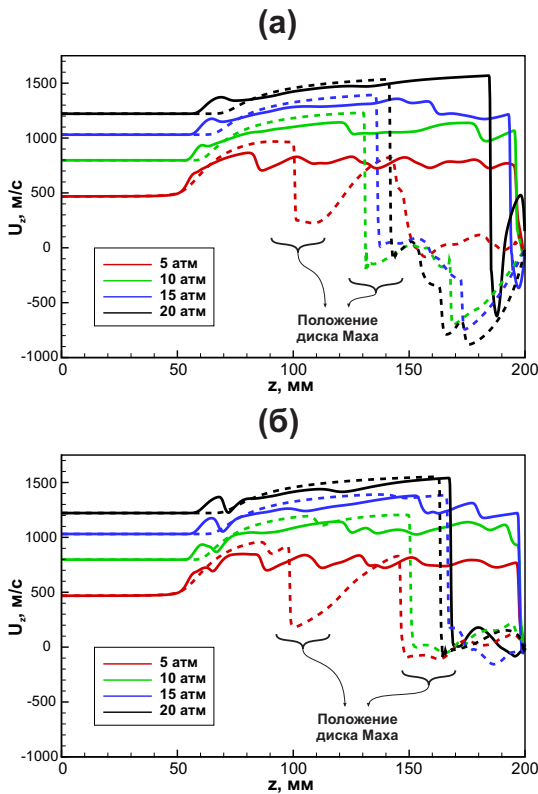


Рисунок 5. Профили скорости потока U_z в сечении вдоль оси сопла в случае нормальной (а) и наклонной ориентации подложки (б). Сплошные линии — сопло с радиусом критического сечения 4 мм, штриховые линии — сопло с радиусом критического сечения 10 мм.

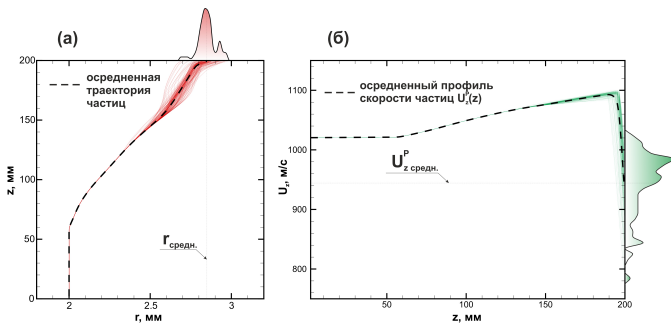


Рисунок 6. (а) Траектории микрочастиц внутри сопла и в зазоре между поверхностью подложки и срезом сопла. (б) Профили осевой проекции вектора скорости микрочастиц U_z^p . Штриховыми линиями приведены осредненные кривые для ансамбля частиц. На осях построены распределения радиальной координаты частиц на поверхности подложки и осевой проекции вектора скорости на поверхности подложки.

тельно, однако наклон подложки приводит к уменьшению разброса частиц при их осаждении на подложку и, соответственно, к снижению пространственного размера пятна напыляемого материала. Для сопла с критическим сечением 10 мм наклон подложки оказывает существенное влияние на траекторию микрочастиц и улучшает эффективность осаждения микрочастиц на подложку (см. рисунок 8). Причем локализация и процент успешно достигших подложки частиц возрастают с увеличением давления, что соответствует выводам, сделан-

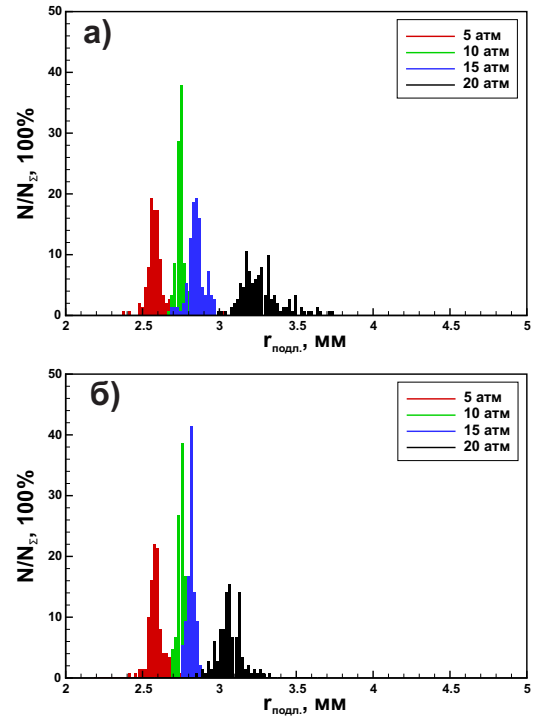


Рисунок 7. Распределение радиальной координаты микро-частиц на подложке при использовании сопла с критическим сечением 4 мм. (а) Нормальная ориентация подложки, (б) — наклонная подложка.

ным выше на основе анализа особенностей газодинамического потока. Так, при аппроксимации распределения частиц на подложке функцией Гаусса, среднеквадратичное отклонение частиц от центра пятна уменьшается с 277 мкм для прямой подложки до 195 мкм (в 1.42 раза) в случае давления на входе сопла $p_{in} = 5$ атм, с 443 мкм до 166 мкм (в 2.67 раза) для $p_{in} = 10$ атм, с 370 мкм до 42 мкм (в 8.8 раз) для $p_{in} = 15$ атм и с 170 мкм до 24 мкм (в 7 раз) для $p_{in} = 20$ атм.

На рисунке 9 приведены гистограммы осевой составляющей скорости микрочастиц, достигших поверхности подложки для сопла с критическим сечением 4 мм в случае нормальной (рисунок 9(а)) и наклонной (рисунок 9(б)) ориентаций подложек. Наклон подложки приводит к уменьшению разброса значений скорости частиц при достижении подложки, а также к увеличению средней скорости частиц. При этом, большее снижение разброса скорости частиц наблюдается для диапазона давлений $p_{in} = 5-15$ атм. В случае давления $p_{in} = 20$ атм наблюдается увеличение средней скорости частиц на подложке с 694 м/с для плоской подложки до 946 м/с для наклонной подложки.

На рисунке 10 представлены гистограммы распределения осевой координаты осаждения частиц и гистограммы скорости частиц при подаче частиц через боковую поверхность сопла за критическим сечением для конфигураций сопла с критическим сечением 4 мм и 10 мм. Сравнивая гистограммы для вариантов с осевой и боковой подачами частиц, можно отметить, что при подаче через боковую поверхность сопла с критическим сечением 4 мм в случае осевой подачи значительно увеличивается скорость частиц при их достижении по-

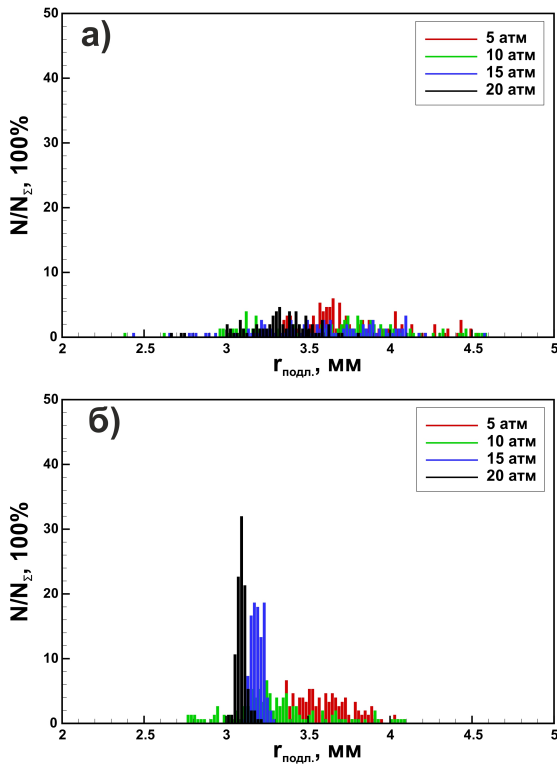


Рисунок 8. Распределение радиальной координаты микро-частиц на подложке при использовании сопла с критическим сечением 10 мм. (а) Нормальная ориентация подложки, (б) — наклоненная подложка.

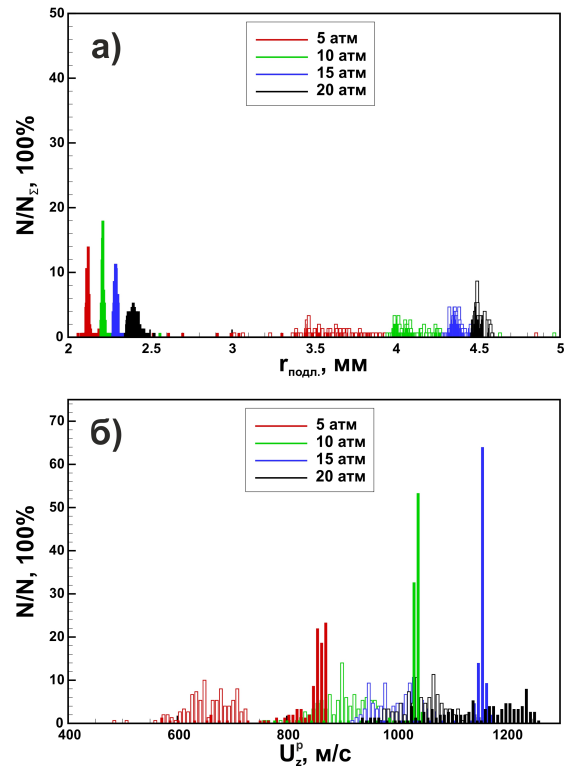


Рисунок 10. Влияние боковой подачи на параметры частиц на подложке. (а) Распределение радиальной координаты микро-частиц на подложке, (б) распределение осевой скорости микро-частиц на подложке при боковой подаче микро-частиц. Сопло с критическим сечением 4 мм (закрашенные столбцы) и критическим сечением 10 мм (белые столбцы).

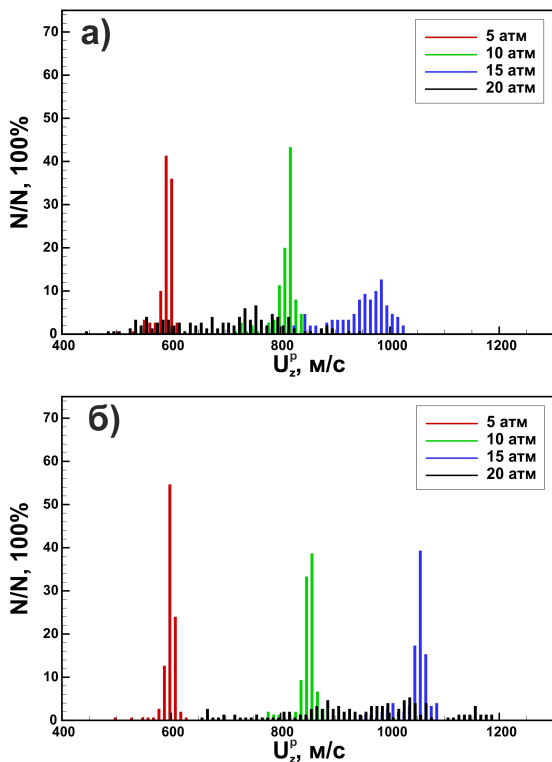


Рисунок 9. Распределение осевой скорости микро-частиц на подложке при использовании сопла с критическим сечением 4 мм. (а) Нормальная ориентация подложки, (б) — наклоненная подложка.

верхности подложки. Для сопла с критическим сечением 10 мм существенного повышения количества и скорости осажденных частиц не наблюдается.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнен численный анализ особенностей газодинамических течений с микро-частицами, формируемых в ходе работы установки холодного газодинамического напыления. В частности, проанализировано влияние давления на входе в сопло, пространственной ориентации подложки и точки подачи микро-частиц в поток струи несущего газа. Продемонстрировано, что в случае сопла с критическим сечением 4 мм увеличение давления на входе в сопло приводит к увеличению разброса координат частиц на подложке и скоростей подлета частиц. В частности, разброс скоростей и координат значительно растет при увеличении давления на входе p_{in} выше 15 атм. Изменение геометрической ориентации подложки позволяет улучшить локализацию частиц на подложке и получить более высокие скорости микро-частиц вблизи подложки. В случае сопла с более широким критическим сечением 10 мм с увеличением давления наблюдается обратная тенденция. Для случая наклонной подложки с использованием сопла с критическим сечением 10 мм локализация частиц повышается с увеличением давления. Боковая подача микро-частиц за критическим сечением сопла не оказывает существенно-

го влияния на осаждение частиц и их скорость при достижении подложки. Ввиду этого, боковая подача микрочастиц представляется перспективным способом избежать износа сопла и его засорения.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена с использованием суперкомпьютерных вычислительных ресурсов Межведомственного Вычислительного Центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алхимов А П, Клинков С В, Косарев В Ф и Фомин В М 2010 *Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика* 1-е изд. (Москва: ФИЗМАТЛИТ)
2. Klinkov S V, Kosarev V F and Rein M 2005 *Aerospace Science and Technology* **9** 582–591
3. Raelison R N, Verdy C and Liao H 2017 *Materials and Design* **133** 266–287
4. Vargas-Uscategui A, King P C, Yang S, Chu C and Li J 2021 *Journal of Materials Processing Technology* **298** 117272
5. Sova A, Grigoriev S, Kochetkova A and Smurov I 2014 *Surface and Coatings Technology* **242** 226–231
6. Sova A, Grigoriev S, Okunkova A and Smurov I 2013 *International Journal of Advanced Manufacturing Technology* **69** 2269–2278
7. Zaikovskii V N, Klinkov S V, Kosarev V F, Melamed B M and Trubacheev G V 2014 *Thermophysics and Aeromechanics* **20** 223–230
8. Zaikovskii V N, Klinkov S V, Kosarev V F, Melamed B M and Trubacheev G V 2014 *Thermophysics and Aeromechanics* **21** 105–112
9. Valente A, Gitardi D and Carpanzano E 2020 *CIRP Annals* **69** 181–184
10. Li W Y, Liao H, Douchy G and Coddet C 2007 *Materials and Design* **28** 2129–2137
11. Li W Y and Li C J 2005 *Journal of Thermal Spray Technology* **14** 391–396
12. Liebersbach P, Foelsche A, Champagne V K, Siopis M, Nardi A and Schmidt D P 2020 *Journal of Thermal Spray Technology* **29** 400–412
13. Голуб В В, Иванов М Ф, Киверин А Д и Яковенко И С 2014 *Письма в Журнал технической физики* **40** 88
14. Голуб В В, Киверин А Д, Садохина Т Д и Яковенко И С 2018 *Письма в Журнал технической физики* **44** 87–94
15. Yakovenko I S and Kiverin A D 2021 *Acta Astronautica* **181** 620–632
16. Schiller L and Nauman A 1935 *VDI Zeitung* **77** 318–320

Моделирование взаимодействия высокоэнтальпийной струи газа с материалом образца

Л. М. Василяк, М. Х. Гаджиев, Ю. М. Куликов и В. А. Панов
Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: panovvladislav@gmail.com

Статья поступила в редакцию 6 декабря 2022 г.

Аннотация. Проведен расчет взаимодействия высокоэнтальпийной затопленной струи с образцом, выполненным из модельного материала. На основе модели сопряженного теплообмена, фазового перехода и механизма подвижных сеток получены картины изменения формы образца, распределения скорости и температуры. <https://doi.org/10.33849/2022206>

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование взаимодействия высокоэнтальпийных течений с твердым телом (образцом) является актуальной задачей гидродинамики и теплофизики высокотемпературных сред (как с точки зрения теории, так и эксперимента). По своей сути задача является модельной и восходит к задачам высокоскоростного движения летательных (космических) аппаратов [1] в атмосфере Земли и других планет, процессам в ракетных двигателях. В данном случае мы будем рассматривать только задачи внешнего обтекания. Модельность этой постановки заключается в необходимости создания скоростных (по числам Маха M и Рейнольдса Re) и тепловых режимов, подобным тем, которые наблюдаются при реальном обтекании тела (при его входе в атмосферу).

В экспериментальной практике для этого используются [2] генераторы низкотемпературной плазмы (плазмотроны) мощностью несколько мегаватт, которые позволяют создавать высокоэнтальпийные потоки плазмы с температурой до 10000 К и скоростями до 1–1.2 км/с. Отметим, что, несмотря на большие скорости газа, течение является дозвуковым из-за большой скорости звука в плазме. Действительно, создать требуемые скоростные режимы (по числу M) с помощью плазмотрона труднее, чем тепловые. В ряде задач высокотемпературного обтекания требуется могут потребоваться оценка чисел Da (число Дамкеллера), Sc (число Шмидта), Le (число Льюиса) [3].

Для создания сверхзвукового потока плазмы необходимо высокое давление в разрядной камере, что требует большего пробойного напряжения для зажигания дуги. При относительно низких температурах проводимость равновесной плазмы убывает с ростом давления, таким образом, для поддержания горения разряда потребуется большее напряжение. Проектирование плазмотрона высокого давления представляет собой сложную научно-техническую задачу [4]. Опыт теоретического описания и численного моделирования генераторов низкотемпературной плазмы показывает, что эта задача оказывается гораздо более сложной в сравнении с задачами гиперзвукового обтекания летательных аппаратов [3].

Плазма, покидающая плазмотрон, представляет собой затопленную струю газа, которая, в отличие от своего гидродинамического аналога, имеет не только большой градиент скорости в сдвиговом слое, но и большие градиенты всех теплофизических параметров (теплоем-

кости, энтальпии), транспортных коэффициентов (теплопроводности, диффузии).

Неравновесное излучение играет важную роль в работе генераторов низкотемпературной плазмы (ГНП): предполагается [5], что именно оно осуществляет основной нагрев газа, находящегося между дуговым каналом, где может достигаться температура до 100 000 К, и стенками плазмотрона.

Создаваемая плазма представляет собой неустойчивый объект, свойства которого быстро меняются под воздействием: (1) — собственного излучения плазмы, где велика роль неравновесного излучения, испускаемого всем объемом плазмы в приближении оптически тонкого слоя; (2) — рекомбинации; (3) — больших скоростей диффузии частиц из окружающей среды и их последующей диссоциации и ионизации; (4) — развития неустойчивости Кельвина–Гельмгольца и последующего крупномасштабного смешения; (5) — под воздействием возмущений, развивающихся в рабочем тракте плазмотрона (в том числе создаваемых дугой), происходит турбулизация газового потока, характерное число перехода к турбулентности составляет $Re = 400$; (6) — плазма, выходящая из ГНП, имеет достаточно большую электропроводность, таким образом, в ней могут протекать “паразитные” токи. Их величина (порядка 0.5 А) может быть мала по сравнению с основным током дуги между катодом и анодом. Однако электрохимические процессы укоряют разрушение исследуемого образца.

Перечисленные явления приводят к резкому изменению свойств струи и ее химического состава уже на дистанции нескольких калибров от среза сопла.

Взаимодействие низкотемпературной плазмы с материалом образца представляет собой целую совокупность процессов, возникающих в пристеночном слое, связанных с многокомпонентной диффузией и турбулентностью, химическими реакциями компонентов плазмы с молекулами вещества образца. Интенсивная рекомбинация приводит к выделению тепла на поверхности образца, таким образом, даже в случае не реагирующих веществ возможно плавление и абляция материала, а также его структурное разрушение. Если образец располагается непосредственно у разрядной камеры, то возможен его дополнительный нагрев излучением дуги.

Изучение процесса чистой абляции материала требует использования особо чистых газов, так как даже малая концентрация реагирующей примеси может существенно изменить скорость разрушения материала образца.

В дальнейшем при построении модели и обсуждении результатов моделирования мы будем пользоваться общим термином “разрушение материала”, не вдаваясь в характер этого процесса [6]: (1) — сублимацию, (2) — термическое разложение, (3) — химическое взаимодействие (реакции) на поверхности, (4) — объемно-поверхностное химическое взаимодействие, (5) — оплавление, (6) — оплавление при наличии химического взаимодействия.

Существует большое число работ, выполненных различными авторами за последние шестьдесят лет, которые приблизительно очерчивают следующий круг задач: экспериментальное исследование плавления метеоритов [7], исследование пиролиза обугливающихся теплозащитных материалов [8–16], численное моделирование движения в атмосфере с абляцией [17–45], исследования радиационного теплообмена [46–55], экспериментальное исследование обтекания затупленных тел при различных углах атаки [56–58], экспериментальное исследование абляции вольфрама для использования его в теплозащитных покрытиях (ТЗП) [58–60], экспериментальное исследование абляции тефлона [61], льда [62], силикатов [63], тантала [64], керамики на основе циркония [65], развитие моделей разрушения графита на основе экспериментальных исследований [15, 66–74], исследование абляции спускаемых аппаратов в атмосфере Венеры [75–77], Марса [78–80], Юпитера [81–85], Сатурна [86], численное исследование неравновесных процессов в аблирующем слое [46, 87–95], абляция веществ, имеющих способность к стеклованию [96–103]; интерес представляет создание диагностики на основе плоской лазерной флуоресценции компонентов разрушающегося ТЗП (ароматические углеводороды нафталинового, фенантренового и дибензотиофенового ряда) [104–106], численные модели переноса продуктов абляции [107–109], развитие вариационных методов [110, 111], исследования низкотемпературной абляции при помощи лазерной анемометрии по изображениям частиц в турбулентном пограничном слое [112], радиационные свойства аблирующего материала [51, 113–118], граничные условия на аблирующей поверхности ТЗП [119], численное моделирование термически и химически неравновесных течений и теплообмена в недорасширенных струях индукционного плазмотрона [120], в частности, исследование граничных условий скольжения на каталитической стенке в многокомпонентном многотемпературном химически реагирующем потоке газа с возбужденными внутренними степенями свободы частиц [121, 122], абляционные процессы в ракетных двигателях [123–129], взаимодействие газа из ГНП с образцом [111, 130], влияние шероховатости образца на процесс абляции [131], абляция твердого тела при взаимодействии с жидкостью [132]. Отдельно отметим разработку уравнений движения многокомпонентного и многотемпературного газа [133] с использованием оригинальной формы соотношений переноса в форме “термодинамические силы через потоки” с точными и более простыми по сравнению “классическими” коэффициентами переноса для идеальных, так и слабонеидеальных смесей газов и плазмы, в том числе в присутствии внешних электромагнитных полей. Интерес вызывают и модели колебательно-диссоционного

взаимодействия в термохимически-неравновесных режимах гиперзвукового обтекания в вязком ударном слое [134–137], которые позволили установить, что при высоких температурах газа за головной ударной волной времена релаксации колебательных степеней свободы становятся порядка времен реакций диссоциации, и в этом случае диссоциация происходит на фоне релаксации колебательных степеней свободы — происходит так называемое колебательно-диссоциационное взаимодействие, повышающее температуру в ударном слое (УС) и, следовательно, тепловой поток до 26% и уменьшающее отход головной ударной волны до 20% по сравнению с моделью термически равновесных констант химических реакций.

Аналогичная модель была разработана и для электронно-ионизационного взаимодействия, когда реакции ионизации идут на фоне релаксации возбужденных электронных степеней свободы атомов и молекул [138].

Исследование высокоэнтропийных струй требует построения сложных моделей на основе различных разделов вычислительной физики. Целесообразно использовать иерархию моделей, последовательно включая в рассмотрение сопряженный теплообмен, модели фазового перехода, химические реакции, радиационный теплообмен, турбулентность. Определяющим фактором для выбора инструмента исследования является возможность использования подвижных сеток, надежных решателей, большого набора физических моделей. В предлагаемой работе основной акцент сделан на проверке устойчивости работы солвера при расчете течений с конвективными переносом и большими температурными градиентами. Учет теплофизики реальных газов (в частности, всплесков теплоемкости), скорее всего, будет приводить к сглаживанию различных пространственных неоднородностей и “облегчению” работы солвера.

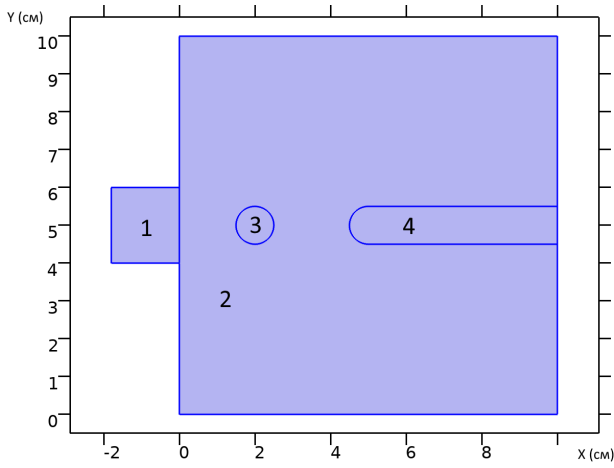
2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Проводится моделирование изменения формы образца из модельного материала под действием струи горячего газа (азота).

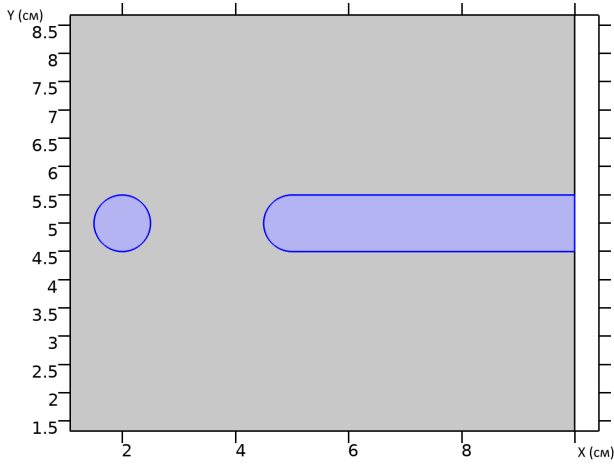
Расчетная область образована несколькими фигурами, представленными на рисунке 1(a): (1) — квадратная область, занятая течением газа, (2) — область формирования затопленной струи, (3) — область твердого материала, с подвижными границами, деформируемая геометрия, (4) — область твердого материала с неподвижными границами. Область (4) предназначена для сохранения застойной зоны в течении при уменьшении области (3) вследствие разрушения.

Области, где располагается твердое тело представлены на рисунке 1(b), газ — на рисунке 1(c). Протяженность расчетной области в направлении z (перпендикулярно плоскости) составляет $d_z = 1$ м. Ширина затопленной струи — 2 см, диаметр круга, представляющего область (3) — 1 см. Расстояние от точки выхода затопленной струи до поверхности образца — 1.5 калибра.

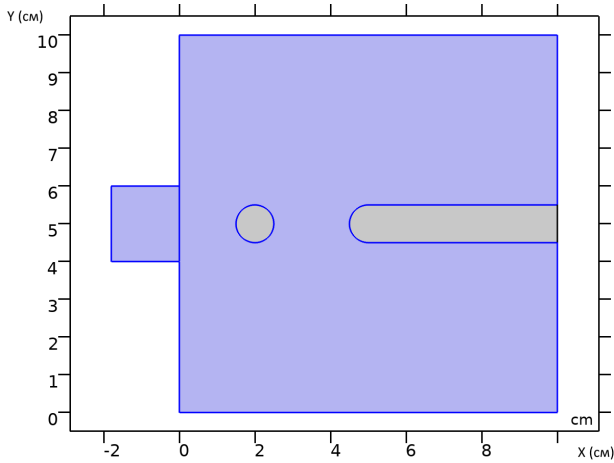
Модельный материал, образующий твердое тело обладает следующими свойствами: $\alpha_s = 0.000267$ 1/К — коэффициент теплового расширения, $C_{p_s} = 200$ Дж/(кг К) — удельная теплоемкость материала образца, $L_{s \rightarrow f} = 3$ Дж/кг — удельная теплота фазового перехода “твердое тело — жидкость”,



(a)



(b)

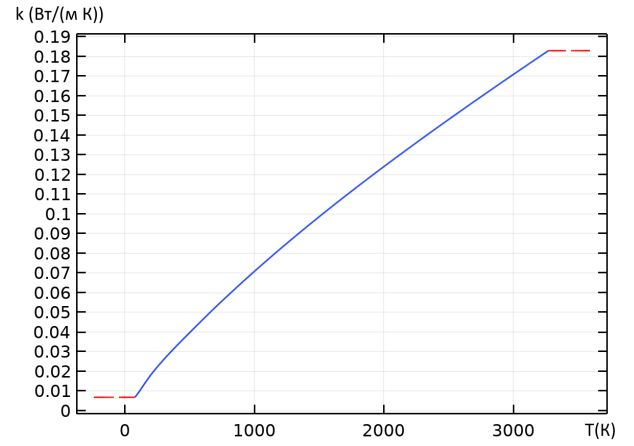


(c)

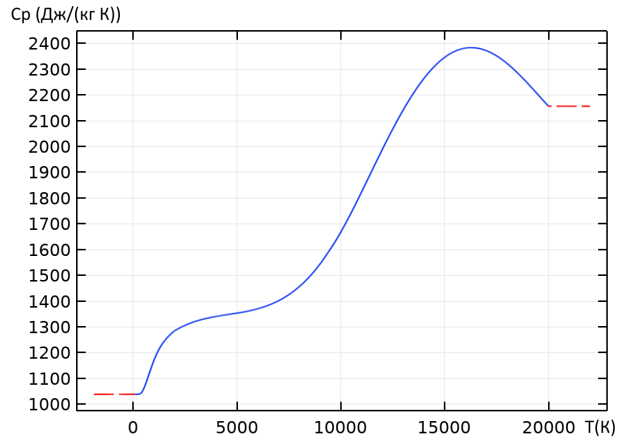
Рисунок 1. Области расчетной геометрии: (a) — общий вид расчетной области, (b) — области с параметрами материала образца, (c) — области с параметрами газа.

$k_s = 6 \text{ Вт/(м К)}$ — коэффициент теплопроводности материала, $\rho_s = 7500 \text{ кг/м}^3$ — плотность, $T_c = 503 \text{ К}$ — характерная температура расчетной области (холодная стенка), $T_f = 505 \text{ К}$ — характерная температура фазового перехода, $T_h = 600 \text{ К}$ — характерная температура затопленной струи.

Основываясь на базе данных NIST, для азота заданы кусочно-гладкие зависимости для теплопроводности



(a)



(b)

Рисунок 2. Зависимость материальных коэффициентов переноса и теплофизических свойств азота от температуры: (a) — теплопроводность k (по данным [139]), (b) — теплоемкость C_p (по данным [140]).

k_g , теплоемкости при постоянном давлении C_p , плотности ρ , динамической вязкости η , которые представлены на рисунках 2 и 3. Полиномиальные аппроксимации строились на основе данных по коэффициентам переноса и теплопроводности из [139–141]. Показатель адиабаты задается как для идеального двухатомного газа $\gamma = 1.4$.

Для моделирования сопряженного теплообмена решается общее уравнение теплопроводности

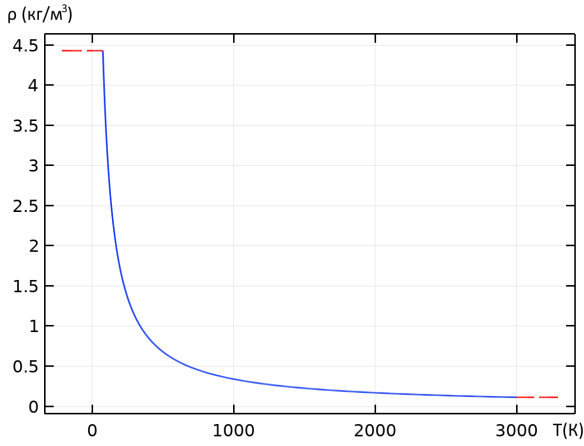
$$d_z \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + d_z \rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot \vec{q} = d_z Q + q_0, \quad (1)$$

$$\vec{q} = -d_z k \nabla T,$$

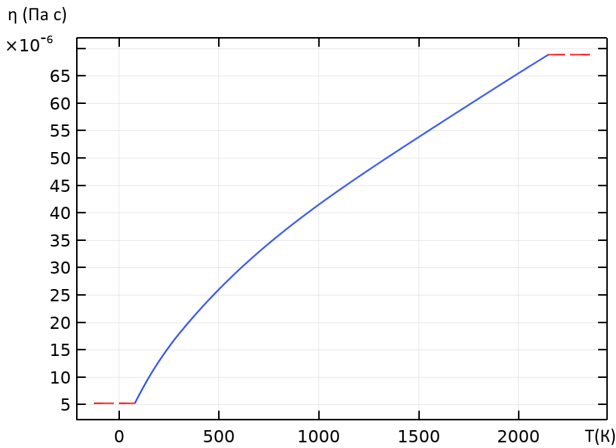
в области, занимаемой твердым телом, решается уравнение теплопроводности для твердого тела, записываемое в общей форме

$$d_z \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + d_z \rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \vec{q} = d_z Q + q_0 + d_z Q_{ted}, \quad (2)$$

$$\vec{q} = -d_z k_s \nabla T,$$



(a)



(b)

Рисунок 3. Зависимость материальных коэффициентов переноса и теплофизических свойств азота от температуры: (a) — плотность ρ ; (b) — динамическая вязкость η (по данным [141]).

а в области, в которой происходит движение газа — уравнение для теплопроводности в газе (в общей форме)

$$\begin{aligned} d_z \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + d_z \rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \vec{q} \\ = d_z Q + q_0 d_z Q_p + d_z Q_{vd}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\vec{q} = -d_z k \nabla T.$$

Термодинамические параметры связываются уравнением состояния идеального газа

$$\rho = \frac{p}{R_s T}, \quad (4)$$

где d_z — протяженность расчетной области в направлении, перпендикулярном плоскости моделирования, C_p — теплоемкость при постоянном давлении, T — температура, \vec{q} — тепловой поток, \vec{u} — скорость, Q — источник тепловыделения, q_0 — внутренний тепловой поток, Q_{ted} — источник тепла, связанный с термоэластичностью, Q_p — источник тепла, связанный с работой сил давления, Q_{vd} — источник тепла вследствие вязкой диссипации, k — теплопроводность газа, k_s — теплопроводность твердого тела, R_s — газовая постоянная (удель-

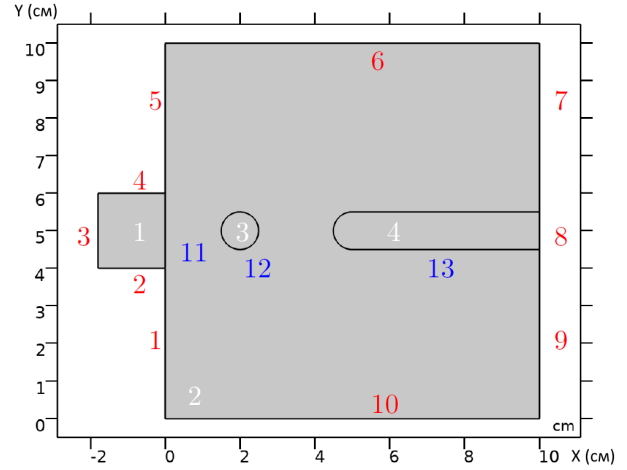


Рисунок 4. Вид расчетной области с указанием граничных условий. Синие цифры соответствуют внутренним границам расчетной области, красные показывают внутренние границы, белые — номера областей расчетной геометрии.

ная), ρ — плотность, p — давление. В рассматриваемой постановке слагаемые, содержащие \vec{q} , Q , q_0 , Q_{ted} , Q_p , Q_{vd} тождественно равны нулю.

В качестве начальных условий для областей (2), (3), (4) на рисунке 4 задается температура T_c , границы 1, 2, 4, 5 предполагаются теплоизолированными, подчиняясь условию

$$-\vec{n} \cdot \vec{q} = 0, \quad (5)$$

где \vec{n} — внешняя нормаль к границе.

На границе (3) задается температура, зависящая от времени

$$T = T_h + 2T_h(1 - \exp(-t)). \quad (6)$$

На границах (8) и (13) расчетной области (4) задается условие постоянной температуры

$$T = T_c. \quad (7)$$

На внутренней границе (12) задается группа граничных условий (ГУ), описывающая фазовый переход, приводящий к изменению формы области (3):

$$\begin{aligned} T &= T_f, \\ \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{n} &= v_n, \\ v_n &= \frac{\vec{q} \cdot \vec{n}}{\rho_m L_{s \rightarrow f}}, \\ \vec{q} &= -k_s \nabla T_s + k_g \nabla T_g, \end{aligned} \quad (8)$$

где T_f — температура фазового перехода, \vec{x} — радиус-вектор границы фазового перехода, v_n — нормальная скорость движения границы ячейки расчетной сетки, ρ_s — плотность материала образца, k_s — коэффициент теплопроводности твердого тела, k_g — коэффициент теплопроводности газа у поверхности твердого тела, T_s — температура в твердом теле у поверхности, T_g — температура газа в окрестности межфазной границы.

Для задания ГУ с изменением фазы, необходимо определить температуру фазового перехода, T_{pc} и скрытую теплоту фазового перехода $L_{s \rightarrow f}$, связанные с переходом из твердой фазы в жидкую. Величина $L_{s \rightarrow f}$ должна принимать положительное значение. Кроме этого необходимо задать, на какой стороне ГУ происходит изменение фазы (твердое тело / верхняя / нижняя сторона).

Также необходимо выбрать метод оценки скачка теплового потока. По умолчанию выбран параметр множителя Лагранжа, который вводит дополнительную переменную на границе для точного определения температуры и расчета скачка теплового потока (слабое условие). Как показали предварительные расчеты, этот метод оказывается неустойчивым при последовательном движении расчетной сетки, что приводит к ошибкам в работе солвера. В качестве альтернативы используется метод оценки температурного градиента, чтобы определить тепловой режим на границе. Такой подход приводит к жесткой формулировке ГУ, более удобной с точки зрения численного решения, особенно для итерационных решателей, однако, точность скачка теплового потока сильно зависит от размера сетки рядом с границей. В этом случае может потребоваться очень мелкая сетка, чтобы достичь той же точности, в сравнении с использованием множителя Лагранжа.

При обоих методах оценки скачка теплового потока могут появиться численные осцилляции в скорости границы раздела. Для уменьшения влияния осцилляций необходимо проводить сглаживание движущейся межфазной границы. Этот параметр сглаживает нормальную скорость сетки, добавляя скорость сглаживания v_{mbs} , пропорциональную средней кривизне границы раздела H (1/м), и размеру элемента сетки h (м):

$$v_{mbs} = \delta_{mbs} |v_n| h H. \quad (9)$$

Эта дополнительная скорость движения сетки равна нулю для прямолинейных границ, но будет искусственно увеличивать нормальную скорость сетки для сильно искривленных поверхностей, например, вдоль капель или пузырьков. Следует обратить внимание, что добавление этого слагаемого изменяет физическую модель и может привести к нарушению закона сохранения массы. Параметр сглаживания движущейся границы δ_{mbs} — безразмерное число, обеспечивающее компромисс между устойчивостью численного метода и точностью физического моделирования.

На границах (6), (7), (9) и (10) задается условие свободного истечения теплового потока

$$-\vec{n} \cdot \vec{q} = 0. \quad (10)$$

Движение газа в областях (1) и (2) описывается на основе уравнений Навье–Стокса и неразрывности

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} &= \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] + \vec{F}, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

При реализации алгоритма используется модель существенно дозвукового сжимаемого течения, с макси-

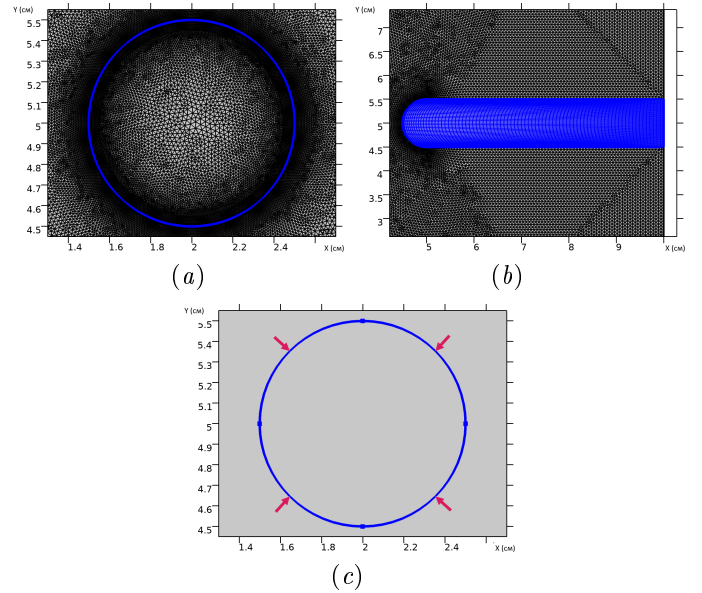


Рисунок 5. Расчетная сетка: (a) — сетка вокруг области фазового перехода, (b) — область сопряжения структурированной и неструктурированной сеток, (c) — направление деформации расчетной области.

мально допустимым числом Маха $M < 0.3$. По своим реологическим свойствам, сплошная среда предполагается ньютоновской, что определяет форму тензора вязких напряжений:

$$\mathbf{K} = \eta (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) \mathbf{I}, \quad (12)$$

где \mathbf{I} — единичный тензор (матрица), η — динамическая вязкость. Для данного модуля задаются следующие граничные условия: 1, 2, 4, 5, 12, 13 — условия прилипания, на границе 3 задается условие массового расхода

$$-\int_{\partial \Omega} \rho \cdot d_z dS = \dot{m}. \quad (13)$$

В качестве условия массового расхода задается нормальный массовый расход, зависящий от времени

$$\dot{m} = 0.01(1 - \exp(-t)). \quad (14)$$

На границах 6, 7, 9, 10 задается условие свободного истечения с подавлением обратного тока:

$$[-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] \vec{n} = -\hat{p}_0 \vec{n}, \quad \hat{p}_0 \leq p_0. \quad (15)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ИЗМЕНЕНИЯ ГЕОМЕТРИИ ОБТЕКАЕМОГО ОБРАЗЦА ВЫСОКОЭНТАЛЬПИЙНОЙ СТРУЕЙ ГАЗА

Вид расчетной сетки для области с подвижной геометрией, а также участок сопряжения треугольной (неструктурированной) и четырехугольной (неструктурированной) сетки показан на рисунке 5.

Время моделирования процесса составило $t = 10$ с, шаг выдачи результатов $\Delta t = 0.2$ с. Начальный шаг по времени $\tau = 0.00001$ с.

К результатам расчета относятся пространственные распределения температуры, скорости, теплового потока, процесс деформации расчетной сетки.

В областях 1, 2, 3 генерируется сетка из ячеек треугольной формы, в области 4 — четырехугольной. Общий вид построенной сетки представлен на рисунках 5(a) и 5(b). В общем, минимальное качество элемента сетки составляет 1.743×10^{-5} , среднее качество сетки — 0.9601, количество треугольных ячеек — 104212, количество четырехугольных ячеек — 4000, количество граничных элементов — 1418, количество элементов вершин — 16. Свойства треугольной сетки в областях 1, 2, 3: максимальный размер элемента — 0.067, минимальный размер — $2.0 \cdot 10^{-4}$, множитель кривизны — 0.2, максимальная скорость увеличения размера элемента по сравнению с соседними — 1.05. Количество элементов образующих скругленный участок границы — 13–50. Количество элементов, образующих входную границу — 3–100. Количество элементов, образующих подвижную границу — 12–400. Особенности деформации геометрии (рисунок 5(c)): в областях 1, 2, 3 задается деформируемая расчетная сетка, такая, что положение точек расчетной сетки и форма образуемых ею треугольников меняется при плавлении области 3. В области 4 расчетная сетка задается неизменной; на всех границах, кроме 11, 12 задается нулевое нормальное смещение точек расчетной сетки.

Особенностью ГУ на входе затопленной струи является то, что в ней происходит плавное увеличение массового расхода газа и температуры (то есть теплового потока) до своих асимптотических значений, что позволяет ускорить вычисления. Формирование течения во входном канале заметно при $t = 0.1$ с (рисунок 6). При $t = 0.3$ с происходит разбиение струи на верхнюю и нижнюю ветви с образованием вихрей в соответствующих полуплоскостях. Процесс взаимодействия деформируемой геометрии становится стационарным при $t = 0.9$. Начиная от времени $t = 1.2$ разрушающийся образец теряет округлую форму. По мере уменьшения размеров образца его след в потоке также уменьшается, что приводит к разрушению и его подветренной части. Общее время разрушения составляет около 0.5 с.

Зависимость формы образца от времени наглядно представлена на рисунке 7. На поздних временах разрушаемое твердое тело принимает форму толстой линзы. Заметим, что столь быстрое разрушение происходит при относительно небольших скоростях газа, в ядре потока они не превышают 5 м/с (см. рисунок 8).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение оценим безразмерные параметры, характеризующие скоростные и тепловые режимы течения. В частности, число Рейнольдса $Re = \dot{m}/\mu d_z \approx 660$, Прандтля $Pr = \eta C_p/k \approx 0.75$, Пекле $Pe = RePr \approx 495$. Откуда следует, что реализующийся в течении режим является существенно ламинарным, с преимущественно конвективным переносом теплоты. Выполненное моделирование взаимодействия высокоэнтальпийного течения с материалом образца имеет ряд достоинств:

- реализован успешный расчет сопряженного теплообмена на поверхности раздела “газ — твердое тело”;
- выполнен учет зависимости теплофизических свойств подвижной среды от температуры;

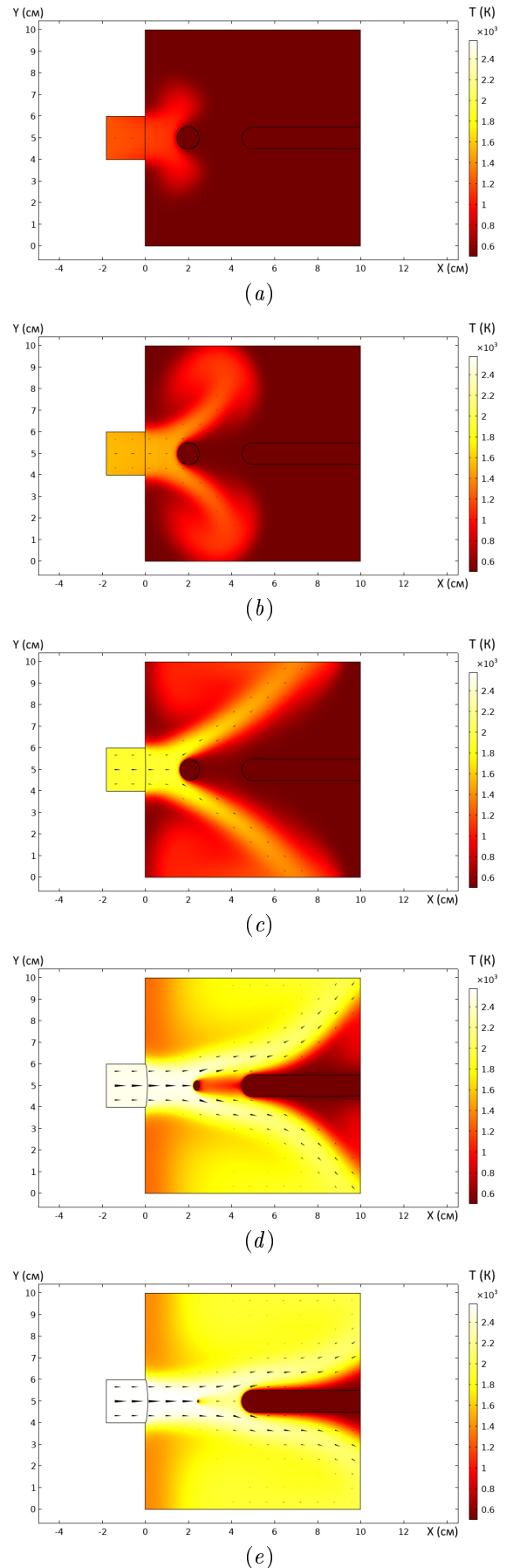
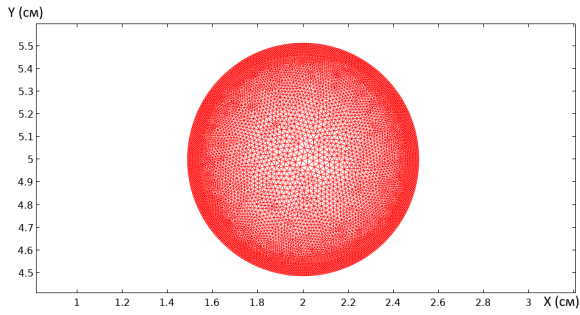
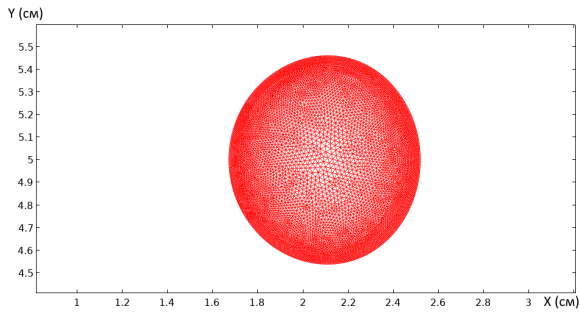


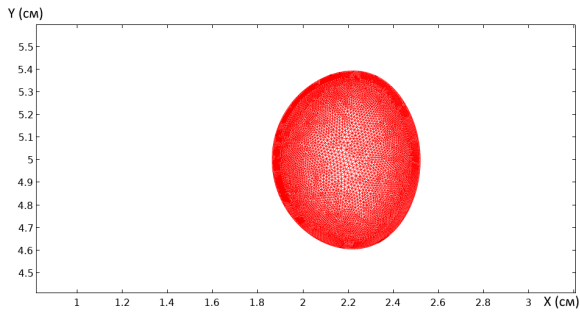
Рисунок 6. Распределение температуры в различные моменты времени, полученное в расчете: (a) — 0.3 с, (b) — 0.5 с, (c) — 0.8 с, (d) — 1.6 с, (e) — 1.7284 с.



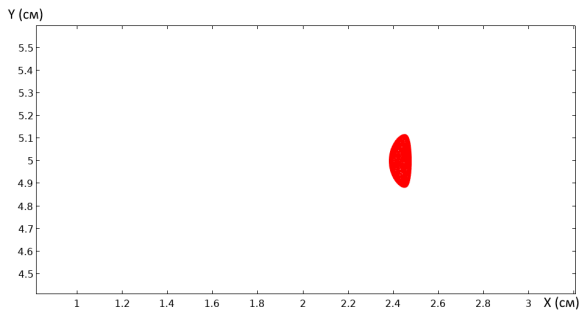
(a)



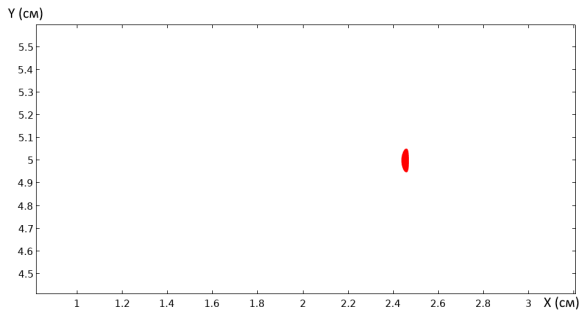
(b)



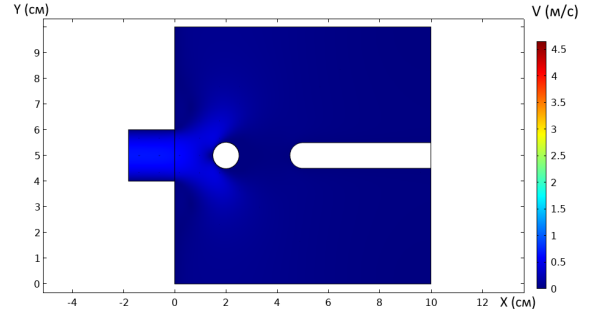
(c)



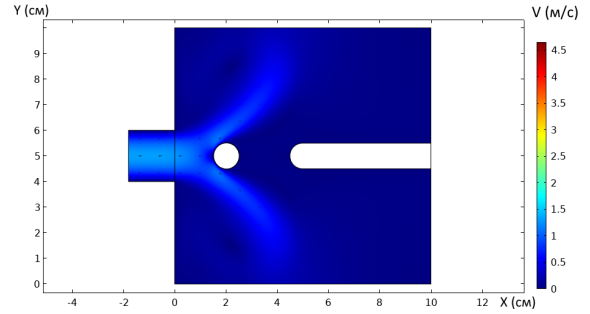
(d)



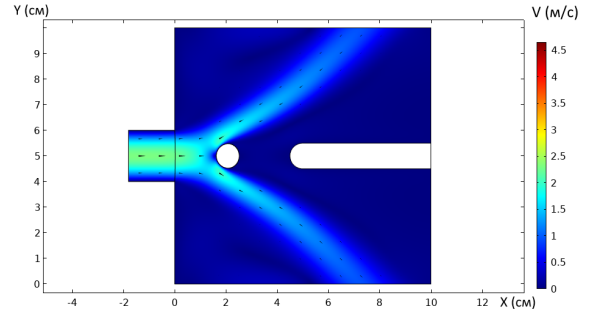
(e)



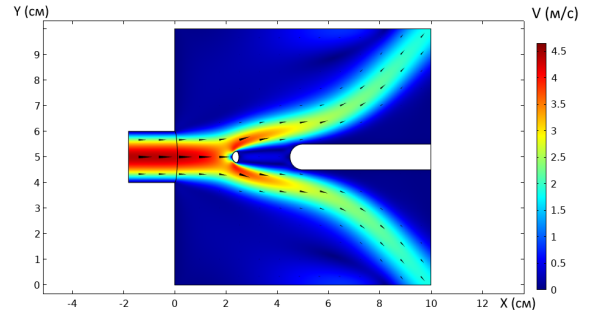
(a)



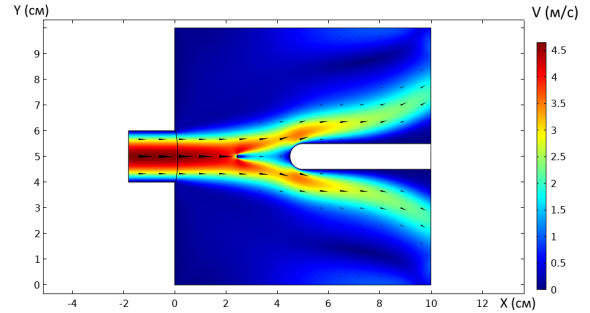
(b)



(c)



(d)



(e)

Рисунок 7. Форма области, испытывающей фазовый переход и распределение подвижной сетки в ней, результаты расчета: (a) — 0.3 с, (b) — 0.9 с, (c) — 1.2 с, (d) — 1.16985 с, (e) — 1.7284 с.

Рисунок 8. Распределение скорости в различные моменты времени, полученное в расчете: (a) — 0.3 с, (b) — 0.5 с, (c) — 0.8 с, (d) — 1.6 с, (e) — 1.7284 с.

- показана устойчивая работа граничного условия фазового перехода для определения движения межфазной границы;
- успешно использован механизм деформируемой сетки для смещения узлов методом деформации, а также полное перестроение сетки при ухудшении качества ее элементов;
- достигнута устойчивость расчета при достижении больших температурных градиентов (до 10^7 К/м).

БЛАГОДАРНОСТИ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дегтярь В Г и Сон Э Е 2018 *Гиперзвуковые летательные аппараты* (М.: Янус-К)
2. Коротеев А С, Миронов В М и Свирчук Ю С 1993 *Плазмотроны. Конструкции, характеристики, расчёт* (М.: Машиностроение)
3. Тирский ГА, Сахаров ВИ, Ковалев ВЛ, Власов ВИ, Боровой ВЯ, Егоров ИВ, Белошицкий АВ, Горский ВВ, Брыкина ИГ, Афолина НЕ, Громов ВГ, Кириутин БА, Лунев ВВ, Скуратов АС, Алексинз ВА, Рогов БВ, Дядькин АА и Журиин С В 2011 *Гиперзвуковая аэродинамика и теплообмен современных космических аппаратов и зондов* (М: Физматлит)
4. Yusupov D I, Kulikov Y M, Gadzhiev M K, Tyuftyaev A S and Son E E 2016 *J. Phys.: Conf. Ser.* **774** 012185
5. Чиннов В Ф *Экспериментальное исследование термической и неравновесной плазмы инертных и молекулярных газов: диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук — ОИВТ РАН, Москва, 2002*
6. Михатулин Д С, Полежаев Ю В и Ревизников Д Л 2011 *Теплообмен, термомеханическое и термозрзозное разрушение тепловой защиты* (М.: Янус-К)
7. Agrawal P, Jenniskens P M, Stern E, Arnold J and Chen Y K 2018 *2018 Aerodynamic Measurement Technology and Ground Testing Conference*
8. Ahn H K, Park C and Sawada K 1998 *36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*
9. Donegan B E, Greendyke R, Ravichandran R, Lewis S, Morgan R, McIntyre T and Apostolov Z 2018 *22nd AIAA International Space Planes and Hypersonics Systems and Technologies Conference*
10. Joatton R 1970 *5th Thermophysics Conference*
11. Li W, Huang H and Xu X 2017 *Int J Heat Mass Tran* **109** 725–736
12. Milos F S, Chen Y K and Gokcen T 2012 *J Spacecraft Rockets* **49** 894–904
13. Mullenix N and Povitsky A 2016 *J Spacecraft Rockets* **53** 912–929
14. Reynolds R, Russelland G and Nourse R 1992 *28th Joint Propulsion Conference and Exhibit*
15. Stock H W 1975 *AIAA J.* **13** 1217–1223
16. Yuming X, Honggoing H and Timin C A I 1991 *27th Joint Propulsion Conference*
17. Alba C R, Greendyke R B, Lewis S W, Morgan R G and McIntyre T J 2016 *J Spacecraft Rockets* **53** 84–97
18. Candler G V, Johnson H B, Nompelis I, Gidzak V M, Subbareddy P K and Barnhardt M 2015 *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*
19. Candler G 2012 *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*
20. Chen S and Boyd I D 2017 *47th AIAA Thermophysics Conference*
21. Chen Y K and Milos F S 2018 *J Spacecraft Rockets* **55** 914–927
22. Shih-Yuan C and Allen S J 1962 *ARS Journal* **32** 1536–1543
23. Chen Y K, Milos F and Gokcen T 2010 *10th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*
24. Cooper J M, Schroeder O M, Weng H and Martin A 2018 *2018 Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*
25. DiCristina V 1971 *AIAA 6th Thermophysics Conference*
26. Richards B E and DiCristina V 1977 *AIAA 12th Thermophysics Conference*
27. Doman D and Blake W 2006 *AIAA Atmospheric Flight Mechanics Conference and Exhibit*
28. Fang Y, Liou W W and Xu S 2004 *J Spacecraft Rockets* **41** 893–895
29. Fei Z, Lanhai S and Rong Z 2020 *J Spacecraft Rockets* **57** 202–205
30. Gupta R N 1983 *J Spacecraft Rockets* **20** 531–538
31. Henneaux D, Schrooyen P, Dias B, Turchi A, Chatelain P and Magin T 2019 *AIAA Aviation 2019 Forum*
32. Hurwicz H, Fifer S and Kelly M 1964 *J Spacecraft Rockets* **1** 235–242
33. Inger G 1972 *10th Aerospace Sciences Meeting*
34. Intrieri P and Kirk D 1968 *3rd Aerodynamics Testing Conference*
35. Johnston C O, Gnoffo P A and Sutton K 2009 *J Spacecraft Rockets* **46** 481–491
36. Hetcher L 1966 *3rd and 4th Aerospace Sciences Meeting*
37. Menees G and Lombard C 1981 *16th Thermophysics Conference*
38. Meng S, Zhou Y, Xie W, Yi F and Du S 2016 *J Spacecraft Rockets* **53** 930–935
39. Murray A L and Russell G W 2002 *J Spacecraft Rockets* **39** 501–508
40. Onay O K and Eyi S 2020 *J. Thermophys. Heat Transfer* **34** 78–89
41. Popper L and Sutton G 1970 *8th Aerospace Sciences Meeting*
42. Schrooyen P, Hillewaert K, Magin T E and Chatelain P 2016 *Int J Heat Mass Tran* **103** 108–124
43. Scoggins J B, Soucasse L, Riviere P, Soufiani A and Magin T 2015 *45th AIAA Thermophysics Conference*
44. Silton S and Goldstein D 2000 *38th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*
45. Silton S and Goldstein D 1998 *36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*
46. Анфимов Н А и Шари В П 1968 *МЖГ* 18–25
47. Коньков А А, Нейланд В Я, Николаев В М и Пластинин Ю А 1969 *ТВТ* 140–165
48. Лебедев В И и Фомин В Н 1969 *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* **3** 655–663
49. Стулов В П и Шапиро Е Г 1969 *МЖГ* 75–83
50. Румынский А Н и Чуркин В П 1974 *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* **6** 1553–1570
51. Карасев А Б и Кондранин Т В 1971 *МЖГ* 21–30
52. Суржииков СТ 2016 *ЖТФ* **86** 31–40
53. Суржииков СТ 2016 *ТВТ* **54** 249–266
54. Железнякова А Л и Суржииков С Т 2014 *ТВТ* **52** 283–293
55. Суржииков С Т и Шувалов М П 2013 *ТВТ* **51** 456–470
56. Arai N, Tani T and Sato K 1983 *21st Aerospace Sciences Meeting*
57. Hull L, French N and Chrusciel G 1981 *7th Atmospheric Flight Mechanics Conference*
58. Platus D H 1985 *Journal of Guidance, Control, and Dynamics* **8** 280–282
59. Noh S and Kim K H 2019 *J. Thermophys. Heat Transfer*

- 33** 1096–1111
60. Noh S and Kim K H 2016 *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*
 61. Comfort E 1970 *8th Aerospace Sciences Meeting*
 62. Imamura O, Okunuki T and Suzuki K 2010 *10th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*
 63. Liu Z M and Li J C 1988 *23rd Thermophysics, Plasmadynamics and Lasers Conference*
 64. Marshall B W 1966 *AIAA J.* **4** 1899–1905
 65. Mungiguerra S, Martino G D D, Cecere A, Savino R, Zoli L, Silvestroni L and Sciti D 2020 *Int J Heat Mass Tran* **156** 119910
 66. Baker R 1975 *10th Thermophysics Conference*
 67. Knight D and Quinn J 1971 *6th Thermophysics Conference*
 68. Maahs H G and Schryer D R 1969 *AIAA J.* **7** 2178–2179
 69. Priyadarshini M S, Jaffe R L and Munafo A 2018 *2018 Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*
 70. 1964 *Графит как высокотемпературный материал. Под ред. К.П. Власова* (М.: "Мир")
 71. Головина Е С и Котова Л Л 1972 *ТВТ* **10** 368–380
 72. Анфимов Н А и Полежаев Ю В 1966 *В кн.: Тепло- и массоперенос. Минск, «Наука и техника»* **2** 11–16
 73. Анфимов Н А 1964 *Известия АН СССР, ОН, Механика и машиностроение* **3-11**
 74. Зевелевич Ф С 1966 *МЖГ* 161–167
 75. Vanerji N, Leyland P and Morgan R G 2016 *46th AIAA Thermophysics Conference*
 76. Fujita K, Yamada T and Ishii N 2006 *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*
 77. Izawa Y and Sawada K 2000 *38th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*
 78. McMasters R L, Fricke R, Larus G, Malone M and Hutwelker M 2021 *J. Thermophys. Heat Transfer* **35** 512–517
 79. Miller R A, Tang C Y, McGlaughlin M S, White T R, Ho T S, MacDonald M E and Cruden B A 2018 *2018 Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*
 80. Суржииков С Т 2011 *ТВТ* **49** 92–107
 81. Erb A J, West T K and Johnston C O 2020 *J Spacecraft Rockets* **57** 692–706
 82. Matsuyama S, Ohnishi N, Sasoh A and Sawada K 2003 *36th AIAA Thermophysics Conference*
 83. Milos F S, Chen Y K, Squire T H and Brewer R A 1999 *J Spacecraft Rockets* **36** 298–306
 84. Milos F S 1997 *J Spacecraft Rockets* **34** 705–713
 85. Moss J, Anderson E and Charles W Boltz 1975 *10th Thermophysics Conference*
 86. Liu C H and Howe J 1976 *11th Thermophysics Conference*
 87. Beerman A, Lewis M, Starkey R and Cybyk B 2008 *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*
 88. Cawthon D 1965 *Aerothermochemistry of Turbulent Flows Conference*
 89. Kumar R 2016 *J Spacecraft Rockets* **53** 538–548
 90. Lachaud J, Aspa Y and Vignoles G 2017 *Int J Heat Mass Tran* **115** 1150–1165
 91. Milos F S and Chen Y K 2013 *J Spacecraft Rockets* **50** 245–255
 92. Анфимов Н А 1962 *Известия АН СССР, ОН, Механика и машиностроение* 25–31
 93. Авдудевский В С и В Н Калашник 1967 *Известия АН СССР, Энергетика и транспорт* 9–24
 94. Мугалев В П 1965 *Известия АН СССР, Механика* 175–180
 95. Анфимов Н А и Альтов В В 1965 *ТВТ* 409–420
 96. Bethe H A and Adams M C 1959 *J. Aerosp. Sci.* **26** 321–328
 97. Chen Y K, Stern E C and Agrawal P 2019 *J Spacecraft Rockets* **56** 865–874
 98. Полежаев Ю В 1964 *Доклады АН СССР* **156** 290–293
 99. Полежаев Ю В 1964 *ТВТ* **2** 32–39
 100. Мень А Н и Сергеев О А 1972 *Доклады АН СССР* 1272–1274
 101. Полежаев Ю В 1964 *Известия АН СССР, ОН, Механика и машиностроение* 3–8
 102. Полежаев Ю В 1965 *ТВТ* 731–739
 103. Горский В В и Полежаев Ю В 1972 *МЖГ*
 104. Combs C, Clemens N T and Danehy P M 2014 *52nd Aerospace Sciences Meeting*
 105. Combs C S, Clemens N T, Danehy P M and Murman S M 2017 *J Spacecraft Rockets* **54** 476–494
 106. Combs C and Clemens N T 2015 *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*
 107. Тирский Г А 1964 *Космические исследования* **2** 570–594
 108. Biolsi L 1980 *AIAA J.* **18** 596–597
 109. Biolsi 1981 *16th Thermophysics Conference*
 110. Biot M A and Daughaday H 1962 *J. Aerosp. Sci.* **29** 227–229
 111. Gnoffo P, Johnston C and Thompson R 2009 *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*
 112. Buxton O, Lochman B, Sharma M and Clemens N 2012 *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*
 113. Davy W C, Craig R A, Chapman G T and Compton D L 1964 *AIAA J.* **2** 1583–1589
 114. Laux C, Winter M, Merrifield J, Smith A and Tran P 2009 *41st AIAA Thermophysics Conference*
 115. Moss J N, Simmonds A L and Anderson E C 1980 *J Spacecraft Rockets* **17** 177–183
 116. Park C 2014 *J. Thermophys. Heat Transfer* **28** 598–607
 117. Prasad A and Sinha S 1976 *AIAA J.* **14** 1494–1497
 118. Wilson R G and Spitzer C R 1969 *AIAA J.* **7** 2140–2142
 119. Chen Y K and Milos F 2004 *37th AIAA Thermophysics Conference*
 120. Utyuzhnikov S V, Konyukhov A V, Rudenko D V, Vasil'evskii S A, Kolesnikov A F and Chazot O 2004 *AIAA J.* **42** 1871–1877
 121. Кирюгин Б А и Тирский Г А 1996 *МЖГ* 159–168
 122. Рознер Д Е 1964 *Ракетная техника и космонавтика*
 123. Cross P G and Boyd I D 2019 *J Spacecraft Rockets* **56** 1593–1610
 124. Cross P G and Boyd I D 2018 *2018 Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*
 125. Cross P G 2020 *J. Thermophys. Heat Transfer* **34** 381–392
 126. Cross P G and Boyd I D 2017 *47th AIAA Thermophysics Conference*
 127. Cross P G and Boyd I D 2016 *46th AIAA Thermophysics Conference*
 128. Shimada T, Sekiguchi M and Sekino N 2006 *36th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit*
 129. Wei X, He G, Li J, Liu P and Wang W 2008 *44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference Exhibit*
 130. Smith T E R and Keidar M 2015 *J Spacecraft Rockets* **52** 1003–1008
 131. Grabow R and White C 1974 *7th Fluid and Plasma Dynamics Conference*
 132. Lecoanet A, Payot F, Journeau C, Rimbert N and Gradeck M 2021 *Int J Heat Mass Tran* **181** 121883
 133. Тирский Г А 2000 *Энциклопедия по низкотемпературной плазме. Под ред. В. Е. Фортова. — М.: Наука. МАИК. Наука/Интерпериодика. Т. 1* **1** 523–36
 134. Смехов Г Д и Лосев С А 1979 *Теор. и эксперимент. химия* **15** 492–497
 135. Ковалев В Л и Суслов О Н 1988 *МЖГ* 115–121
 136. Дорошенко В М, Кудрявцев Н К и Сметанин В В 1990

- ТВТ* 952–959
137. Беркут В Д, Кудрявцев Н Н и Новиков С С 1987 *ТВТ* 340–348
138. Васильевский С А и Тирский Г А 1991 *Современные газодинамические и физико-химич. модели гиперзвуковой аэродинамики и теплообмена.* — М.: Изд-во МГУ 195–230
139. Uribe F J, Mason E A and Kestin J 1990 *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **19** 1123–1136
140. McBride B, Gordon S and Reno M 1993 *Thermodynamic Data for Fifty Reference Elements* (NASA Technical Paper 3287)
141. Cole W A and Wakeham W A 1985 *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **14** 209–226

Формирование цилиндрической полости под действием узкого пучка жесткого рентгеновского лазера

В. А. Хохлов^{1,2} и Н. А. Иногамов^{1,2,3}

¹ Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, ул. Косыгина, 2, Москва 119334, Россия

² Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

³ Федеральное государственное унитарное предприятие Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Сущевская ул., 22, Москва 127055, Россия

E-mail: nailinogamov@gmail.com

Статья поступила в редакцию 4 декабря 2022 г.

Аннотация. Рассматривается действие рентгеновского лазера на фторид лития (LiF). Лазерный импульс имеет фемтосекундную длительность (десятки фс). Импульс формируется лазерной системой на свободных электронах. Энергия фотонов 10 кэВ. Глубина ослабления D_{att} интенсивности в LiF для этой энергии фотонов равна 655 мкм. Диаметр лазерного пучка d_0 на границе мишени около 1 мкм. Расходимость пучка мала. Поэтому на длине D_{att} диаметр пучка лишь немного увеличивается по сравнению с входным диаметром d_0 . В работе проанализировано внутреннее течение в мишени, инициированное поглощением по длине пучка далеко от поверхности. Задача анализируется в приближении цилиндрической симметрии — искомые величины зависят от радиуса r и времени t . Это допустимо, поскольку, во-первых, пучок узкий ($d_0 \ll D_{att}$), и, во-вторых, рассматривается течение далеко от поверхности мишени. Плотность поглощенной энергии примерно 100 эВ/атом или 0.941 МДж/см³, давление и температура в нагретом веществе на момент окончания лазерного импульса составляют 10 Мбар и 550 кК. В расчетах вместо уравнения состояния (УРС) LiF используется УРС алюминия. Дело в том, что, с одной стороны, для алюминия имеется хорошо разработанное широкодиапазонное многокомпонентное уравнение состояния. С другой стороны, механические характеристики этих материалов (объемный модуль, плотность) примерно одинаковы. Температуры плавления близки: 934/1118 К для Al/LiF — разница менее 20%. <https://doi.org/10.33849/2022207>

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что фемтосекундные лазерные системы оптического и ближнего ИК и УФ диапазонов имеют огромное количество самых разнообразных приложений. Новые перспективы связаны с применением фемтосекундных лазеров, оперирующих в диапазоне длин волн, соответствующих жесткому рентгену — длина волны порядка одного Ангстрема. Например, в фотолитографии такие системы позволят подойти к пределу пространственного разрешения порядка одного нанометра. В соответствии с этими и другими многообещающими перспективами огромные средства расходуются на создание когерентных источников жесткого и мягкого рентгеновского излучения с характерной длительностью импульса в десятки фемтосекунд (см., например, ссылки и описания на сайтах [1–5]).

Уже сейчас с помощью фокусировки жесткого рентгеновского пучка создаются пятна облучения диаметром порядка 50 нм. Представим вкратце сегодняшнюю ситуацию в области микро- и нанофокусировки. Формирование пятна с размерами 30×55 нм² было продемонстрировано в работе [6]. При этом энергия фотонов была 9.9 кэВ, длительность импульса $\tau_L \sim 7$ фс, а интенсивность достигла огромной величины $I_{max} = 10^{20}$ Вт/см².

Соответствующая оценка плотности энергии на единицу объема имеет вид: $e = I_{max}\tau_L/D_{att}$. Из приведенных выше параметров в случае LiF получаем $e = 1.5 \times 10^{13}$ Дж/м³ или $e = 15$ ТПа. В других единицах это значение e равно 15 МДж/см³. При такой

плотности энергии приходим к оценке давления порядка 150 Мбар, поскольку $p = Ge$ и параметр Грюнайзена G — это безразмерная величина порядка единицы. В наших расчетах, приведенных ниже, начальное давление составляет 10 Мбар. Эти условия относятся к экспериментам [7, 8].

Пятно с размерами порядка 60×110 нм² и большим флюенсом 3×10^5 Дж/см² сформировано с помощью многослойных зеркал как в работе [9]. Данная работа выполнена на лазере на свободных электронах (XFEL — X-ray Free Electron Laser) с энергией фотонов 4 кэВ. В работе [10] на пучке XFEL (фотон 12 кэВ) применялось зеркало Киркпатрика–Баеза; при этом интенсивность составляла 10^{20} Вт/см², а пятно имело конфигурацию 210×120 нм². В статье [11] описана фокусировка в пятно с размерами порядка 220 нм. Фокусировка осуществлялась с помощью рефракционной оптики (Ве-линзы) на EuXFEL (European X-Ray Free-Electron Laser — Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах); длительность импульса меньше 50 фс, частота повторения до 4.5 МГц [11].

Фокусировка жесткого рентгена XFEL в пятно с размерами до 320 нм была достигнута в работе [12]. Применялись зонные пластинки Френеля на алмазной основе [12]; интенсивность составляла 4×10^{17} Вт/см², длительность импульса 70 фс. Наблюдались вспучивания пленки золота в виде микрокуполов [12]. Физика появления таких микрокуполов выяснена в работах [13–15].

Микроструктурирование на поверхности мишени с помощью остророфокусированного вихревого пучка жесткого рентгена было выполнено в работе [16].

Фотолитографические машины на мягком рентгене (оловянная лампочка, 13.5 нм) уже производятся серийно (см. сайт компании ASML [17]). Серийному производству предшествовали десятилетия интенсивных научных исследований.

В связи с перечисленными приложениями в настоящей работе рассмотрено воздействие почти цилиндрического (расхождение пучка мало) жесткого рентгеновского пучка. При хорошей фокусировке угол расхождения пучка между осью и образующей конуса составляет 200 мкрад. Тогда на длине 500 мкм увеличение радиуса цилиндра равно 0.1 мкм = 100 нм. Конкретной мотивацией для предлагаемого исследования послужили эксперименты, выполненные на установках EuXFEL [11] и SACLA (SPring-8 Angstrom Compact free electron LAser) [7]. Опыты заключались в характеристизации качества систем фокусировок (с размером пучка порядка нескольких сотен нм) для фотонов энергии 9 и 10 кэВ на данных установках. В качестве мишени использовался кристалл лития фтора (LiF).

Пробег фотонов с энергией порядка 10 кэВ в LiF велик — длина затухания D_{att} примерно половина миллиметра [18]; см. сайт [19]. Таким образом приходим к ситуации по геометрии, обратной к той, которой стандартно ограничиваются при исследованиях взаимодействия оптического лазерного излучения с веществом. В оптическом случае при взаимодействии с металлами глубина прогрева d_T порядка толщины скин-слоя d_{skin} (т.е. 10–20 нм) или несколько таких толщин (до порядка 0.1 мкм), в зависимости от металла. В хорошо проводящих тепло металлах (золото, серебро) толщина $d_T \sim 0.1$ мкм. В металлах с низкими значениями коэффициента теплопроводности (титан, цирконий) имеем $d_T \sim d_{\text{skin}}$.

Поэтому при ультракоротком оптическом облучении геометрия термомеханической задачи плоская или квазиплоская, поскольку

$$R_L \gg d_T. \quad (1)$$

Здесь R_L — это радиус пятна нагрева на поверхности мишени. Понятно, что в сторону малых радиусов величина R_L ограничена дифракционным пределом — длиной волны оптического излучения порядка микрона. Поэтому отношение R_L/d_T не может быть меньше значения порядка 10. Только недавно стали изучаться трехмерные эффекты, связанные с расширением зоны движения на дистанции, превышающие радиус R_L [20].

В случае жесткого рентгена, малой расходимости пучка и большой длины затухания область нагрева имеет вид длинного тонкого цилиндра

$$R_L \ll D_{\text{att}} \quad (2)$$

вместо тонкого широкого диска (1). При этом отношение R_L/D_{att} снижается до значений порядка нескольких тысячных. Пожалуй, первый пример такого рода с длинной цилиндрической полостью был описан в статье [21]. Опыты проведены на XFEL SACLA. Использовалась мишень из кремния.

Понятно, что смена геометрии от диска (1) к цилиндру (2) принципиальным образом сказывается на характере течения.

В данной работе изучается такое течение на расстояниях z , далеких от поверхности: $z \gg R_L$. Тогда можно абстрагироваться от осесимметричного течения в области кратера и рассмотреть задачу в плоскости $z = \text{const}$. Осесимметричное течение у поверхности зависит от двух пространственных координат r_{cyl}, z и времени, здесь r_{cyl} — это расстояние до оптической оси пучка (цилиндрический радиус). Рассматривается облучение по нормали к поверхности мишени. Далеко от поверхности движение происходит в плоскости $z = \text{const}$. Тогда пространственная переменная одна — это цилиндрический радиус r_{cyl} ; далее для простоты будем обозначать радиус буквой r .

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Длительность применяемого в экспериментах импульса τ_L чрезвычайно мала (20 фс). Эта длительность намного меньше звукового масштаба времени $t_s = R_L/c_s$, где c_s — это скорость звука. В нашей постановке задачи диаметр $2R_L$ пучка составляет 400 нм. При рассматриваемой нами объемной плотности энергии примерно 1 МДж/см³ время термализации возбужденных электронов менее звукового масштаба времени t_s , а пробег возбужденных электронов мал по сравнению с диаметром пучка.

Подробное исследование кинетики каскада фотовозбужденных электронов по кинетической энергии выполнено в работах [22–25] с применением разработанного авторами (Н. Медведев и др.) кода XCASCADE(3D). В этих работах проанализировано фотовозбуждение электронов фотонами жесткого рентгена 10–20 кэВ. Приведенные выше оценки времен термализации и пробега электронов следуют из указанных исследований.

Поэтому в данной работе считаем, что произошла быстрая термализация, и в веществе LiF внутри цилиндрического пучка установилось равновесное термодинамическое состояние. Вместо LiF в нашей постановке рассматриваем алюминий, для которого разработано детальное термодинамическое описание с помощью широкодиапазонного многофазного уравнения состояния [26–29]; см. сайт [30]. По термомеханическим характеристикам алюминий близок к LiF.

После быстрого выделения энергии возникает горячий цилиндр высокого давления с нормальной плотностью внутри окружающего холодного вещества той же плотности. В статье рассматривается динамика расширения вещества цилиндра. Движение такого рода порождает мощную ударную волну и сложную игру волн разрежения, бегущих к оси цилиндра и отраженных от этой оси.

В расчетах применяется гидродинамический код, записанный по цилиндрической лагранжевой координате r^0 ; т.е. лагранжевы частицы представляют собой тонкие кольца с малой шириной $\Delta r^0 \ll r^0$ — разностная аппроксимация.

Система уравнений двухтемпературной ($T_e \neq T_i$) гидродинамики (см. [31, 32]), в случае цилиндрической симметрии имеет вид:

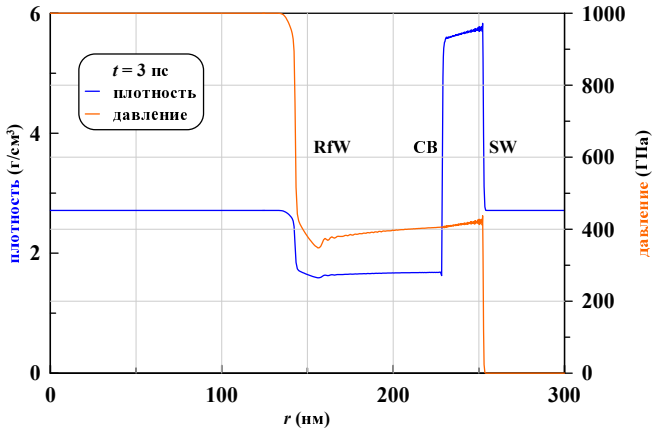


Рисунок 1. Профили плотности (синяя кривая) и давления (оранжевая кривая) в момент времени 3 пс. Распад разрыва, расширение высокоэнтропийного цилиндра (его граница СВ), излучение УВ (SW) и волны разрежения (RfW). Начальная координата края горячего цилиндра $R_L = 200$ нм.

$$\frac{\partial r(r^0, t)}{\partial t} = v(r^0, t), \quad (3)$$

$$\rho r \frac{\partial r(r^0, t)}{\partial r^0} = \rho_0 r^0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial v(r^0, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_0 r^0} \frac{\partial (r P)}{\partial r^0}, \quad P = P_e + P_i, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_e(r^0, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\rho_0 r^0} \frac{\partial}{\partial r^0} \left(\frac{\kappa \rho r}{\rho_0} \frac{\partial T_e}{\partial r^0} \right) \\ &\quad - \alpha_p (T_e - T_i) + \frac{Q(r^0, t)}{\rho} - \frac{P_e}{\rho_0 r^0} \frac{\partial (vr)}{\partial r^0}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\frac{\partial E_i(r^0, t)}{\partial t} = +\alpha_p (T_e - T_i) - \frac{P_i}{\rho_0 r^0} \frac{\partial (vr)}{\partial r^0}, \quad (7)$$

В начальный момент $t = 0$ лагранжева и эйлерова координаты совпадают ($r^0 = r$). В начальный момент вещество покоится. Плотность однородна и равна ρ_0 . Давление и температура внутри цилиндра $r^0 = r < R_L$ равны 10 Мбар и 550 кК. Нас будут интересовать времена, большие по сравнению с временем электрон-ионной релаксации, поэтому будем использовать однотемпературный ($(T_e = T_i)$) подход: соответственно уравнение (7) использоваться не будет, $P_e = 0, E_e = 0$.

Перейдем к изложению результатов численного моделирования.

3. РАСПАД РАЗРЫВА И СХОЖДЕНИЕ ВОЛНЫ РАЗРЕЖЕНИЯ К ЦЕНТРУ

В момент времени $t = 0$ стартует распад разрыва на радиусе $r = R_L$. В холодное вещество начинает распространяться ударная волна (далее УВ), а в сторону центра ($r = 0$) начинает свое движение волна разрежения. Контактная граница между веществом высокой энтропии и окружающим веществом движется от центра, находясь за УВ. Эта ситуация проиллюстрирована на рисунке 1. После распада разрыва давление на УВ составляет примерно половину (т.е. 5 Мбар) от начального давления в горячем цилиндре (10 Мбар). УВ обозначена буквами SW на рисунке 1. Образуется волна разрежения (RfW), бегущая к центру. На контакте СВ

(Contact Boundary) между высокоэнтропийным веществом и внешним веществом происходит резкое падение плотности. Внешнее (по отношению к веществу горячего цилиндра) вещество повышает свою энтропию, пройдя через мощную УВ.

На ранних стадиях, когда $t \ll t_s$, давление в промежулке между УВ и внешним краем волны разрежения является постоянным. В плоской геометрии это участок постоянного течения, иногда называемый пробкой. Скорость и давление на участке пробки однородны в пространстве и не меняются во времени. Имеется скачок плотности на контакте. В цилиндрической геометрии однородность пробки выполняется приближенно, пока $t \ll t_s$ и эффекты цилиндрической геометрии еще мало сказываются на течении.

В момент $t = 3$ пс, показанный на рисунке 1, геометрия цилиндра начинает влиять на течение. Амплитуда УВ снижается из-за расходимости — увеличения площади фронта УВ. С этим связано снижение давления за фронтом УВ на мгновенном профиле давления на рисунке 1. Передний (внутренний) фронт волны разрежения прошел примерно треть своего пути от $r = R_L = 200$ нм к центру $r = 0$. Участок волны разрежения (ВР) относительно небольшой по своей радиальной протяженности. Это обусловлено небольшой разницей в скоростях звука в точке (ρ_0, p_0) (внутренний фронт ВР) и в точке (ρ_2, p_2) (внешний фронт ВР), где $\rho_0 = 2.7$ г/см³ — плотность алюминия при нормальных условиях, $p_0 = 1$ ТПа — начальное давление в цилиндре сразу после прохождения по нему пучка жестких фотонов. Осцилляции за ВР и УВ носят численный характер. Это обстоятельство хорошо известно. Происхождение осцилляций связано с резким изменением параметров течения на узком (по пространственному шагу Δr^0) участке фронта. Осцилляции ослабляют, либо вводят искусственную вязкость (“размазывание” скачка), либо уменьшая шаг Δr^0 по цепочке лагранжевых узлов численной схемы.

Скорость звука в горячем веществе (ρ_0, p_0) составляет $c_{sh} = 19.7$ км/с. Эта скорость значительно превышает скорость звука $c_{s0} = 5.4$ км/с в алюминии при нормальных условиях. Скорость УВ в момент времени $t = 3$ пс, показанный на рисунке 1, равна 16.9 км/с. Соответственно число Маха УВ относительно скорости звука c_{s0} равно 3.1. При этом сжатие в УВ составляет 2.1. Скорость контактной границы при $t = 3$ пс равна 9.5 км/с.

4. ОТРАЖЕНИЕ ВОЛНЫ РАЗРЕЖЕНИЯ ОТ ЦЕНТРА

Волна разрежения сходится к центру (оси симметрии) $r = 0$, (см. рисунок 2). В момент времени $t_{refl} = 9.52$ пс первая характеристика RfW_{first} веера семейства характеристик достигает оси цилиндра. Сравнивая рисунки 1 и 2, видим, как постепенно происходит уширение волны разрежения (ВР). Первая характеристика RfW_{first} ВР бежит с постоянной скоростью c_{sh} (sh — sound hot) по неподвижному горячему веществу. Последующие характеристики веера все больше и больше отстают от первой характеристики, во-первых, из-за скорости $u > 0$ гидродинамического сноса в направлении от оси симметрии (ср. рисунок 1 с одной стороны, и рисунки 2, 3, с другой), и, во-вторых, из-за снижения

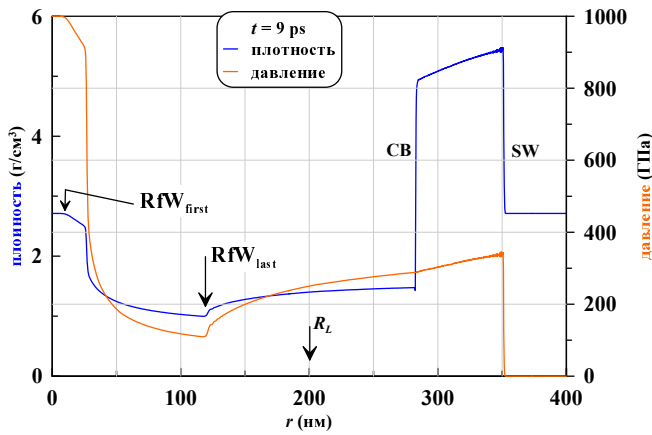


Рисунок 2. Профили плотности (синяя кривая) и давления (оранжевая кривая) в момент времени 9 пс. Стрелками RfW_{first} и RfW_{last} показаны края волны разрежения (ВР), распространяющейся в сторону оси $r = 0$. Передний фронт ВР RfW_{first} подошел вплотную к центру. Его координата равна 10.3 нм, т.е. 5% от начального радиуса цилиндра R_L . Этот фронт движется со скоростью звука $c_{sh} = 19.7$ км/с в горячем невозмущенном веществе. В момент 9.52 пс характеристика RfW_{first} достигает центра — начинается отражение характеристик ВР от центра.

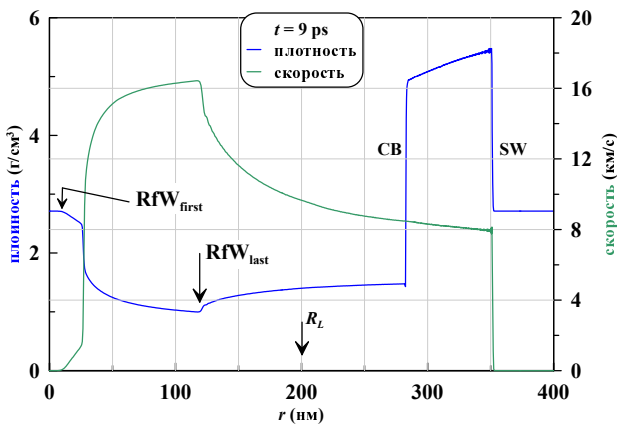


Рисунок 3. Профили плотности (синяя кривая) и радиальной скорости (зеленая кривая) в момент времени 9 пс. Стрелки перенесены с рисунка 2. Удивительно, гидродинамическая скорость на бегущей характеристике RfW_{last} растет со временем и в момент 9 пс составляет величину 16.4 км/с, превышающую скорость УВ 15.7 км/с в этот момент.

скорости звука $c_s(\rho)$ вследствие понижения плотности ρ горячего вещества в точке нахождения характеристики: $dr/dt = -c_s + u$. Понижение плотности обусловлено расширением.

В результате скорость распространения характеристики RfW_{last} меняет знак. Если на рисунке 1 эта характеристика движется в сторону оси, то на рисунках 2, 3 указанная характеристика движется в направлении от оси симметрии! Безусловно это связано с огромной разницей давлений в центре $r = 0$, до которого еще не дошел фронт волны разрежения, и в минимуме давления в точке RfW_{last} на рисунке 2 (оранжевая кривая). Именно эта разница давлений разгоняет горячее вещество в центральной области цилиндра R_L до высоких скоростей, которые существенно превышают скорость движения вещества за фронтом УВ (см. рисунок 3).

Если разница давлений между центром и внешним краем ВР RfW_{last} ускоряет высокоэнтропийное вещество наружу от оси, то разница давлений за фронтом УВ и в точке RfW_{last} , наоборот, тормозит вещество после толчка, вызванного прохождением через фронт УВ. За время распространения ВР к центру происходит сильное изменение этих разниц давления центр – RfW_{last} – УВ (ср. рисунки 1 и 2). А именно, давление в минимуме сильно понижается по сравнению как с давлением в центре, так и по сравнению с давлением за фронтом УВ.

Отражение волны разрежения от центра радикально сказывается на плотности и давлении в центре. В момент 10.41 пс, т.е. менее чем через 1 пс после момента отражения от центра $t_{refl} = 9.52$ пс, плотность в центре падает в 5 раз, а давление в центре уменьшается почти в 40 раз — до значения 26.5 ГПа по сравнению с начальным значением в 10 Мбар. При этом давление за фронтом УВ остается высоким $p_{SW}(t = 10.41 \text{ пс}) = 324$ ГПа.

Анализ показывает, что не происходит полного отражения волны разрежения от центра. То есть первая характеристика RfW_{first} достигает центра и происходит ее отражение. Прилегающая к первой характеристике RfW_{first} часть характеристик веера характеристик $RfW_{first}-RfW_{last}$ тоже достигает центра и отражается от него. Но остальные характеристики волны разрежения центра не достигают. Они распространяются в направлении от центра.

5. ФОРМИРОВАНИЕ СВЕРХЗВУКОВОГО ВЕТРА В ЦЕНТРАЛЬНОЙ ЧАСТИ ЦИЛИНДРА

На рисунках 4–6 сопоставляются моменты времени 11 и 15 пс. Как видим, температуры в высокоэнтропийном веществе, прошедшем облучение интенсивным жестким рентгеном, остаются высокими (см. рисунок 5). Это вещество располагается левее контакта СВ, на котором происходит резкое (скачок вниз) падение плотности. Хотя, конечно, значения температуры снизились по сравнению с начальным значением 550 кК из-за адиабатического расширения.

Наиболее сильное расширение и, соответственно, наибольшее снижение температуры происходит в области волны разрежения, т.е. левее точки RfW_{last} . Тогда как в области остатка от пробки это снижение умеренное. Пробка — это цилиндрическая область, которая располагается между радиусами RfW_{last} и СВ. На ранней стадии это была область почти однородного течения (см. рисунок 1 и раздел 3). На поздних стадиях происходит сильная трансформация этой области из-за расширения по цилиндрическому радиусу.

На рисунках 3 и 4 прослежена эволюция профиля скорости $u(r, t)$ на отрезке времен от 9 до 15 пс. Происходит постепенное увеличение крутизны профиля u в точке мгновенного нахождения концевой характеристики RfW_{last} (см. рисунки 2–4). Наконец происходит “опрокидывание” профиля (ср. профили скорости на моменты 11 и 15 пс на рисунке 4).

После опрокидывания складывается ситуация с ветром из центральной области, который сталкивается с внутренним краем вещества пробки. Это так, поскольку вещество центральной области имеет более высокую скорость расширения (см. рисунок 4). Но плот-

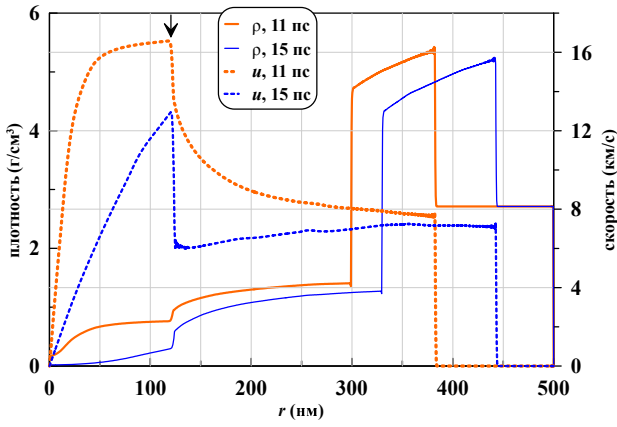


Рисунок 4. Сравнение плотностей и скоростей в моменты времени 11 и 15 пс.

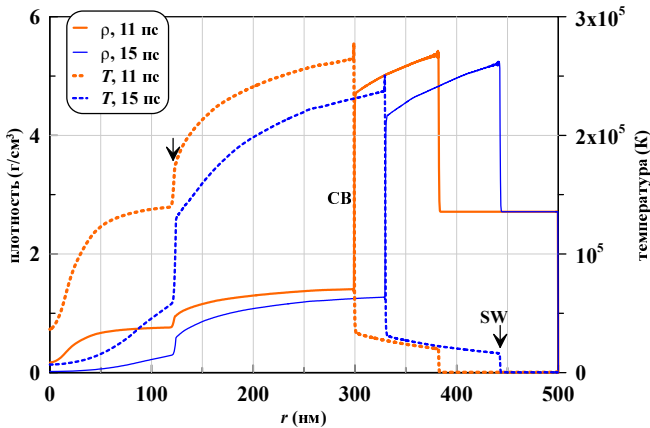


Рисунок 5. Сравнение плотностей и температур в моменты времени 11 и 15 пс.

ность вещества в центральной области мала. Поэтому существенного увеличения массы пробки за счет такого столкновения опережающего и отстающего ветров не происходит. Из-за столкновения и высаживания массы центральной области пропадает концевая характеристика RfW_{last} . Таким образом после опрокидывания (см. рисунок 4) течение высокоэнтропийного вещества разбивается на две области. Во внутренней области это

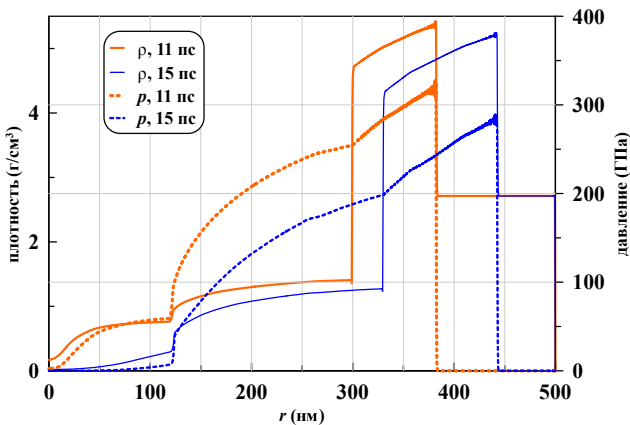


Рисунок 6. Сравнение плотностей и давлений в моменты времени 11 и 15 пс.

остаток волны разрежения, частично отраженной от центра, а во внешней области это трансформированная пробка, к веществу которой прибавляется вещество остатка волны разрежения.

Приведем оценки по температуре $\sqrt{\gamma k_B T/m}$ (рисунок 5) или по давлению $\sqrt{p/\rho}$ (рисунок 6) скорости звука во внутренней и внешней областях течения высокоэнтропийного вещества с $\gamma = 1.2-1.5$. Отметим, что для наших выводов достаточно приведенных приближенных формул. Расчет скорости звука по уравнению состояния требует дополнительного программирования. Для наших оценок числа Маха этого не требуется. Во внутренней (центральной) области получаем $c_s \approx 4.5-6$ км/с. Во внешней области из этих оценок следуют значения $c_s \approx 9-12$ км/с. Оценки выполнены на момент 15 пс по профилям, показанным на рисунках 5 и 6.

Возьмем скорости u с профиля скорости на рисунке 4 на момент времени 15 пс. Составляя отношения u/c_s , находим, что в центральной (внутренней) области поток существенно сверхзвуковой с числом Маха 2-3. Во внешней области высокоэнтропийного ядра поток околосвуковой с числом Маха $\approx 0.7-1$.

6. ПЛАВЛЕНИЕ В УДАРНОЙ ВОЛНЕ

Пучок жесткого рентгена (10 кэВ) в нашей постановке за времена, малые по сравнению с акустическим масштабом времени, поднимает давление до 10 Мбар. При распаде разрыва давление снижается примерно в два раза — до ≈ 5 Мбар (см. раздел 3). Далее давление снижается из-за расходимости потока в цилиндрической геометрии и соответствующего увеличения площади фронта ударной волны.

Известно [33], что ударные волны с амплитудой порядка 1 Мбар и выше плавят вещество [34, 35]. Поэтому за ударной волной на рисунках 5, 6 остается расплавленный алюминий. Температура за фронтом УВ в момент 15 пс на рисунке 5 равна 15.8 кК. Весь слой вещества правее контактной границы СВ и левее фронта УВ находится в сжатом и расплавленном состоянии на этих временах.

Примерно к 70-й пикосекунде давление за фронтом УВ снижается до давлений порядка 1 Мбар, и плавление в УВ прекращается. При этом слой расплава имеет толщину примерно 1.2 мкм. То есть радиальная толщина слоя расплава примерно в 6 раз превышает радиус рентгеновского пучка $R_L = 0.2$ мкм.

7. НАТЕКАНИЕ КРАЯ ПРОБКИ НА ЦЕНТР

Давление в центральной области быстро снижается. На момент времени $t = 20$ пс, показанный на рисунке 7, давление и плотность левее зоны соударения ветров С очень малы. Соответственно, притоком массы и импульса от высокоскоростного сверхзвукового ветра левее точки С можно пренебречь.

Разница давлений, действующая в веществе трансформированной пробки (промежуток между точками С и СВ), настолько значительна, что приводит к повороту вещества пробки от движения в сторону расширения к движению в сторону центра $r = 0$ (сравните профили скорости на моменты времени 15 и 20 пс на рисунках 4 и 7). Вещество пробки около края пробки С набирает

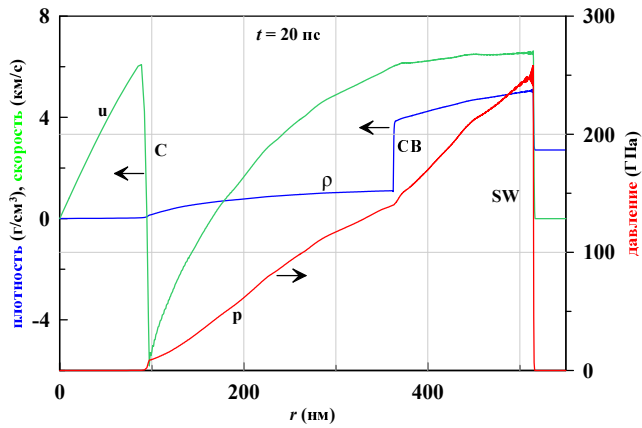


Рисунок 7. Профили плотности (синяя кривая), давления (красная кривая) и скорости (зеленая кривая) на момент времени 20 пс. Горизонтальные стрелки у кривых указывают, какая кривая к какой оси ординат относится. Перечислим порядок следования характерных участков слева направо от оси к периферии. Имеются 1) область соударения ветров С, 2) контакт СВ и 3) ударная волна SW. В центральной области (левее точки С) плотность и давление падают практически до нуля. Отметим смену знака скорости на краю трансформированной пробки, т.е. правее зоны соударения С. Теперь эта скорость направлена к центру симметрии.

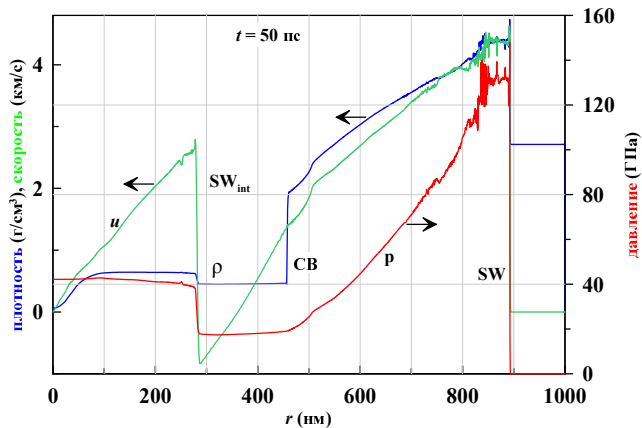


Рисунок 8. Те же профили и те же горизонтальные стрелки, что и на предыдущем рисунке 7, но теперь в момент 50 пс. Из центра идет ударная волна SW_{int}.

скорость натекания на центр примерно 5 км/с (см. рисунок 7). Причем эта скорость нарастает по абсолютной величине с течением времени.

Из-за натекания на центр $r = 0$ в момент времени примерно 24 пс происходит коллапс левого края трансформированной пробки в центре симметрии. В результате возникает внутренняя ударная волна SW_{int}, идущая от центра внутри пробки (см. рисунок 8). Любопытно, в момент 50 пс на рисунке 8 перед УВ SW_{int} (правее от фронта этой УВ) еще имеется участок вещества пробки, на котором скорость отрицательна, т.е. направлена в сторону центра.

В момент 67 пс УВ SW_{int} заканчивает прохождение вещества пробки и пересекается с контактом СВ. На контакте плотность скачком повышается. Это связано с тем, что мы переходим из вещества с высокой энтропией в вещество с низкой энтропией. Причем давление непрерывно при этом переходе. УВ, распространяющая-

ся из среды малой плотности в среду большой плотности, по достижении контакта сред порождает две УВ. Одна из них идет в плотную среду, а другая отражается и идет обратно к центру по среде малой плотности. На поздних временах в течении присутствуют следы множественных отражений от центра. Они разделены пространственными промежутками порядка микрона. С течением времени все эти следы становятся малозначительными деталями течения.

8. ПОЗДНИЕ СТАДИИ

Постепенно головная ударная волна и течение за ней приобретает вид треугольной УВ. В момент 0.4 нс головная УВ находится на радиусе 3.7 мкм и имеет амплитуду 21 ГПа. В момент 1 нс амплитуда и радиус этой УВ равны 10 ГПа и 7.45 мкм. При этом в момент 1 нс радиус полости, заполненной высокоэнтропийной средой, составляет 1.25 мкм. Эта полость при $t = 1$ нс окружена цилиндрической оболочкой жидкой фазы, располагающейся между цилиндрами с радиусами 1.25 и 1.9 мкм.

На временах порядка нескольких наносекунд необходимо начинать учитывать упругопластические свойства среды. Результаты, приведенные выше, относились к стадии, на которой можно пренебрегать упругостью и рассматривать задачу в пластическом приближении. На еще больших временах в анализ потребуется включить процесс охлаждения горячего канала за счет теплопроводности и процесс кристаллизации. Тогда можно будет сделать выводы о финальном радиусе сформированного полого канала.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье описано применение разработанного гидродинамического кода в цилиндрической геометрии в лагранжевой постановке для описания воздействия узкого пучка жесткого рентгена на мишень. Проанализирован случай высокой интенсивности пучка, когда в канале прохождения пучка происходит сильный нагрев вещества до энергий 100 эВ/атом. Нагрев очень быстрый (фемтосекундный лазерный импульс XFEL). Поэтому по окончании ультракороткого импульса вещество продолжает пребывать в состоянии с начальной твердотельной плотностью. Разгрузка происходит гораздо позже на акустических масштабах времени.

В нашей статье исследована сложная динамика формирования полости, наполненной высокоэнтропийным веществом. Энтропия облученного вещества чрезвычайно велика — она на три порядка превосходит критическую энтропию прочных материалов; критической здесь названа энтропия вещества в критической точке фазовой диаграммы. Движение, порожденное лазерным воздействием, продолжается долго — на временах на три–четыре порядка превосходящих акустический масштаб порядка 10 пс по начальному поперечному размеру канала нагрева.

Работа выполнена в тесной связи с экспериментами, которые проводились на XFEL установках EuXFEL [11] и SACLA [7]. Полученные сведения впервые раскрывают механизм формирования длинных цилиндрических полостей в кристаллическом кремнии, обнаруженных в 2013 г. в работе на XFEL SACLA [21]. Длина полости L в [21] почти на два порядка (!) превосходит ее радиус.

Длина L коррелирует с длиной затухания D_{att} жесткого рентгена (10 кэВ). В кремнии $D_{\text{att}} = 120$ нм. Длина L составляет 40 мкм — треть от длины D_{att} в кремнии.

Из наших результатов ясно, что отношение L/D_{att} увеличится, если поднять интенсивность пучка. Записывая закон затухания в виде

$$I(x) = I_0 \exp(-x/D_{\text{att}}),$$

в пороговом случае получаем $I_{\text{th}} = I_0 \exp(-L/D_{\text{att}})$. Отсюда находим, что пороговая длина растет по закону

$$L = D_{\text{att}} \ln(I_0/I_{\text{th}}); \quad (8)$$

формула действует при $I_0 > I_{\text{th}}$, в обратном случае полости нет. В приведенных выражениях x — координата вдоль оптической оси пучка, I_0 — интенсивность на поверхности мишени. При выводе формулы пренебрегаем расходимостью пучка.

Видим (8), что при небольших превышениях над порогом длина полости растет пропорционально интенсивности I_0 . При существенных превышениях порога $I_0 > I_{\text{th}}$ увеличение длины полости с интенсивностью сильно замедляется (слабый, логарифмический рост). Таким образом, если цель — получить максимально длинную полость, то нет смысла существенно превышать порог I_{th} образования полости из-за вдавливания вещества в стенки полости. Разумеется, интенсивность I_0 в формуле (8) можно заменить на флюенс $F = \int_{-\infty}^{\infty} I(t) dt$, поскольку длительность мала (ультракороткий импульс).

Отметим, что длина полости (8) пропорциональна длине D_{att} . Эта длина велика для легких атомов (см. [18] и сайт [19]). Кроме того, длина затухания является существенной функцией энергии фотона [18]. Эта функция имеет сильные скачки (оболочечные эффекты). Такое поведение можно использовать для подбора оптимальной энергии фотона $h\nu$; в лазерах на свободных электронах (XFEL) допустима вариация энергии $h\nu$.

Способы формирования длинных тонких полостей (проколов) безусловно найдут применение в технологиях будущего.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2021-1352).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. www.spring8.or.jp/en
2. www.desy.de

3. www.xfel.eu
4. www6.slac.stanford.edu
5. <http://nano.anl.gov/research/nanophotonics.html>
6. Mimura H *et al* 2014 *Nat Commun* **5** 3539
7. Pikuz T *et al* 2016 *Sci Rep* **5** 17713
8. Makarov S *et al* 2023 *Journal of Synchrotron Radiation* **30** 208–216
9. Yumoto H *et al* 2022 *Nat Commun* **13** 5300
10. Yumoto H, Inubushi Y, Osaka T, Inoue I, Koyama T, Tono K, Yabashi M and Ohashi H 2020 *Applied Sciences* **10** 2611
11. Zastrau U *et al* 2021 **28** 1393–1416
12. David C *et al* 2011 *Sci Rep* **1** 57
13. Inogamov N A and Zhakhovskii V V 2014 *JETP Letters* **100** 4–10
14. Inogamov N A, Zhakhovskii V V and Khokhlov V A 2015 *J. Exp. Theor. Phys.* **120** 15–48
15. Wang X W *et al* 2017 *Physical Review Applied* **8** 044016 – 1–17
16. Kohmura Y, Zhakhovsky V, Takei D, Suzuki Y, Takeuchi A, Inoue I, Inubushi Y, Inogamov N, Ishikawa T and Yabashi M 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 123103 – 1–4
17. <https://www.asml.com>
18. Henke B L, Gullikson E M and Davis J C 1993 *Atomic Data Nucl. Data Tables* **54** 181–342
19. https://henke.lbl.gov/optical_constants/
20. Shepelev V, Petrov Yu, Inogamov N, Zhakhovsky V, Perov E and Fortova S 2022 *Optics and Laser Technology* **152** 108100
21. Koyama T *et al* 2013 *Opt. Express* **21** 15382–15388
22. Milov I *et al* 2020 *Appl. Surf. Sci.* **528** 14652
23. Milov I *et al* 2020 *Appl. Surf. Sci.* **501** 143973
24. Medvedev N 2015 *Appl. Phys. B* **118** 417–429
25. Lipp V, Medvedev N and Ziaja B 2017 Classical Monte Carlo simulations of x-ray induced electron cascades in various materials p 102360H
26. Bushman A V, Kanel' G I, Ni A L and Fortov V E 1993 *Intense dynamic loading of condensed matter* (Washington, D.C.: Taylor & Francis)
27. Khishchenko K V, Tkachenko S I, Levashov P R, Lomonosov I V and Vorobev V S 2002 *Int. J. Thermophys.* **23** 1359–1367
28. Lomonosov I V 2007 *Laser and Particle Beams* **25** 567–584
29. Khishchenko K V 2015 *J. Phys.: Conf. Ser.* **653** 012081
30. <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>
<http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>
31. Inogamov N A, Anisimov S I, Petrov Y V, Khokhlov V A, Zhakhovskii V V, Nishihara K, Agranat M B, Ashitkov S I and Komarov P S 2008 *Proc. SPIE* **7005** 70052F
32. Ashitkov S I, Komarov P S, Zhakhovsky V V, Petrov Y V, Khokhlov V A, Yurkevich A A, Ilnitsky D K, Inogamov N A and Agranat M B 2016 *J. Phys.: Conf. Ser.* **774** 012097
33. Budzevich M M, Zhakhovsky V V, White C T and Oleynik I I 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 125505
34. Errandonea D, Schwager B, Ditz R, Boehler R and Ross M 2001 *Phys. Rev. B.* **63** 132104 [4 pages]
35. Errandonea D 2013 *Phys. Rev. B* **87** 054108

О возможности использования PIV для изучения двухфазных нестационарных вихрей

А. А. Мочалов

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: artem.mochalov@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2022 г.

Аннотация. Рассмотрены некоторые экспериментальные приемы для изучения двухфазных нестационарных вихрей методом бесконтактной анемометрии по изображениям частиц “PIV”. Показан пример визуализации крупной вихревой воронки малоинерционными частицами-трассерами. Показано характерное векторное поле крупного двухфазного нестационарного вихря. Продемонстрирован методический прием по оценке положения центра нестационарного вихря и отслеживанию его перемещения в плоскости измерений. <https://doi.org/10.33849/2022208>

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование особенностей движения дисперсной фазы (капель, частиц, осколков) в торнадоподобных вихрях представляет значительный интерес вследствие нескольких причин. Во-первых, наличие дисперсной фазы визуализирует атмосферные вихри. Во-вторых, измеряя скорость взвешенных малоинерционных частиц, можно получать необходимую информацию о динамике (поля скорости) воздушного вихря [1]. В-третьих, при определенной концентрации дисперсная фаза может оказывать существенное влияние на характеристики атмосферного вихря и его поведение [2]. В-четвертых, присутствие осколков и других дисперсных включений может вносить решающий вклад в негативные последствия торнадо [3]. Известны экспериментальные работы по исследованию торнадоподобных крупных вихревых структур [4–6], авторами которых не ставился акцент по нахождению центра вихревой воронки; в том числе в экспериментах показаны квазистационарные механически закрученные вихревые структуры.

Цель настоящей работы — рассмотреть особенности применения PIV (Particle Image Velocimetry) методики измерений для изучения двухфазных нестационарных вихрей и показать методический прием по оценке положения центра нестационарного вихря и отслеживанию его перемещения в плоскости измерений.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Основными объектами исследования являются нестационарные концентрированные вихри [7], генерация которых осуществляется благодаря созданию неустойчивой стратификации воздуха. На рисунке 1 показана упрощенная схема основной экспериментальной установки, оснащенной системой диагностики полей скорости “Полис – PIV”. Основными элементами экспериментальной установки являются (рисунок 1(а,б)): 1 — кросскорреляционная камера, 2 — несущий каркас установки, 6 — сдвоенный импульсный лазер, 8 — подстилающая поверхность, 10 — генератор тумана. Также на рисунке 1(а,б) показаны: 3 — линии тока вихревой структуры, 4 — лазерный “нож”, 5 — апертура излучателя, 7 — крупные инерционные частицы, 9 — пелена паров глицерина. Основные габариты установки (Д×Ш×В): 2000×1300×1500 мм; размер измерительной области в фокусе кросскорреляционной камеры 350×350 мм при

разрешении матрицы камеры 2048×2048 пикселей. Подстилающей поверхностью, над которой генерируются нестационарные воздушные вихри, служит лист алюминия диаметром 1100 мм и толщиной 1.5 мм. Для генерации указанных вихрей применяли газовую горелку (на схеме не показана), расположенную под подстилающей поверхностью, температура нагрева центра подстилающей поверхности достигала 610 К. Образование вихрей происходило в результате создания неустойчивой стратификации воздуха. Основные компоненты и характеристики измерительного комплекса “Полис – PIV”:

- двойной импульсный лазер Nd:YAG Quantel Ever Green с энергией в импульсе 145 мДж, длиной волны 532 нм и длительностью импульса 10 нс;
- цифровая кросскорреляционная камера GEV–V2020 MBobcat GEV Imperx с разрешением 2048×2048 пикселей, фиксирующая до 16 пар кадров в секунду;
- оптическая призма импульсного лазера с углом разветки 42° пучка света в плоскость и толщиной полученной плоскости лазерного “ножа” ≈ 1,5 мм;
- синхронизирующее устройство — процессор “ПОЛИС”;
- управляющий компьютер с программным обеспечением “ActualFlow”.

В основе применения PIV-диагностики лежит работа с изображениями. В свою очередь, корректность результатов напрямую зависит от качества полученных изображений [8]. На экспериментальных снимках должны четко наблюдаться отдельные частицы или однородные структуры — скопления частиц; также следует свети к минимуму засветку, затенение, размытие областей кадра и прочие негативные явления, ведущие к частичной утере информативности кадра.

3. ВИЗУАЛИЗАЦИЯ И РЕЖИМНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

При физическом моделировании двухфазных воздушных нестационарных вихрей необходимо качественно визуализировать (или “засеять”) генерируемую вихревую структуру [3]. В данной работе рассматривается рабочий режим, который включает в себя общее задымление рабочей области малоинерционными частицами-трассерами (микрокапли глицерина, $d_p \sim 1\text{--}5$ мкм) как при помощи генератора тумана, так и путем нанесения глицериновой пленки на поверхность подстилающей поверхности перед включением газовой горелки.

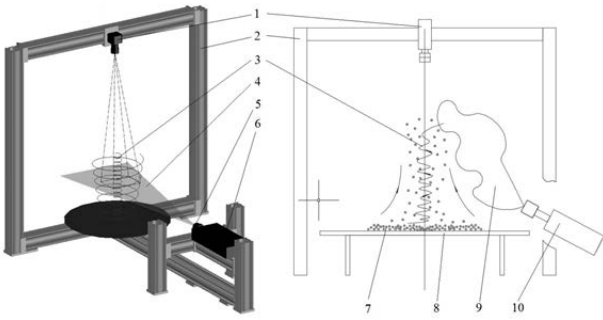


Рисунок 1. Схема эксперимента: (а) — схема экспериментальной установки; (б) — принцип ввода частиц. Цифрами обозначены: 1 — кросскорреляционная камера, 2 — каркас установки, 3 — вихревая структура, 4 — лазерный “нож”, 5 — апертура излучателя, 6 — сдвоенный импульсный лазер, 7 — частицы стекла, 8 — подстилающая поверхность, 9 — пары азеотропной смеси, 10 — генератор тумана.

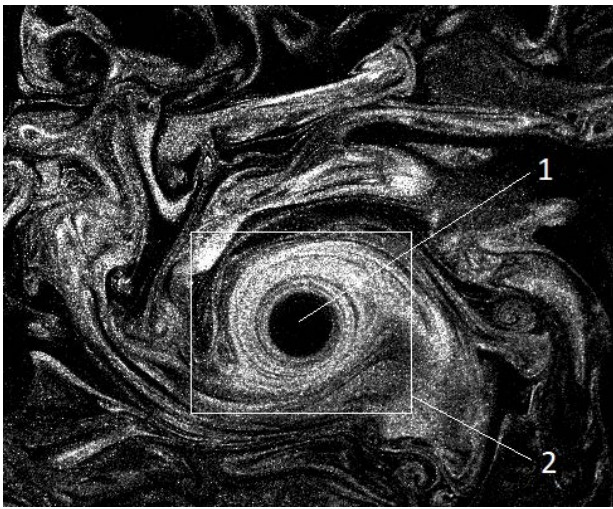


Рисунок 2. Изображение, полученное при поперечной съемке концентрированных вихрей. Цифрами обозначены: 1 — вихревая воронка, 2 — область вихревая трубка.

На рисунке 2 показано характерное моментальное изображение генерируемых двухфазных вихрей. На рисунке 2 хорошо различимы зоны с достаточной концентрацией малоинерционных микрокапель паров в области основной вихревой воронки (поз. 2) для применения алгоритмов нахождения полей скорости.

4. ОЦЕНКА ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ЦЕНТРА ВИХРЕВОЙ СТРУКТУРЫ

В данном разделе на примере полученных данных разбираются некоторые методические приемы по анализу обработанных экспериментальных данных.

Зачастую время устойчивой генерации вихря порядка $\tau \approx 50$ с; регистрация полей скорости осуществляется с частотой 1 Гц. На рисунке 3 показано характерное векторное поле через 25 секунд после начала генерации, полученное с помощью стандартного встроенного кросскорреляционного алгоритма в ПО PIV “ActualFlow”, с разбиением расчетной области на ячейки 64x64 пиксела. Для всего ансамбля из 50 пар кадров, полученных в течение генерации вихревой структуры, вычислялись

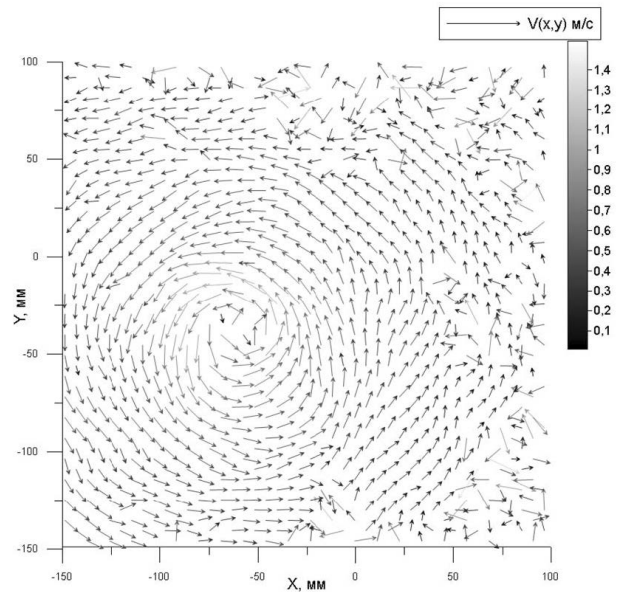


Рисунок 3. Характерное векторное поле вихревой воронки.

векторные карты. На основе полученных данных далее производилась оценка положения вихря в плоскости измерений.

Полезным приемом для анализа векторных полей является нахождение центра воронки вихря. Это позволяет отслеживать положение центра нестационарного вихря в измерительной области для разных моментов его жизни. Один из существующих приемов по нахождению центра нестационарного вихря предложен в [8] и развит в [9]. Суть метода заключается в следующем. Пусть P — фиксированная точка в измерительной области. Далее вводится скалярная функция $\Gamma_1(P)$

$$\Gamma_1(P) = \frac{1}{S} \iint \frac{((PM \wedge U_M) \cdot z)}{(\|PM\| \cdot \|U_M\|)} \cdot dS = \frac{1}{S} \iint \sin(\theta_M) dS \quad (1)$$

где S — плоскость в окрестности фиксированной точки P ; M принадлежит плоскости S и z является единичным вектором к измерительной плоскости; θ_M представляет угол между вектором скорости U_M и радиус-вектором PM . Центр основного крупного вихря $O_{(x,y)}$ определяется при достижении граничного значения $|\Gamma_1|$. В случае осесимметричного вихря $|\Gamma_1| \rightarrow 1$ в окрестности $P \in S$.

При анализе дискретных векторных полей, полученных при помощи оптической диагностики PIV, S трансформируется в прямоугольную область фиксированного размера с центром в точке P . Тогда $\Gamma_1(P)$ определяется как

$$\Gamma_1(P) = \frac{1}{N} \iint \frac{((PM \wedge U_M) \cdot z)}{(\|PM\| \cdot \|U_M\|)} = \frac{1}{N} \sum_S \sin(\theta_M) \quad (2)$$

где N — количество произвольных точек M внутри плоскости S . Параметр N является своего рода фильтром, отсеивающим центры $o_{(x,y)}$ мелкомасштабных вторичных турбулентных структур около воронки основного вихря. На практике центр $O_{(x,y)}$ крупной вих-

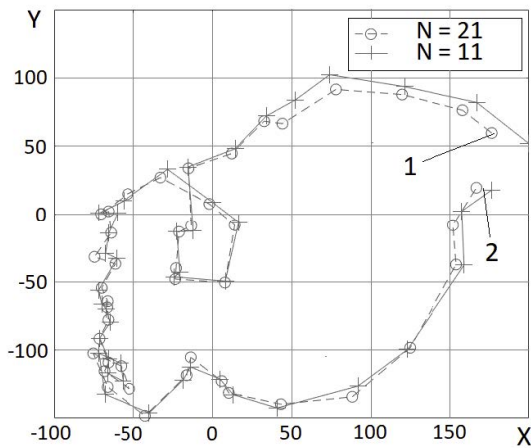


Рисунок 4. Перемещение центра $O(x,y)$ крупной вихревой структуры.

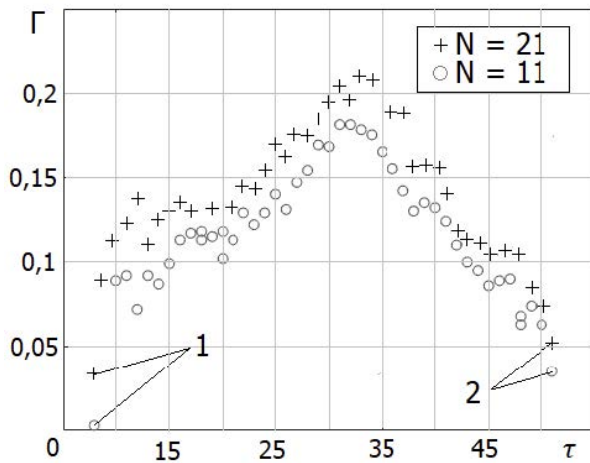


Рисунок 5. Значения циркуляции вихревой структуры во время эксперимента.

ревой структуры в измерительной области идентифицируется, когда $|\Gamma_1|$ превышает порог 0.9.

На рисунке 4 показано перемещение центра $O(x,y)$ крупной вихревой структуры в плоскости измерений. Воронка вихря вращается против часовой стрелки. Здесь цифрой 1 показана точка входа вихревой воронки в измерительную плоскость. Цифрой 2 обозначена точка выхода из измерительной плоскости. Центр определен по методике, указанной выше. Как видно из графика, варьирование количества N опорных точек M приводит к несущественным расхождениям определения положения центра вихря (в особенности в начальный и конечный момент времени при малых значениях циркуляции $\Gamma < 0.1$). Отметим, что полученные координаты центра $O(x,y)$ в результате анализа векторного поля и физические координаты центра вихря могут не совпадать (вследствие зависимости от выбранного разме-

ра расчетной ячейки кросскорреляционного алгоритма обработки изображений). В данной работе влияние размеров ячеек на точность определения центра вихря не рассматривается.

На рисунке 5 показаны значения циркуляции крупной вихревой структуры $\Gamma(\tau)$, определенные по разному количеству опорных векторов. Цифра 1 обозначает точку входа вихревой воронки в измерительную плоскость. Цифра 2 обозначает точку выхода из измерительной плоскости. Стоит отметить, что при снижении характерного расстояния перемещения вихревой структуры (рисунок 4), наблюдается существенный прирост значения циркуляции, в то время как при увеличении расстояния перемещения значение циркуляции падает.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены некоторые экспериментальные приемы по изучению двухфазных нестационарных вихрей при помощи оптической диагностики полей скорости PIV. Показан пример визуализации вихревых воронок малоинерционными частицами-трассерами. Показано характерное векторное поле для одного из режимов визуализации. Продемонстрирован прием по нахождению центра вихря, опираясь на векторные карты, полученные при помощи оптической диагностики полей скорости. Показана траектория перемещения центра крупного вихря по измерительной плоскости. Данный прием может быть полезным при проведении оценок траекторий разлета и прочих динамических характеристик инерционных частиц (осколков) от центра торнадоподобных атмосферных вихрей, по аналогии перемещения вихрей меньшего масштаба, полученных в лабораторных условиях.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-19-00551).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вараксин А Ю 2017 *Теплофизика высоких температур* **55** 291–316
2. Вараксин А Ю 2017 *Теплофизика высоких температур* **53** 441–466
3. Varaksin A Y 2015 *Measurement Techniques* **58** 655–660
4. Ashrafi A 2021 *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics* **208** 104449
5. Junayed C 2019 *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics* **188** 61–79
6. Nichol S 2021 *Energies* **14** 61–79
7. Алексеенко СВ 2003 *Введение в теорию концентрированных вихрей* 1-е изд. (Новосибирск: Институт теплофизики СО РАН)
8. Grosjean N, Graftieaux L, Michard M, Hübner W, Tropea C and Volkert J 1997 *Measurement Science Technology* **8** 1523–1532
9. Graftieaux L, Michard M and Grosjean N 2001 *Measurement Science Technology* **12** 1422–1429

Влияние дисперсных капель воды на ускорение пламени и переход к детонации

И. С. Яковенко, А. Л. Котельников и А. Д. Киверин

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

E-mail: yakovenko.iivan@bk.ru

Статья поступила в редакцию 3 декабря 2022 г.

Аннотация. В работе представлены результаты численного анализа задачи об ускорении пламени и переходе к детонации в газовых смесях и газозвесьях, содержащих дисперсные микрокапли воды. Рассмотрены механизмы воздействия микрокапель на динамику развития процесса ускорения пламени в смесях на основе водорода. Показано, что топология фронта пламени, формируемая в ходе его ускорения в каналах, определяет особенности влияния капель на эволюцию волны горения. Так, ввиду особенностей структуры поверхности ускоряющегося в канале пламени, траектории взвешенных в газовой смеси микрокапель воды проходят тангенциально поверхности фронта, тем самым значительно увеличивается время их пребывания в зоне реакции и усиливаются ингибирующие эффекты. Кроме того, в условиях горения в канале, генерация возмущений на фронте пламени при взаимодействии с каплями ведет к уменьшению площади его поверхности и соответствующему торможению. <https://doi.org/10.33849/2022209>

1. ВВЕДЕНИЕ

Задачи современной энергетики, связанные с обеспечением эффективного, безопасного и экологичного сжигания топлив имеют принципиальное значение для дальнейшего развития отрасли. Одним из наиболее важных направлений, требующих как фундаментального, так и практического анализа, является разработка новых, комбинированных видов топлива и изучение процессов горения в сложных многокомпонентных и многофазных системах в целом. Так, среди перспективных топливных систем стоит выделить водонасыщенные топлива, которые возможно утилизировать в форме вспененных эмульсий [1] и микропен [2], пузырьковые жидкости [3, 4], угольные суспензии [5]. Процесс горения топлив в присутствии капель воды также применяется в двигателях внутреннего сгорания, где с помощью впрыска воды совместно с топливной смесью удается подавить детонационные процессы и обеспечить дополнительное охлаждение камеры сгорания [6, 7]. Также необходимо отметить, что распыление диспергированной воды является одним из наиболее эффективных способов подавления процессов горения и является распространенной основой систем пожаротушения [8].

Важно отметить, что влияние капель воды на процесс горения не всегда является однозначным. Так, эксперимент показывает, что при определенных условиях добавление капель воды в горючую газовую смесь обеспечивает гашение дефлаграционных и детонационных режимов горения [9, 10], снижает интенсивность взрывных волн [11], снижает темпы нарастания скорости и замедляет процесс перехода горения в детонацию в процессе ускорения пламени [12]. В то же время, в некоторых случаях впрыск капель воды может приводить к интенсификации горения. Так, согласно [13], генерация направленных потоков капель воды связана с формированием турбулентных потоков в газовой среде, что может привести к ускорению развития горения. Наличие в смеси взвешенных капель может быть причиной турбулизации потока перед ускоряющимся фронтом пламени и в том случае, когда капли изначально покоятся [14]. Другим важным фактором является непосредственное

взаимодействие между каплями воды и фронтом горения. При прохождении волны горения через среду с взвешенными каплями жидкости или инертными микрочастицами поверхность фронта горения локально деформируется. В результате эффективная площадь поверхности фронта пламени увеличивается, что приводит к его ускорению [15, 16]. Как было показано ранее в работе [17] этот механизм тесно связан с развитием естественной неустойчивости фронта пламени. Так, совместный рост гидродинамической и термодиффузионной неустойчивостей при горении в цилиндрической камере, заполненной обедненной смесью водорода с воздухом, интенсифицируется в присутствии капель воды, что приводит к более быстрому развитию поверхности фронта горения и, как следствие, сгоранию смеси в объеме [18]. При этом важно отметить, что характер влияния взвешенной фазы меняется в зависимости от размера капель и расстояния между ними. Для небольших капель реализуется сценарий с полным их испарением на масштабах зоны реакции. В этом случае капли эффективно ингибируют процесс горения, а процессы, связанные с потерями импульса потока и деформацией поверхности фронта пламени, не являются первостепенными. В свою очередь, крупные капли испаряются медленнее и обладают большей инерцией. В результате, взаимодействие крупных капель с фронтом горения определяет интенсивную генерацию возмущений на его поверхности и существенные потери импульса потока, в то время как процесс испарения капель реализуется уже после их прохождения в область продуктов горения. Данные механизмы интенсификации горения крупными каплями воды могут быть причиной формирования высокоинтенсивных режимов горения во вспененных эмульсиях [19, 20] и должны быть учтены при разработке новых топлив и надежных систем пожаро- и взрывобезопасности.

Особенности нестационарного развития горения в каналах и трубах, заполненных высокоактивными газовыми смесями, могут существенно влиять на характер воздействия капель на эволюцию процесса. В связи с этим, настоящее исследование направлено на изучение методами численного анализа эффектов, обуслов-

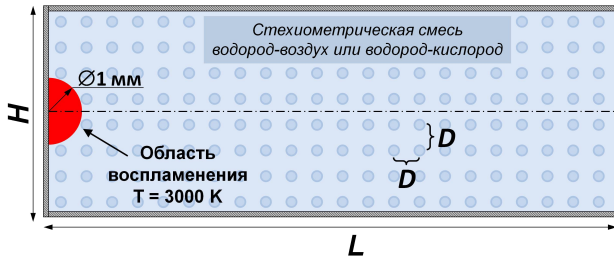


Рисунок 1. Постановка задачи о нестационарном распространении пламени в канале, заполненном газовой смесью на основе водорода с добавлением взвешенных микрокапель воды. Штрих-пунктирная линия — ось симметрии.

ленных наличием взвешенных микрокапель воды в химически активной газовой смеси на процессы ускорения пламени и перехода к детонации.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим процессы нестационарного распространения пламени в каналах, заполненных химически активными газовыми смесями на основе водорода, как чистых, так и в присутствии дисперсных капелек воды. Будем рассматривать стехиометрические смеси водорода с кислородом и воздухом. В качестве управляющих параметров зададим ширину канала, размер капелек воды, начальное расстояние между каплями и их распределение в пространстве. Постановка задачи схематически изображена на рисунке 1. Каналы шириной $H = 10$ мм и длиной 0.15 м или шириной 20 мм и длиной $L = 0.3$ м заполнены предварительно перемешанной стехиометрической газовой смесью водорода с кислородом или водорода с воздухом соответственно при нормальных условиях (при температуре 300 К и давлении 1 атм). В канале задано распределение микрокапель воды диаметром $d_d = 10, 50, 100, 200$ мкм, начальное расстояние между каплями характеризуется параметром $D = 0.25, 0.5, 1.0$ мм. В начальный момент времени горение инициируется точечным источником, мгновенно изобарически нагревающим смесь до температуры 3000 К вблизи закрытого торца канала. В результате формируется волна горения, распространяющаяся от левого закрытого торца к открытой правой границе. На стенках канала заданы условия прилипания потока и постоянной температуры (изотермические стенки с температурой $T_{wall} = 300$ К).

Моделирование газодинамических потоков выполнено на основе полной системы уравнений Навье–Стокса для вязкой сжимаемой среды с учетом эффектов теплопроводности, многокомпонентной диффузии и химических превращений. Для нахождения численного решения рассматриваемой системы была использована современная бездиссипативная методика КАБАРЕ [21], адаптированная для решения задач газодинамики горения и прошедшая тщательную валидацию и верификацию на специально разработанном наборе тестовых задач физики горения [22]. Химическая кинетика окисления водорода моделировалась с использованием современной схемы [23], включающей 21 химическую реакцию между 8 активными элементарными компонентами. Расчеты проводились в двухмерной постановке, нижняя граница расчетной области представляла собой

ось симметрии. Размер ячейки расчетной сетки составлял 100 мкм. Проведение расчетов выполнялось на базе разрабатываемой в ОИВТ РАН программной платформы вычислительной газодинамики с открытым исходным кодом NRG [24].

Динамика индивидуальных капелек воды описывалась в лагранжевом приближении, с учетом нагрева, испарения и межфазных взаимодействий. Коэффициент сопротивления сферической капли рассчитывался в приближении Шиллера–Наумана [25]. Система уравнений динамики, нагрева и фазовых превращений капелек решалась с применением алгоритма, приведенного в работе [26].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Процесс горения в горючих газовых смесях, содержащих капли воды, сопровождается локальными взаимодействиями между каплями, газодинамическими течениями и фронтом горения [27]. При этом, как показывают экспериментальные [15] и расчетные исследования [17, 18], в определенных условиях капли воды могут оказывать интенсифицирующее влияние на процесс горения. В случае изначально покоящихся капелек основным механизмом интенсификации выступает локальная деформация поверхности пламени при прохождении волны горения через массив капелек. Важно отметить, что в работах [15, 17, 18] рассматриваемые эффекты наблюдались в газовых смесях с малой химической активностью, где развитие процесса горения не сопровождается интенсивным самопроизвольным ускорением. При этом, особенности нестационарной эволюции пламени высокоактивных газовых смесей в ограниченном пространстве, каналах и трубах, могут иметь принципиальное влияние на интегральные эффекты, связанные с наличием в среде взвешенных капелек. Рассмотрим процессы ускорения пламени и последующего перехода к детонации на примере стехиометрической водород-кислородной смеси. На рисунке 2 представлена структура ускоряющегося фронта пламени вплоть до перехода к детонации в момент времени $t = 484$ мкс. В случае стехиометрической водород-кислородной смеси фронт горения на всем протяжении процесса ускорения представляет собой характерную вытянутую вдоль оси канала структуру (“finger flame”). При этом распределение скорости потока свежей смеси, выталкиваемой расширяющимися продуктами горения, имеет U-образную форму, с максимумом в ядре потока и минимумом вблизи стенок канала, где торможение газа обусловлено вязким трением о боковые стенки. Именно обратная связь между ускорением потока и растяжением пламени обуславливает механизм перехода от медленного горения к детонации в высокоактивной смеси водорода с кислородом [27].

На рисунке 3 представлены характерные структуры фронта пламени в случае газовой смеси без примесей и в присутствии микрокапель воды разного размера. В присутствии капелек воды в смеси боковая поверхность пламени насыщается возмущениями, которые ускоряют движение пламени в поперечном направлении канала. Тем самым, влияние капелек снижает роль естественного механизма растяжения фронта горения вдоль оси канала, что в случае ограничения поверхности пламени стенками канала определяет уменьшение его эффективной площади. Также, ввиду растяжения пламени вдоль оси

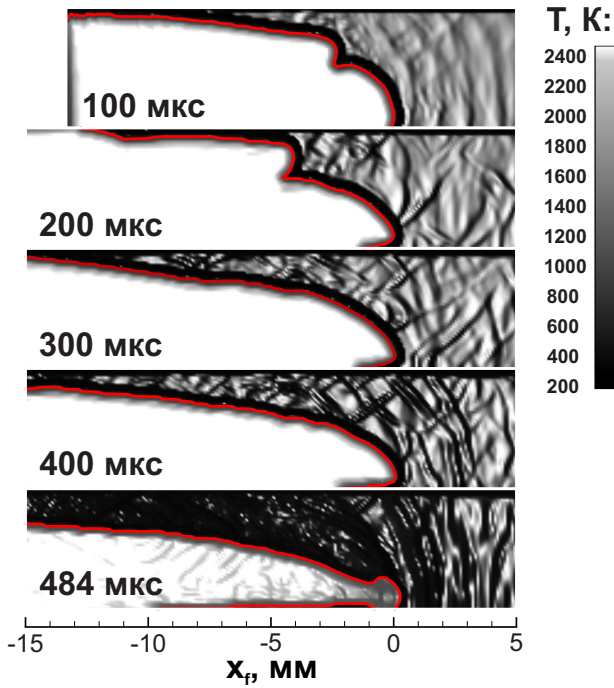


Рисунок 2. Эволюция волны горения в стехиометрической водород-кислородной смеси в канале шириной 10 мм в системе координат, связанной с положением ведущей точки фронта пламени x_f (нижняя граница — ось симметрии). Красной линией изображена изотерма 1500 К.

канала, траектории капель проходят вдоль поверхности пламени, а не по нормали к ней, как это происходит в случае свободного распространения пламени от точечного источника (см. рисунок 4). В результате, способность капель генерировать возмущения на поверхности фронта существенно снижается. При этом время пребывания капель в зоне реакции наоборот, увеличивается по сравнению со случаем свободно расходящегося пламени. Таким образом, ингибирующие эффекты, связанные с разбавлением смеси инертными парами воды и отводом теплоты на испарение на масштабах зоны реакции начинают играть принципиальную роль, как для капель небольшого размера, так и более крупных капель.

На рисунке 5 приведены хронограммы скорости ведущей точки фронта пламени $U_{f,L}$. Исходя из представленной на рисунке 5(a) динамики развития процесса в случае капель различного начального размера, расположенных на расстоянии 1 мм друг от друга, можно заключить, что присутствие капель препятствует ускорению пламени во всем рассмотренном диапазоне размеров капель (d_d). При этом капли практически не оказывают влияния на начальную стадию процесса, в ходе которой скорость ведущей точки нарастает экспоненциально во времени [28]. Далее распространение пламени приобретает квазистационарный характер, и волна горения распространяется со средней скоростью, близкой к полученной в результате ускорения на начальной стадии и составляющей величину порядка нескольких сотен метров в секунду. При уменьшении начального расстояния между каплями (увеличении массовой концентрации капель в единице объема) начинают падать темпы нарастания скорости волны горения на экспоненциальной стадии (рисунок 5(b)), что ведет также к сниже-

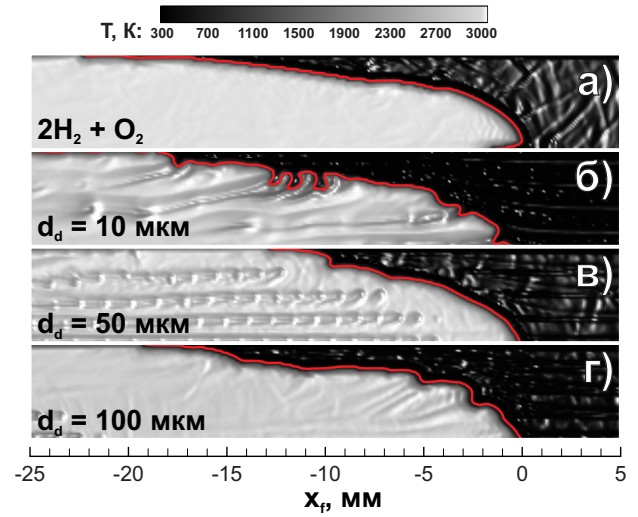


Рисунок 3. Характерные структуры фронта пламени в канале шириной 10 мм в системе координат, связанной с положением ведущей точки фронта пламени x_f (нижняя граница — ось симметрии). а) Стехиометрическая смесь водорода с кислородом без примесей $t = 300$ мкс; б) с добавлением капель воды диаметром $d_d = 10$ мкм $t = 375$ мкс; в) с добавлением капель воды диаметром $d_d = 50$ мкм $t = 360$ мкс; г) с добавлением капель воды диаметром $d_d = 100$ мкм $t = 320$ мкс. Расстояние между каплями — 1 мм. Красной линией изображена изотерма 1500 К.

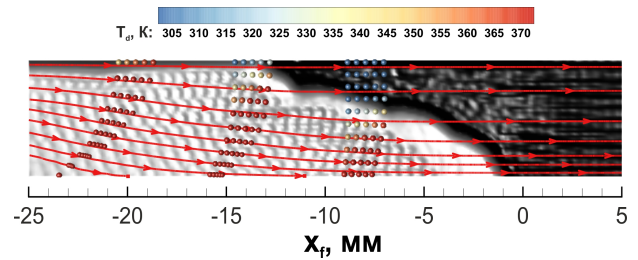


Рисунок 4. Динамика капель в ходе процесса ускорения пламени. Представлены положения капель на моменты времени 270–290 мкс с интервалом 5 мкс. Красными кривыми даны траектории капель. Структура фронта горения водород-кислородной смеси в канале шириной 10 мм приведена на момент времени 280 мкс.

нию средней скорости дальнейшего квазистационарного распространения пламени. Однако, исходя из полученных результатов, снижение начального расстояния между каплями с $D = 0.5$ мм до $D = 0.3$ мм уже не дает дополнительного торможения волны горения.

Развитие горения в менее химически активной стехиометрической смеси водорода с воздухом имеет качественные отличия от рассмотренного выше процесса ускорения пламени в смеси водорода с кислородом. На рисунке 6 представлена последовательность картин течения в стехиометрической водородно-воздушной смеси в канале шириной 20 мм в различные моменты времени. Здесь в ходе процесса ускорения пламени структура фронта претерпевает существенные изменения. Так, на начальных стадиях фронт вытягивается в потоке вдоль оси канала, аналогично тому как это происходит в стехиометрической смеси водорода с кислородом. Однако далее происходит трансформация структуры фрон-

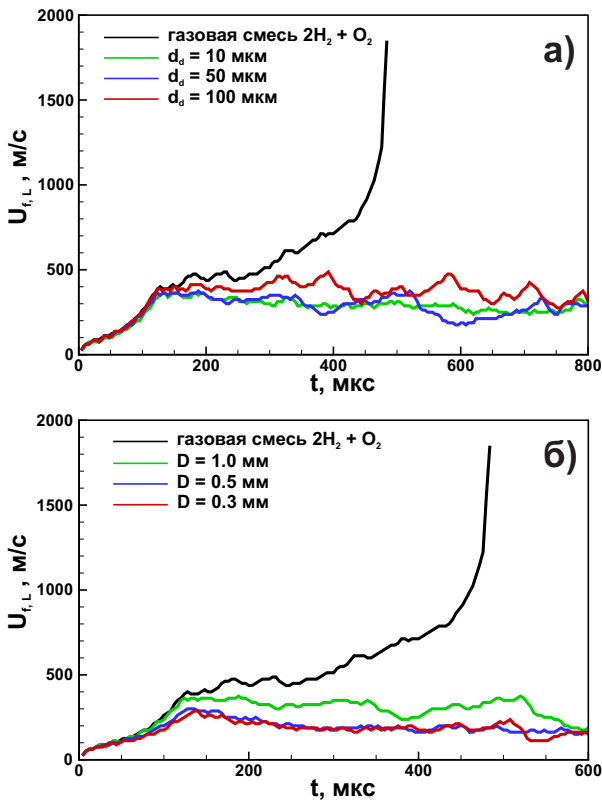


Рисунок 5. Хронограммы скорости ведущей точки фронта пламени $U_{f,L}$. а) влияние размера капель для начального расстояния между каплями 1 мм; б) влияние начального расстояния между каплями для начального размера капель 50 мкм.

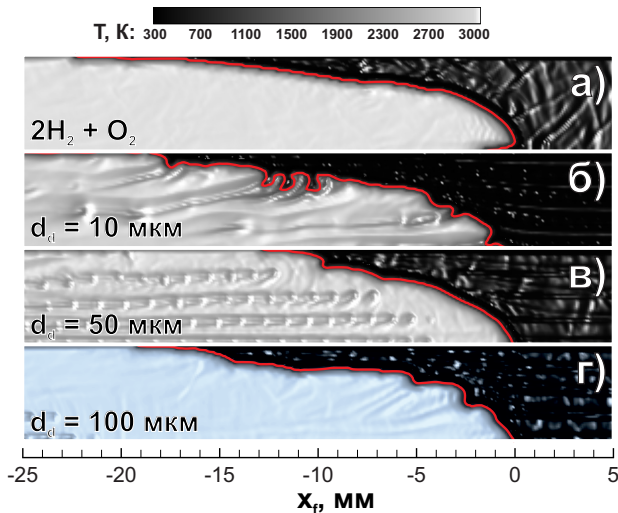


Рисунок 6. Характерные структуры фронта пламени стехиометрической смеси водород-воздух в канале шириной 20 мм (нижняя граница — ось симметрии). Красной линией изображена изотерма 1000 К.

та в так называемую тюльпанообразную форму (“tulip flame”). В ходе этой трансформации фронт горения занимает все сечение канала и становится практически плоским и далее вытягивается вдоль стенок. Перестройка структуры фронта горения отражается на динамике скорости ведущей точки (рисунок 7). Так, начальная стадия экспоненциального ускорения сменяется резким

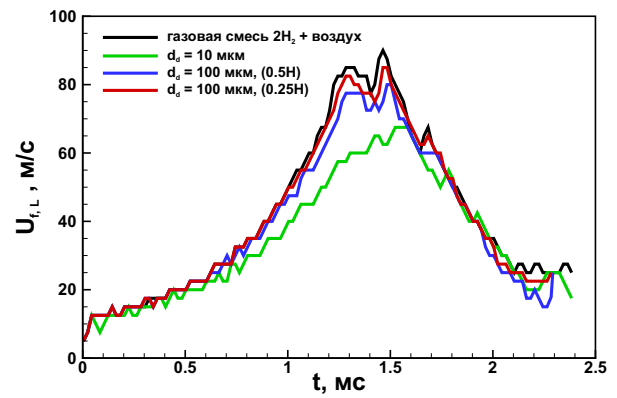


Рисунок 7. Хронограммы скорости ведущей точки фронта пламени $U_{f,L}$ в канале шириной 20 мм, заполненном чистой стехиометрической смесью водород-воздух или газозвесью с содержанием капель воды диаметром 10 и 100 мкм и начальным расстоянием между каплями 1 мм. В скобках указана степень исходного заполнения канала каплями в поперечном направлении.

падением скорости, когда пламя приобретает плоскую структуру и эффективная площадь горения резко снижается.

С точки зрения взаимодействия капель с фронтом горения, V-образная форма пламени имеет аналогичные особенности, что и пламя, вытянутое вдоль оси канала. Так, рост неустойчивости вблизи оси симметрии препятствует дальнейшему растяжению пламени и в случае узких каналов может привести к смыканию боковых языков пламени и переходу к плоскому фронту, что в свою очередь является фактором торможения волны горения. Обобщая результаты, представленные на рисунке 7, можно заключить, что и для менее активных газовых смесей присутствие капель обеспечивает снижение интенсивности ускорения пламени в канале.

На примере стехиометрической смеси водорода с воздухом были рассмотрены также варианты с неполным заполнением сечения канала каплями. Так, на рисунке 7 представлена также динамика волны горения при заполнении каплями половины (0.5H) и четверти канала (0.25H). Расстояние между каплями оставалось равным 1 мм, но капли на этот раз располагались только вблизи боковых стенок канала. При этом постановка задачи становится близка к задаче ускорения пламени в загроможденных каналах с расположенными вдоль стенок регулярными препятствиями. Хорошо известно, что в этом случае препятствия позволяют значительно ускорить развитие процесса и добиться более стремительного ускорения пламени и перехода к детонации. Однако в случае капель, расположенных вблизи боковых стенок канала, дополнительного ускорения по сравнению с темпами процесса в чистой смеси водорода с воздухом не наблюдается. Это обусловлено характером воздействия капель на фронт горения. Для возмущения поверхности пламени и соответствующего дополнительного ускорения пламени, капли должны двигаться по нормали к фронту горения. В случае их движения вдоль фронта и попадания в область зоны реакции, испарение даже крупных капель может начать сказываться уже на масштабах фронта пламени, что определяет локальное ингибирование реакций горения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнен детальный анализ механизмов влияния микрокапель воды на нестационарное распространение пламени и переход к детонации. Впервые использована современная бездиссипативная методика КАБАРЕ для комплексного изучения процессов ускорения пламени и перехода к детонации в газовых смесях и газовзвесах. Анализ особенностей развития процессов ускорения пламени и перехода к детонации в каналах показывает, что интенсификация этих нестационарных режимов горения путем добавления капель представляется возможным лишь в случае крупных пространственных масштабов развития горения. Показано, что ввиду геометрической конфигурации поверхности фронта горения, генерация возмущений на поверхности фронта при прохождении через массив микрокапель является фактором, замедляющим процесс горения. Самопроизвольное ускорение пламени в каналах сопряжено с формированием вытянутой вдоль оси канала (“finger flame”) или вдоль стенок канала (“tulip flame”) пространственной конфигурации фронта горения. При этом, возмущения на боковой поверхности фронта приводят к росту поперечной скорости распространения пламени и препятствуют формированию вытянутых структур фронта пламени. Кроме того, траектории капель проходят по касательной к боковой поверхности пламени, что увеличивает время их присутствия в области энерговыделения и способствует проявлению ингибирующих свойств. Данные механизмы определяют снижение темпов нарастания скорости в газовых смесях при добавлении в нее взвешенных микрокапель воды. Полученные результаты расширяют имеющиеся представления о развитии нестационарных процессов горения в газовых смесях и газовзвесах и должны быть учтены при разработке новых технических решений, реализующих горение предварительно перемешанных газовых смесей с добавлением дисперсных капель воды.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2020-806 от 29 сентября 2020 г.) и с использованием суперкомпьютерных вычислительных ресурсов Межведомственного Вычислительного Центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kichatov B, Korshunov A, Son K and Son E 2016 *Combustion and Flame* **172** 162–172
2. Kichatov B, Korshunov A, Kiverin A and Son E 2017 *International Journal of Hydrogen Energy* **42** 16866–16876
3. Hasegawa T and Fujiwara T 1982 *Symposium (International) on Combustion* **19** 675–683
4. Mitropetros K, Hieronymus H and Steinbach J 2006 *Chemical Engineering Science* **61** 397–416
5. Egorov R I, Antonov D V, Valiullin T R and Strizhak P A 2018 *Fuel Processing Technology* **174** 26–32

6. Boretti A 2013 *Applied Thermal Engineering* **52** 62–68
7. Iacobacci A, Marchitto L and Valentino G 2017 *SAE International Journal of Engines* **10** 928–937
8. Grant G, Brenton J and Drysdale D 2000 *Progress in Energy and Combustion Science* **26** 79–130
9. Thomas G O, Jones A and Edwards M J 1991 *Combustion Science and Technology* **80** 47–61
10. Thomas G O, Edwards M J and Edwards D H 1990 *Combustion Science and Technology* **71** 233–245
11. van Wingerden K, Wilkins B, Bakken J and Pedersen G 1995 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **8** 61–70
12. Boeck L, Kink A, Oezdin D, Hasslberger J and Sattelmayer T 2015 *International Journal of Hydrogen Energy* **40** 6995–7004
13. van Wingerden K and Wilkins B 1995 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **8** 53–59
14. Thomas, G O and Brenton, J R 1996 An investigation of factors of relevance during explosion suppression by water sprays *Preprint OTH 94 463* (London, UK: The University College of Wales)
15. Gieras M 2008 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **21** 472–477
16. Zhang P, Zhou Y, Cao X, Gao X and Bi M 2014 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **29** 313–318
17. Thimothée R, Chauveau C, Halter F, Nicoli C, Haldenwang P and Denet B 2017 *Comptes Rendus Mécanique* **345** 99–116
18. Yakovenko I S and Kiverin A D 2021 *International Journal of Hydrogen Energy* **46** 1259–1272
19. Kichatov B, Korshunov A, Gubernov V, Kiverin A and Yakovenko I 2020 *Fuel Processing Technology* **198**
20. Kiverin A and Yakovenko I 2021 *Energies* **14** 6233
21. Головизнин ВМ, Зайцев МА, Карабасов СА и ИА Короткин 2013 *Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов 1-е изд.* (Москва: Издательство Московского Университета)
22. Bykov V, Kiverin A, Koksharov A and Yakovenko I 2019 *Computers & Fluids* **194** 104310
23. Kéromnès A, Metcalfe W K, Heufer K A, Donohoe N, Das A K, Sung C J, Herzler J, Naumann C, Griebel P, Mathieu O, Krejci M C, Petersen E L, Pitz W J and Curran H J 2013 *Combustion and Flame* **160** 995–1011
24. Numerical reactive gas-dynamics <https://github.com/yakovenko-ivan/NRG>
25. Schiller L and Naumann A 1935 *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure* **77** 318–320
26. McGrattan K, McDermott R, Hostikka S, Floyd J and Vanella M 2019 *Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model Preprint NIST Special Publication 1018-1* (Gaithersburg, MD: U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology)
27. Киверин АД и Яковенко ИС 2022 *Физика горения и взрыва* **58** 32–39
28. Clanet C and Searby G 1996 *Combustion and Flame* **105** 225–238

Особенности взаимодействия фемтосекундного релятивистского лазерного импульса с поверхностью при больших углах падения в двумерной и трехмерной геометрии

Н. Д. Бухарский и Ф. А. Корнеев

Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет), Каширское шоссе, 31, Москва 115409, Россия

E-mail: korneeev@theor.mephi.ru

Статья поступила в редакцию 3 декабря 2022 г.

Аннотация. В работе на основе численных расчетов типа “частица в ячейке” рассматривается взаимодействие фемтосекундного релятивистского лазерного импульса с плоской поверхностью при большом угле падения лазерного излучения на плоскую поверхность. Анализируются процессы ускорения электронов и генерации электромагнитных разрядных импульсов, распространяющихся вдоль поверхности мишени. Приводится сравнение результатов в трехмерной геометрии при учете пространственной ширины импульса и мишени с результатами, полученными в двумерном расчете без учета зависимости величин от поперечной координаты. <https://doi.org/10.33849/2022210>

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача о взаимодействии мощных лазерных импульсов с плоской поверхностью плотной протяженной мишени при наклонном падении представляет большой интерес в контексте фундаментальных исследований динамики лазерной плазмы и приложений, связанных с генерацией ускоренных частиц, поверхностных электромагнитных волн и разрядных импульсов. При падении короткого релятивистского лазерного импульса на плоскую поверхность, близком к тангенциальному, может происходить достаточно эффективное ускорение электронов [1–7]. Кроме того, воздействие мощного лазерного импульса на мишень приводит к созданию в области облучения большого положительного потенциала и последующей генерации поверхностных электромагнитных волн и разрядных токов [8, 9]. Эти электромагнитные волны могут удерживать ускоренные электроны вблизи поверхности мишени [1] и транспортировать их вдоль нее на большие расстояния [10]. Возбуждаемые в протяженных мишенях разрядные токи, в свою очередь, можно использовать в качестве источника для возбуждения электромагнитных волн терагерцового диапазона при переходе к мишеням с более сложной геометрией, но с аналогичным механизмом возбуждения разрядного тока [9, 11]. Кроме того, при использовании более сложных мишеней с искривленной поверхностью при наклонном облучении, во внутреннем объеме мишени может обеспечиваться режим постоянного ускорения с формированием квазистационарных электромагнитных структур. В таких структурах с высоким значением магнитного поля, замороженного в создаваемую в результате взаимодействия плазму, и существующих на временном интервале, существенно превышающем длительность лазерного импульса, возможно также эффективное стохастическое ускорение электронов [12].

Для описания происходящих при взаимодействии мощного лазерного импульса с поверхностью мишени физических процессов и интерпретации результатов экспериментов хорошо подходит модель на основе системы уравнений Власова, поскольку энергия частиц оказывается достаточно большой, чтобы столкновения не оказывали существенного влияния на результаты взаи-

модействия. В рамках данной модели одним из наиболее последовательных методов является численное моделирование с использованием кинетических кодов типа “частица в ячейке”. Важным ограничением данного метода представляется необходимое для корректного описания разрешение расчетной сетки по крайней мере на уровне дебаевской длины в пространстве и обратной плазменной частоты во времени. В связи с этим часто при плотности плазмы порядка или близкой к твердотельной подобные расчеты осуществляются в двумерной геометрии [1, 3, 7–9, 11–14], что, с одной стороны, позволяет существенно снизить вычислительные затраты, необходимые для исследования процесса взаимодействия в масштабе, близком к реальному, а с другой — получить качественное описание явления в некоторых случаях. Однако, упрощение, связанное с уменьшением размерности, может приводить к таким следствиям, как подавление ряда неустойчивостей, формирование выделенных направлений, преобладанием одних механизмов над другими. Таким образом, редукция геометрии до двумерной требует обоснования на основе сравнения полученных с ее помощью результатов с результатами более корректного трехмерного моделирования.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В данной работе исследовался процесс взаимодействия мощного фемтосекундного жестко сфокусированного лазерного импульса с плоской поверхностью плазмы твердотельной плотности в случае больших углов падения. Условие жесткой фокусировки и короткой длительности упрощает пространственные и временные требования к параметрам расчета, который технически можно выполнить как в двумерной, так и в трехмерной геометрии. В то же время, именно такие импульсы наиболее интересны в контексте ускорения частиц и генерации разрядных импульсов. Численное исследование процесса взаимодействия лазерного импульса с плоской поверхностью проводилось при помощи кинетического кода типа “частица в ячейке” Smilei [15]. Для целей последующего сравнительного анализа были проведены два расчета — двумерный и трехмерный с одинаковыми исходными параметрами плазмы и лазерно-

го импульса. Результатом такого анализа является верификация применимости двумерной модели для корректного описания качественных особенностей взаимодействия лазерного импульса с поверхностью мишени.

Мишень во всех расчетах состояла из ионизованной плазмы со степенью ионизации $Z = 10$ и электронной плотностью $n_e \approx 10^{22} \text{ см}^{-3}$, что превосходит критическую плотность для использованной длины волны излучения примерно на порядок. Поскольку длительность импульса и всего расчета процесса взаимодействия не превосходила одной-двух сотен фс, ионы были искусственно “заморожены”, т.е. предполагались неподвижными на протяжении времени симуляции, что позволило уменьшить необходимые вычислительные затраты, связанные с расчетом их динамики. Геометрически мишень представляла собой тонкую плоскую пластину длиной $l_x = 40 \text{ мкм}$ и толщиной $l_y = 0.64 \text{ мкм}$. Ширина пластины в трехмерном расчете составляла $l_z = 10 \text{ мкм}$, а в двумерном расчете предполагалось, что пластина бесконечна в направлении координаты z . Стоит отметить, что выбранные размеры мишени несколько меньше обычно используемых в реальном эксперименте, хотя в принципе могут быть изготовлены с использованием современных технологий. Уменьшение размеров в данном исследовании продиктовано целью снижения необходимых вычислительных ресурсов в трехмерном расчете. При этом в двумерном расчете размер мишени был выбран в полном соответствии с размером мишени в трехмерном случае, так как в этом случае полученные результаты можно непосредственно сравнивать между собой.

Расчетная область в двумерном случае представляла собой прямоугольник со сторонами $L_x = 53.6 \text{ мкм}$ и $L_y = 11.5 \text{ мкм}$, а в трехмерном — параллелепипед, у которого размеры сторон L_x и L_y соответствовали размерам расчетной области в двумерном случае, а размер третьей стороны составлял $L_z = L_y = 11.5 \text{ мкм}$. В обоих расчетах использовалось одинаковое пространственное и временное разрешение: 20 нм и $6.7 \cdot 10^{-2} \text{ фс}$ соответственно. На каждую пространственную ячейку приходилось по 10 электронов. Лазерный импульс вводился в расчетную область посредством задания осциллирующего граничного условия на магнитное поле на левой стенке расчетной области. Длина волны лазерного излучения составляла 800 нм , интенсивность в центре пятна фокусировки с диаметром 2.4 мкм (по уровню $1/e^2$ от максимума интенсивности) — $5 \cdot 10^{20} \text{ Вт см}^{-2}$. Длительность лазерного импульса была несколько занижена относительно характерных для современных фемтосекундных лазерных комплексов значений ($\sim (25\text{--}50) \text{ фс}$), и составляла 4 фс . Такая длительность обеспечивает схожую с реальной локализацию лазерного импульса на масштабе мишени в расчете, где размер мишени был уменьшен относительно реального примерно в 10 раз. Лазерный импульс, поляризованный в плоскости (x, y) , направляется на мишень под углом 70° к нормали пластины, т.е. под углом, близком к касательному к поверхности. Геометрия облучения мишени в двумерном и трехмерном расчетах схематично показана на рисунке 1, в верхнем ряду, где изображена компонента магнитного поля B_z . На этом же рисунке приведены основные полученные в двух расчетах результаты.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Наиболее заметные отличия в двумерном и трехмерном случае проявляются через некоторое время после момента падения импульса на поверхность. На рисунке 1 представлены результаты, соответствующие моменту времени 100 фс после начала расчета, или примерно 50 фс после начала падения импульса на поверхность. К данному моменту лазерный импульс, который фокусируется на поверхности мишени в точке с координатой $x = 13.6 \text{ мкм}$ (см. рисунок 1, верхний ряд), почти полностью отражается от мишени и отделяется от ее поверхности, что можно видеть на распределениях компоненты магнитного поля B_z и компоненты электрического поля E_y . В то же время у поверхности мишени формируется монополярная и достаточно локализованная область с электромагнитным полем, которая распространяется вдоль поверхности мишени направо со скоростью $\approx (0.94\text{--}0.99)c$, где c — скорость света. Характерный размер этой области приблизительно соответствует пространственному размеру лазерного импульса. Возникновение такого короткого электромагнитного импульса связано с генерацией разрядного импульса тока. В результате воздействия лазерного импульса на мишень создаются ускоренные электроны, которые покидают область взаимодействия, создавая в ней положительный потенциал. Этот потенциал и приводит к возбуждению разрядного тока, представляющего поток электронов мишени, стремящийся компенсировать возникший в области взаимодействия положительный потенциал [8, 11, 14]. Скорость распространения разрядного импульса определяется диссипативными процессами. Примечательно, что в расчетах на основе бесстолкновительного уравнения Власова, как, например, в данном случае, скорость заметно отличается от скорости света, что соответствует бесстолкновительным диссипативным процессам. В частности, речь идет о затухании Ландау в волне разрядного импульса [14].

На графике плотности тока J_x (рисунок 1, 3-й ряд) разрядный импульс виден как поток электронов, направленный влево и отмечен как $-J_{\text{обр.}}$, так что сам ток $J_{\text{обр.}}$ имеет положительное значение проекции на ось x . В данном случае, вследствие малой толщины пластины и уменьшенной по сравнению с реальной твердотельной плотностью, скин-эффект недостаточно выражен, и разрядный ток проникает почти на всю глубину пластины и течет внутри мишени. Для пластины большей толщины и большей плотности разрядный ток, имеющий характерный временной масштаб порядка длительности импульса, должен быть сосредоточен вблизи поверхности вследствие скин-эффекта. Кроме того, на графиках плотности тока можно выделить еще две отдельные области с током. Одна из них соответствует сгустку электронов, ускоренных лазерным импульсом в направлении его зеркального отражения от поверхности мишени. Поток этих электронов отмечен на графике J_x для двумерного расчета как $-J_{\text{зерк.}}$. Вторая область соответствует электронам, ускоряемым вдоль поверхности пластины; их поток отмечен на графике как $-J_{\text{пов.}}$. Удержание этих электронов вблизи поверхности мишени возможно благодаря формированию около поверхности электромагнитной структуры, состоящей из магнитного поля с компонентой B_z и компоненты электрического поля E_y . Электромагнитная структура формируется вме-

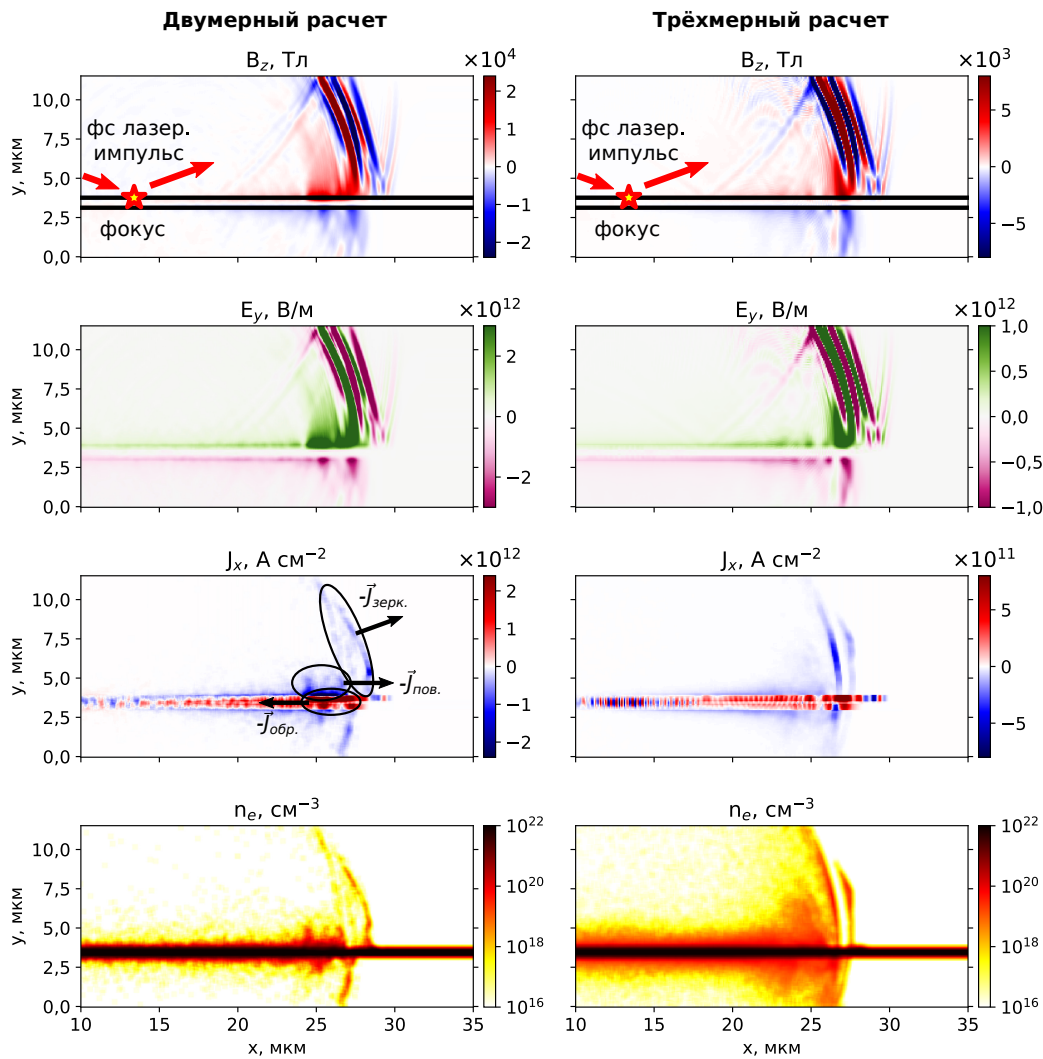


Рисунок 1. Результаты двумерного (левая колонка) и трехмерного (правая колонка) моделирования взаимодействия лазерного импульса с плоской поверхностью: 1-й ряд — компонента магнитного поля B_z ; 2-й ряд — компонента электрического поля E_y ; 3-й ряд — плотность электрического тока J_x ; 4-й ряд — электронная плотность n_e . Полученные результаты соответствуют моменту времени 100 фс после начала расчета. Результаты трехмерного расчета представлены в виде двумерных профилей, полученных посредством усреднения трехмерных массивов данных в области $z = L_z/2 \pm 1$ мкм, т.е. в расположенном в центре пластины слое толщиной 2 мкм.

сте с разрядным импульсом и описывается уравнениями Максвелла подобно волне Зоммерфельда [14]. Отметим, что компонента магнитного поля B_z возбуждается благодаря токам и переменным электрическим полям в плоскости (x, y) , поэтому корректно описывается как в трехмерном, так и двумерном расчете.

Наблюдаемый разрядный импульс способен ускорять электроны, удерживая их около поверхности. Данное явление по существу представляет собой возбуждение тока самоиндукции, смысл которого в компенсации магнитного поля разрядного импульса в пространстве. Ускоренные электроны распространяются вдоль пластины вместе с возникающим в результате облучения электромагнитным импульсом. Ускоренные вдоль поверхности, а также в направлении зеркального отражения лазерного импульса электроны можно хорошо видеть на графиках электронной плотности на рисунке 1, 4-й ряд. Стоит отметить, что, несмотря на наличие трех отдельных компонент тока различного направления, полярность электромагнитного импульса определя-

ется обратным током — разрядный ток направлен вправо, и в то же время создаваемое вблизи поверхности мишени магнитное поле имеет положительную полярность в верхней части расчетной области и отрицательную — в нижней части. Таким образом, можно заключить, что основную роль в формировании электромагнитного импульса, распространяющегося вдоль поверхности пластины, играет именно разрядный ток.

Сравнение результатов двумерного и трехмерного моделирования (в центральном сечении пластины) показывает качественное сходство процессов в двух случаях — создаваемые у поверхности мишени электромагнитные поля, токи и распределения электронов в целом схожи по своей структуре. Вместе с тем, при более детальном рассмотрении замечен ряд отличий. Одним из основных является несколько меньшие значения амплитуд полей и токов в трехмерном случае, примерно в 3 раза меньше, см. рисунок 1. Это, вероятно, связано с несколькими различными условиями поглощения лазерного импульса в двумерной и трехмерной геометрии,

а также с различным профилем лазерного импульса в направлении z . Так, в двумерной геометрии профиль лазерного импульса во всех сечениях вдоль оси z предполагается одинаковым, а лазерный импульс во всех этих сечениях поляризован в плоскости (x, y) , и имеет две компоненты электрического поля — E_x и E_y , и одну компоненту магнитного поля — B_z . В трехмерной геометрии интенсивность импульса и значения электрического и магнитного поля максимальны около середины пластины в направлении оси z , и из-за достаточно жесткой фокусировки существенно уменьшаются при отдалении от середины к краю, где взаимодействие происходит менее эффективно. Таким образом, можно сделать качественный вывод об эффективном увеличении интенсивности при моделировании жестко сфокусированного лазерного импульса в приближении двумерной геометрии.

Однако, эффективное уменьшение интенсивности взаимодействия не приводит к меньшей плотности образованных горячих электронов. Напротив, в трехмерной геометрии облако электронов, которое создается вблизи поверхности мишени, оказывается гораздо больше и по пространственному размеру, и по характерным значениям плотности. В какой-то степени это может быть связано с особенностями определения плотности в трехмерном расчете — при одинаковом числе частиц на ячейку при усреднении трехмерного массива в области $z = L_z/2 \pm 1$ мкм вероятность обнаружить несколько макро-частиц в ячейке с координатами (x, y) существенно возрастает, в то время как в двумерном случае в заданной точке вообще может не оказаться макро-частиц. Однако, более правдоподобным объяснением наблюдаемого различия может служить разная эффективность перекачки лазерной энергии в электронную подсистему, в частности, за счет более эффективного стохастического нагрева. Действительно, при увеличении размерности пространства количество необходимых для интегрируемости системы первых интегралов движения возрастает, а симметрия взаимодействия уменьшается, что может существенно уменьшить порог развития стохастических процессов.

Еще одной интересной особенностью распределения электронной плотности, полученного в трехмерном расчете, является выраженная периодическая структура для той части облака электронов, которая ускоряется в направлении отражения лазерного импульса. На рисунке 1, 4-й ряд, справа, можно выделить по крайней мере две отдельных группы электронов, ускоренных в данном направлении. Эти две группы электронов можно заметить и на графике плотности тока J_x (см. рисунок 1, 3-й ряд, справа). Расстояние между этими группами ускоренных электронов приблизительно соответствует длине волны лазерного излучения, на основе чего можно сделать вывод о том, что периодическая структура ускоренных в направлении лазерного импульса электронов возникает вследствие периодической структуры электрического поля в импульсе. Действительно, сравнение графиков плотности тока и электронной плотности, полученных в трехмерном расчете, с графиком компоненты электрического поля E_y показывает, что данные сгустки электронов возникают в результате воздействия вертикальной компоненты электрического поля, которая способствует их отделению и удалению от поверхности мишени. Отсутствие такой структуры в дву-

мерном расчете также может свидетельствовать о менее эффективном взаимодействии по сравнению с трехмерным случаем.

Представленные на рисунке 1 результаты трехмерного моделирования были получены в результате усреднения трехмерного массива данных в узком слое вблизи центра пластины по оси z , что, с одной стороны, позволяет выполнить более корректное сравнение с результатами двумерного расчета, но с другой стороны, не содержит информацию о распределениях соответствующих величин вдоль поперечной пространственной координаты z . С целью демонстрации и анализа особенностей этих зависимостей были построены соответствующие трехмерные распределения. В качестве примера на рисунке 2 представлены трехмерные распределения электронной плотности в момент времени 100 фс после начала расчета.

На представленных графиках видно, что несмотря на жесткую фокусировку (размер пятна фокусировки 2.4 мкм) лазерного импульса, созданное им возмущение охватывает всю ширину пластины (10 мкм), что хорошо заметно на виде сверху и спереди на рисунке 2. При этом краев пластины $z = L_z/2 \pm 5$ мкм оно достигает с некоторой задержкой, что приводит к искривлению фронта ускоренных электронов в плоскости (x, z) (см. рисунок 2, вид сверху). В центральной части $z = L_z/2 \pm 1$ мкм распределение электронной плотности достаточно однородно по z , и может быть качественно описано двумерной моделью.

Созданное лазером возмущение распространяется вдоль поверхности пластины и может достигнуть ее конца по оси x . При этом часть ускоренных вдоль поверхности электронов может “отрываться” от мишени и продолжать двигаться в заданном направлении в виде сгустка (электронного банча) с некоторой угловой расходимостью. Этот эффект был также исследован в рамках проведенных расчетов — выбранный размер пластины в направлении оси x был несколько меньше размера расчетной области, что позволило наблюдать динамику разлета ускоренных вдоль поверхности мишени электронов после достижения границы мишени. Полученное в трехмерном расчете распределение электронов в один из поздних моментов времени (170 фс), когда электромагнитный импульс уже достиг конца пластины, представлено на рисунке 3(a).

На представленном графике можно выделить две группы электронов: электроны, ускоренные в направлении зеркального отражения лазера, и электроны, ускоренные вдоль поверхности мишени. Координаты и энергии этих электронов при пересечении ими правой границы расчетной области сохранялись отдельно, что посредством усреднения по всем макро-частицам с учетом их веса позволило получить энергетический спектр ускоренных электронов. Итоговые зависимости энергетического спектра от вертикальной координаты y , а также энергетического спектра в фиксированных точках с координатами $y = 3.4$ мкм и $y = 10.1$ мкм, представлены на рисунках 3(b, c). Анализ кривых, представленных на рисунке 3(c), позволяет отметить две основные особенности: (I) — для рассмотренных в работе параметров взаимодействия большая часть электронов ускоряется вдоль поверхности мишени ($y = 3.4$ мкм) и приобретает характерные значения энергии поряд-

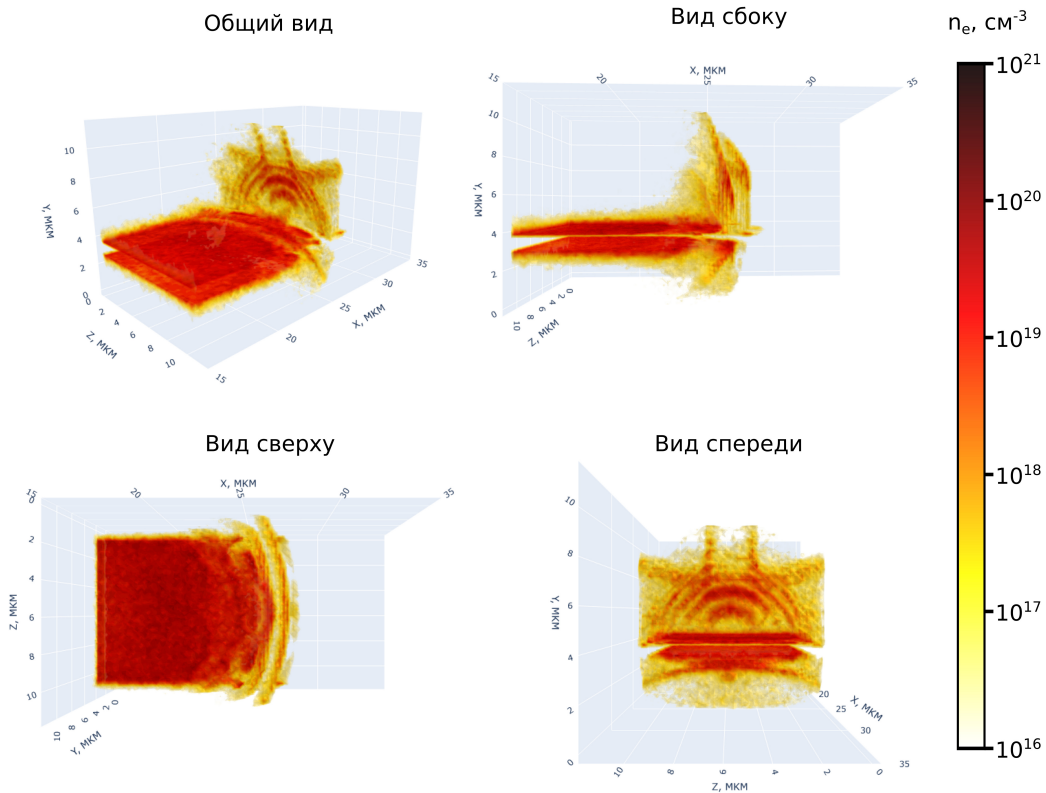


Рисунок 2. Трехмерные графики распределения электронной плотности, полученные в результате трехмерного моделирования взаимодействия лазерного импульса с плоской поверхностью. Результаты соответствуют моменту времени 100 фс после начала расчета. Для удобства чтения графиков область с электронной плотностью выше критической на рисунках не отображается.

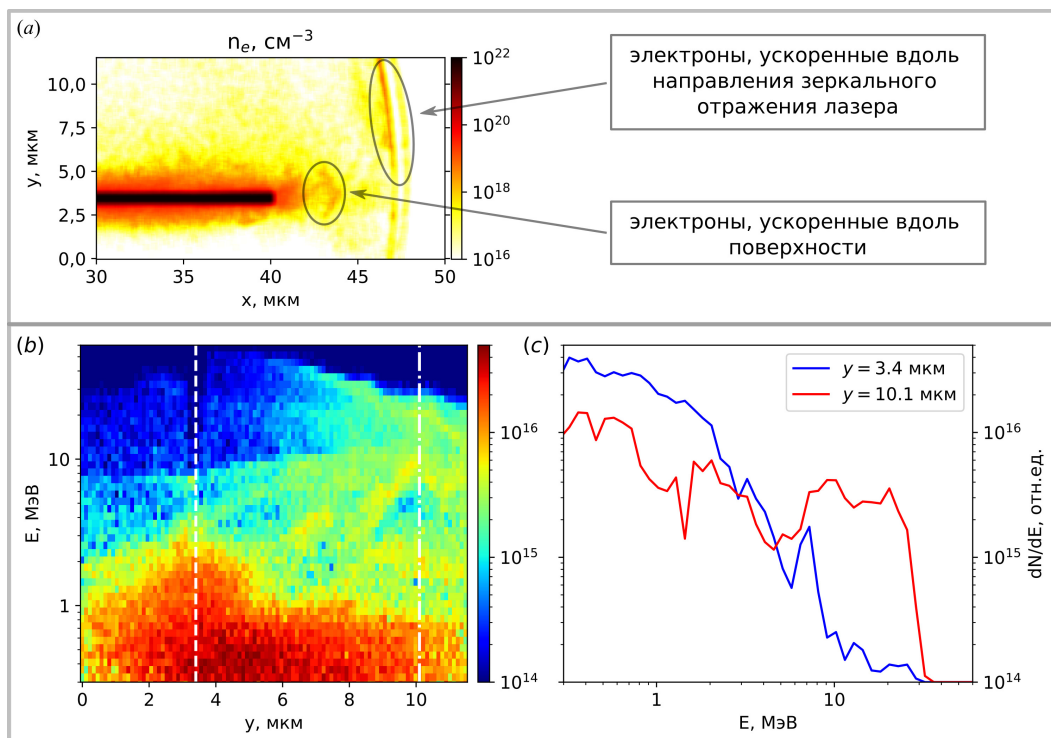


Рисунок 3. (a) Распределение электронной плотности в момент времени 170 фс, когда электромагнитный импульс уже достиг конца пластины. (b) Энергетический спектр ускоренных электронов в зависимости от координаты y ; белой штриховой и штрихпунктирной линиями показаны координаты, для которых на графике (c) приведены отдельные кривые. (c) Энергетический спектр ускоренных электронов при фиксированных значениях координаты $y = 3.4$ мкм (синяя кривая), что соответствует координате плоскости пластины, и $y = 10.1$ мкм (красная кривая).

ка 1 МэВ; (II) — ускоряемые в направлении зеркального отражения лазера электроны имеют большие характерные значения энергии, которые по величине хорошо согласуются с характерным значением энергии ускоренных частиц, определяемым пондеромоторным скейлингом $E = m_e c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{I[\text{W cm}^{-2}] \lambda^2 [\mu\text{m}]}{1.37 \cdot 10^{18}}} - 1 \right)$ [16], который для использованных в работе параметров дает величину энергии ≈ 7 МэВ. Стоит отметить, что несмотря на чуть менее эффективное ускорение электронов вдоль поверхности мишени пучок этих электронов имеет меньшую расходимость и может быть эффективно транспортирован вдоль мишени в нужную область, что делает схему ускорения электронов на основе взаимодействия короткого лазерного импульса с плоской поверхностью при наклонном падении привлекательной для различных приложений.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В работе при помощи численных расчетов исследован процесс взаимодействия короткого мощного лазерного импульса с плоской поверхностью при наклонном падении в двумерной и в трехмерной геометрии. И в первом и во втором случае происходят качественно схожие процессы — в результате ускорения электронов создается разрядный ток и электромагнитный импульс, распространяющиеся вдоль поверхности мишени. Электромагнитные поля этого импульса способствуют удержанию части электронов вблизи поверхности мишени, в результате чего у поверхности формируется противоположный разрядному ток самоиндукции. Несмотря на несколько меньшую характерную энергию по сравнению с частицами, ускоренными в направлении отражения лазера, электроны, движение которых формирует этот ток, могут быть эффективно транспортированы вдоль поверхности мишени в заданную точку в виде направленного пучка. Сравнение профилей электромагнитных полей, токов и электронной плотности плазмы, полученных в двумерном расчете с аналогичными профилями, полученными при усреднении результатов трехмерного расчета по третьей координате в небольшой области около центра, показывает достаточно высокую степень соответствия, однако характерные амплитуды полей и токов в трехмерном расчете оказываются примерно в 3 раза меньше, что может быть связано с несколькими отличными условиями поглощения лазерного

импульса. При этом эффективность взаимодействия в трехмерном случае оказывается существенно выше, так что даже с учетом эффективно меньших амплитуд электромагнитных полей количество нагретых электронов в трехмерном расчете превышает его в двумерном случае. Таким образом, при двумерном моделировании процессов взаимодействия мощных лазерных импульсов с поверхностью твердотельной мишени необходимо учитывать, что полученные значения могут быть несколько завышенными по отношению к результатам более полного моделирования, в котором учитываются различные трехмерные эффекты, однако эффективность взаимодействия с электронной подсистемой может быть менее эффективна.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chen M, Shenga Z M, Zheng J, Ma Y Y, Bari M A, Li Y T and Zhang J 2006 *Opt. Express* **14** 3093–3098
2. Mao J Y *et al* 2012 *Phys. Rev. E* **85** 025401
3. Mao J Y *et al* 2015 *Applied Physics Letters* **106** 131105
4. Andreev N E, Pugachev L P, Povarnitsyn M E and Levashov P R 2016 *Laser and Particle Beams* **34** 115–122
5. Serebryakov D A, Nerush E N and Kostyukov I Y 2017 *Physics of Plasmas* **24** 123115
6. Ma Y *et al* 2018 *Proc Natl Acad Sci USA* **115** 6980–6985
7. Mandal T, Arora V, Rao B S, Moorti A, Upadhyay A and Chakera J A 2019 *Physics of Plasmas* **26** 043105
8. Quinn K *et al* 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 194801
9. Bukharskii N and Korneev P 2022 Intense widely-controlled terahertz radiation from laser-driven wires *Preprint* 2210.14166 [physics.optics] URL <https://arxiv.org/abs/2210.14166>
10. Nakajima H, Tokita S, Inoue S, Hashida M and Sakabe S 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 155001
11. Bukharskii N, Kochetkov I and Korneev P 2022 *Applied Physics Letters* **120** 014102
12. Ehret M *et al* 2022 *Phys. Rev. E* **106** 045211
13. Korneev P *et al* 2017 Laser electron acceleration on curved surfaces *Preprint* 1711.00971 [physics.plasm-ph] URL <https://arxiv.org/abs/1711.00971>
14. Ehret M *et al* 2022 Guided electromagnetic discharge pulses driven by short intense laser pulses: Characterisation and modelling *Preprint* 2209.00272 [physics.plasm-ph] URL <https://arxiv.org/abs/2209.00272>
15. Derouillat J *et al* 2018 *Computer Physics Communications* **222** 351–373
16. Simpson R A *et al* 2021 *Physics of Plasmas* **28** 013108 (*Preprint* <https://doi.org/10.1063/5.0023612>)

К вопросу об измерении потенциала ионизации в неидеальной плазме путем резонансного зондирования рентгеновским лазером

С. Н. Рязанцев^{1,2}, И. Ю. Скобелев^{1,2}, Р. К. Куликов^{1,2} и С. А. Пикуз^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

² Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет), Каширское шоссе, 31, Москва 115409, Россия

E-mail: ryazantsev.serj@gmail.com

Статья поступила в редакцию 31 октября 2022 г.

Аннотация. Метод измерения потенциала ионизации иона, основанный на облучении плазмы излучением рентгеновского лазера на свободных электронах, предполагает, что основную роль в происходящих при этом ионизационных процессах играет прямая фотоионизация основного состояния иона. В настоящей работе показано, что в плотной плазме существенную роль играют ступенчатые ионизационные процессы, делающие практически невозможным применение данного метода для экспериментального изучения эффекта понижения потенциала ионизации. Делается вывод, что методики определения потенциалов ионизации, для которых ступенчатые процессы не играют роли, дают более надежные данные, что важно при проверке адекватности теоретических моделей этого эффекта. <https://doi.org/10.33849/2022211>

1. ВВЕДЕНИЕ

При рассмотрении свойств высокотемпературной плазмы, как правило, ее считают идеальной, а содержащиеся в ней ионы — изолированными, или свободными. Однако, при повышении плотности плазмы до значений, характерных для твердого тела, такой подход может перестать быть оправданным. Во-первых, если ионная плотность становится настолько большой, что расстояние между ионами становится порядка радиуса орбиты оптического (валентного) электрона, то ион уже нельзя считать изолированным. Во-вторых, если из-за повышения электронной плотности дебаевский радиус становится сравним с радиусом орбиты оптического электрона, то этот электрон уже будет двигаться не в чисто кулоновском поле ядра иона, а в поле, ослабленном дебаевским экранированием. Перечисленные эффекты могут очень сильно изменить свойства ионов. Во-первых, они понизят потенциал ионизации иона и приведут к тому, что целый ряд связанных состояний перестанет существовать. А во-вторых, уменьшат энергии оставшихся связанных состояний. Все это приводит к существенному изменению всех энергий связи в плазме, статистической суммы, а значит и уравнения состояния, ионизационного баланса и транспортных свойств такой сверхплотной плазмы.

Для описания эффекта понижения потенциала ионизации (ППИ) сейчас наиболее часто используются различные модификации двух подходов Эккера–Кролля [1] (далее ЕК) и Стюарта–Пьятта [2] (далее SP), в которых ключевыми параметрами являются среднее межэлектронное и межсионное расстояния, соответственно. Эти подходы дают близкие результаты при существенно различных (зачастую на порядки) значениях плотности плазмы. Помимо двух упомянутых также существует подход Хаммера–Михаласа [3], который дает результаты, близкие к SP. Ни один из перечисленных подходов не может быть обоснован чисто теоретически, в связи с чем установить их применимость можно только сопоставлением с результатами экспериментов.

Эти подходы были использованы для интерпретации экспериментальных результатов, полученных при

создании плазмы как излучением рентгеновских лазеров на свободных электронах [4, 5], так и мощных оптических лазеров [6, 7]. Оказалось, что в первом случае результаты наблюдений согласуются с моделью ЕК, в то время как во втором случае адекватной эксперименту является модель SP, причем разница между результатами, получаемыми с помощью указанных моделей, является очень значительной. Поскольку эффекты плотности имеют первостепенное значение для изучения состояния вещества при высоких плотностях энергии, широко распространенных как в астрофизических объектах, так и в лабораторных объектах, создаваемых в рамках проектов по инерциальному термоядерному синтезу, то актуальность устранения обнаруженного противоречия трудно переоценить.

В настоящей работе показано, что методики, используемые в [4, 5] для измерений потенциалов ионизации ионов, могут давать результаты, зависящие от атомно-кинетических моделей, используемых для расчетов ионизационного состава плазмы, а именно, от полноты учета возбужденных конфигураций ионов, и, следовательно, от учета ступенчатых ионизационных переходов. При этом в методиках, используемых для определения потенциалов в [6, 7], ступенчатые процессы никакой роли не играют. Из этого можно сделать вывод, что измерения, выполненные в этих работах, дают более надежные данные по понижению потенциалов ионизации в плотной плазме, а модель SP [2], с которой они согласуются, более адекватно описывает данное явление.

2. ИОНИЗАЦИЯ В ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЕ, ПОДВЕРГАЮЩЕЙСЯ ВОЗДЕЙСТВИЮ МОЩНОГО КОРОТКОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Метод измерения значений потенциалов ионизации, использованный в работах [4, 5], основан на пороговом характере процесса фотоионизации.

Вообще говоря, процессы ионизации в плазме многозарядных ионов могут быть радиационными (фотоионизация) и столкновительными, т.е. происходящими при столкновениях ионов с электронами. В подавляю-

щем большинстве случаев в плотной плазме доминирует столкновительная ионизация. Однако, возможны ситуации, когда на плазму воздействуют очень интенсивные потоки фотонов, генерируемые лазерами. Если энергия лазерных фотонов лежит в инфракрасном или оптическом диапазоне, то лазерная фотоионизация возможна лишь для внешних оболочек малозарядных ионов, а ионизация многозарядных ионов будет происходить за счет столкновительных процессов.

Если же плазма подвергается воздействию мощных потоков рентгеновского излучения, или создается ими, то ключевую роль даже для внутренних оболочек многозарядных ионов могут играть процессы фотоионизации. Именно такая ситуация реализовывалась в экспериментах [4, 5], в которых плазма создавалась путем облучения твердотельных фольг импульсами монохроматического рентгеновского излучения. При этом сам процесс ионизации может происходить ступенчатым образом. Например, фотоионизация электрона внутренней оболочки может создать автоионизационное состояние, которое затем может распасться в процессе автоионизации. Возможной также оказывается цепочка процессов “фотовозбуждение – фотоионизация” или “фотовозбуждение – столкновительная ионизация”. Очевидно, что в ступенчатых процессах принимают участие возбужденные состояния ионов, и от того, какие возбужденные конфигурации учитываются в расчете ионной кинетики, будут критически зависеть результаты моделирования.

Рассмотрим самый простой случай, когда в плазме присутствуют только H-подобные ионы и голые ядра одного химического элемента, который для определенности будем считать алюминием. Обозначим N_H концентрацию H-подобных ионов Al XIII (здесь и далее римскими цифрами обозначен спектроскопический символ иона, на единицу превышающий его заряд), N_N концентрацию ядер Al XIV и рассчитаем зависимость относительной концентрации ядер $\alpha = N_N / (N_H + N_N)$ от различных параметров плазмы.

Сначала предположим, что возбужденные H-подобные состояния вообще отсутствуют. В этом случае зависимость $N_N / (N_H + N_N)$ от энергии фотонов нагревающего импульса будет описываться вполне ожидаемой синей кривой, изображенной на рисунке 1. Все расчеты, результаты которых представлены в статье, были выполнены с помощью радиационно-столкновительного кода PrismSpect [8].

Пока энергия фотонов меньше потенциала ионизации уровня 1s иона Al XIII, фотоионизационные процессы в рассматриваемой системе невозможны. При превышении порога, который является как раз потенциалом ионизации иона Al XIII, начинает резко увеличиваться количество ядер Al XIV. Рост концентрации ядер можно определить, например, времяпролетными методиками, и энергия фотонов нагревающего лазерного импульса, соответствующая положению скачка на кривой $\alpha(E)$, казалось бы, дает значение потенциала ионизации.

Если в расчетах учесть эффект понижения потенциала ионизации в плотной плазме, то в зависимости от используемой модели, положение скачка будет сдвинуто на некоторую величину, которая достаточно сильно зависит от модели (см. рисунок 1).

В работах [4, 5] утверждается, что при сканировании энергии фотонов нагревающего импульса момен-

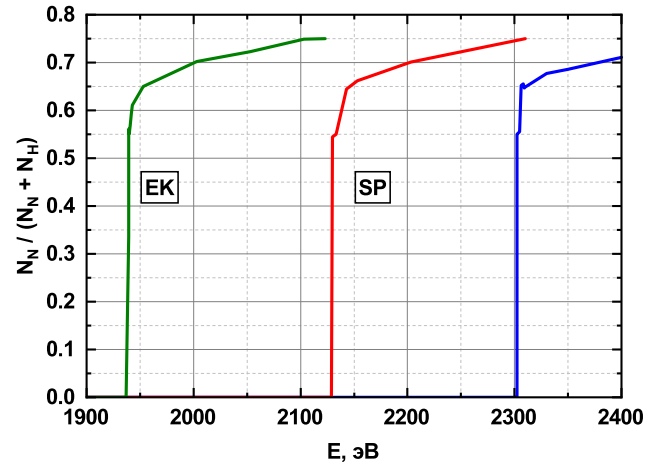


Рисунок 1. Зависимость относительной концентрации ядер Al XIV от энергии фотона нагревающего импульса E для плазмы с $T_e = 100$ эВ, $N_i = 6 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$, облучаемой рентгеновским лазером с интенсивностью 10^{17} Вт/см^2 . Синяя кривая — расчет без учета понижения потенциала ионизации, красная кривая — понижение потенциала по SP [2], зеленая кривая — понижение потенциала по EK [1].

ты появления тех или иных ионов хорошо соответствуют модели понижения потенциалов ионизации EK, и не описываются моделью SP.

Однако, на самом деле моменты появления ионов следующей кратности могут не соответствовать равенству энергии фотонов нагревающего импульса значению соответствующего потенциала ионизации. Это является следствием наличия ступенчатых каналов процесса ионизации. Мы покажем это, рассматривая достаточно простую систему, состоящую, как и выше, из H-подобных ионов и ядер, но теперь мы учтем возбужденные уровни H-подобного иона вплоть до значения главного квантового числа $n = 10$.

Сначала рассмотрим случай не слишком плотной плазмы с $N_i = 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Результаты расчетов, выполненных без учета эффекта понижения потенциала ионизации, показаны на рисунке 2.

На этом рисунке приведены результаты, полученные для фиксированной интенсивности нагревающего импульса $I = 10^{17} \text{ Вт/см}^2$ в спектральной полосе шириной 6 эВ. Эти значения примерно соответствуют условиям экспериментов [4, 5], проведенных на рентгеновском лазере на свободных электронах LCLS (Linac Coherent Light Source), где генерировался квазимонохроматический рентгеновский импульс с гауссовым спектром, имеющий перестраиваемую центральную частоту и ширину 6 эВ. Ионная плотность плазмы на этом рисунке равна 10^{15} см^{-3} , а температура меняется от 10 эВ до 200 эВ. Хорошо видно, что теперь зависимость концентрации ядер от энергии фотонов нагревающего импульса имеет совершенно другой характер — на кривых возникают максимумы, ширина которых увеличивается с ростом электронной температуры. Причиной появления таких максимумов являются процессы ступенчатой ионизации. Например, максимум в области 1730 эВ обусловлен ступенчатым процессом, первым этапом которого является фотовозбуждение $\text{Al XIII}(1s) + h\omega \rightarrow \text{Al XIII}(2p)$, а вторым — фотоиониза-

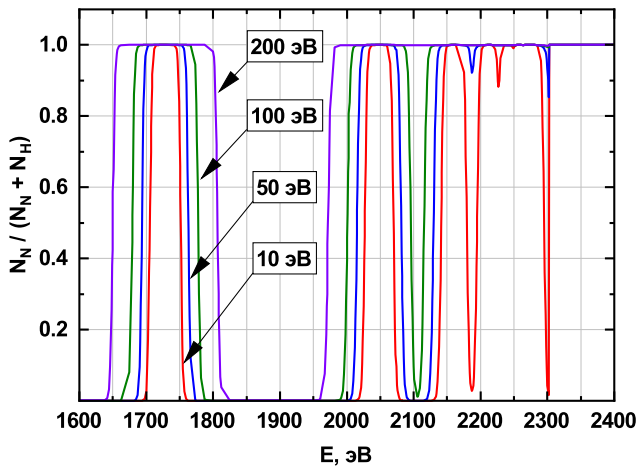
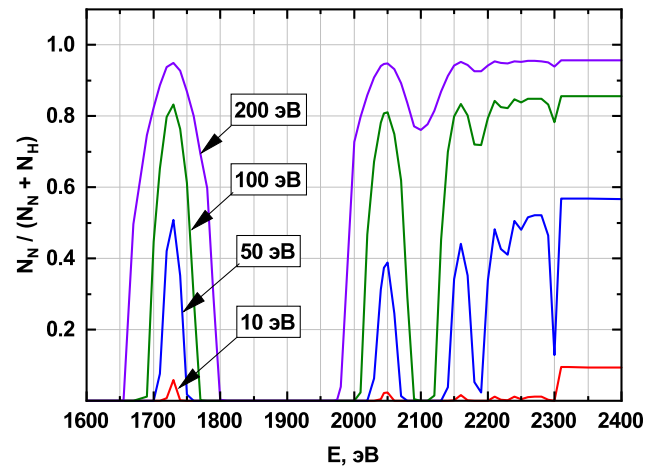


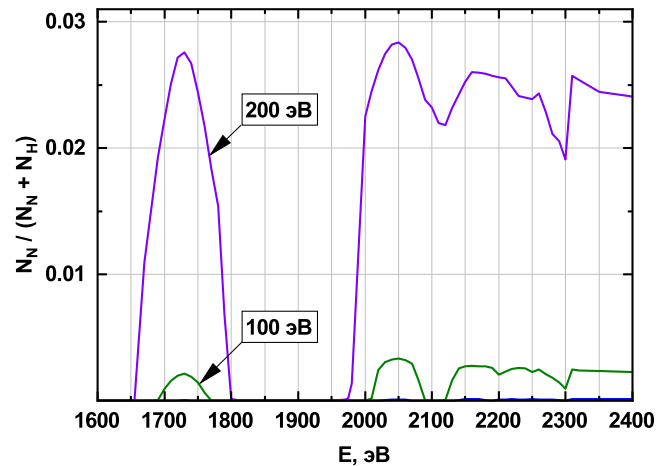
Рисунок 2. Результаты расчета зависимости концентрации ядер от энергии фотонов нагревающего импульса E , полученные для фиксированной интенсивности $I = 10^{17}$ Вт/см² в спектральной полосе шириной 6 эВ, ионной плотности плазмы 10^{15} см⁻³ и различных значениях температуры.

ция Al XIII (2p) + $\hbar\omega \rightarrow$ Al XIV + e или столкновительная ионизация Al XIII (2p) + e \rightarrow Al XIV + 2e. Остальные максимумы обусловлены аналогичными причинами, только первым этапом здесь будут фотовозбуждения $1s \rightarrow$ пр. Поскольку уровни пр сгущаются при увеличении n , то максимумы сближаются, а затем, когда ширина линии поглощения становится порядка расстояния между уровнями, начинают перекрываться. Поскольку ширины линий поглощения растут при увеличении как температуры, так и плотности плазмы, перекрытие происходит в области меньших значений энергий фотонов. Из рисунка 2, например, видно, что при $T_e = 200$ эВ уже при энергиях $\hbar\omega > 1980$ эВ происходит полная ионизация ионов Al XIII, хотя потенциал ионизации такого иона, находящегося в основном состоянии (1s), составляет ≈ 2304 эВ [9, 10]. Если бы роль возбужденных состояний не рассматривалась, то это можно было бы приписать эффекту понижения потенциала ионизации, несмотря на то, что в данном случае он абсолютно ни при чем.

На рисунке 3 приведены результаты расчетов, сделанных для тех же условий, что и рисунок 2, но для ионных плотностей 1×10^{20} см⁻³ и 6×10^{22} см⁻³, первая из которых примерно соответствует критической плотности лазерной плазмы, создаваемой излучением с длиной волны порядка 1 мкм, а вторая — плотности твердотельного алюминия. Из данных рисунков хорошо видно, что в плотной плазме порог ионизации ионов внешним рентгеновским излучением с энергией фотонов E , как правило, не соответствует условию $E = IP$ (IP — потенциал ионизации иона), а, скорее, определяется порогом ступенчатой ионизации, который совпадает с энергией фотовозбуждения одного или нескольких уровней ионизирующегося иона. В случае H-подобных ионов это будут состояния $n\ell$, причем величина n будет зависеть от температуры и плотности плазмы. Как видно из рисунка 3, даже в твердотельной плазме n будет больше 2.



(a)



(b)

Рисунок 3. Результаты расчетов, сделанных для тех же условий, что и рисунок 2, но для ионных плотностей 1×10^{20} см⁻³ (a) и 6×10^{22} см⁻³ (b).

3. ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Как видно из проведенных расчетов, процессы ступенчатой ионизации очень сильно влияют на зарядовое состояние фотоионизирующейся плазмы. Очевидно, что они оказывают влияние и на спектр излучения такой плазмы. Пример расчета эмиссионного спектра для области 5–8 Å, содержащей линии H-подобного алюминия, показан на рисунке 4. Энергии фотонов нагревающего лазерного излучения выбраны так, чтобы лежать в области, где фотоионизация невозможна (первый случай, $E = 1960$ эВ), фотоионизация происходит ступенчатым образом (второй случай, $E = 2000$ эВ) и фотоионизация может происходить прямо из основного состояния (третий случай, $E = 2310$ эВ $>$ $IP = 2304$ эВ). Обратим внимание, что эмиссионные спектры, соответствующие второму и третьему случаям, чрезвычайно похожи друг на друга, и очень сильно отличаются по интенсивности от первого.

Это означает, что при сканировании частоты нагревающего излучения и регистрации эмиссионного спектра плазмы, можно достаточно легко определить момент появления спектра соответствующего иона по резкому росту интенсивностей его спектральных линий, но соответствовать этот момент может не равенству

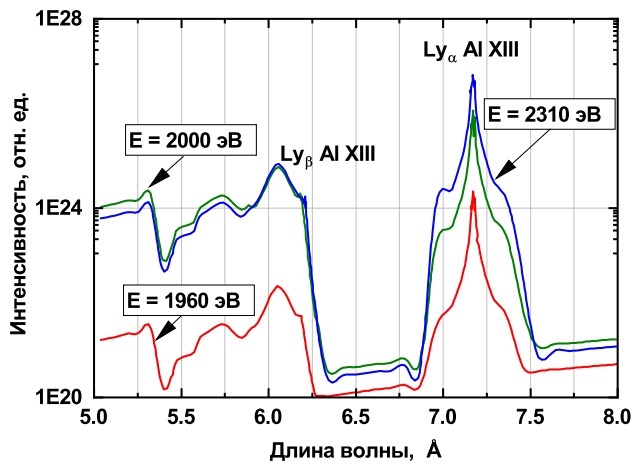


Рисунок 4. Спектры излучения алюминиевой плазмы, нагреваемой рентгеновским излучением интенсивностью 10^{17} Вт/см² и разными энергиями фотонов: красная кривая — $E = 1960$ эВ, зеленая кривая — $E = 2000$ эВ, синяя кривая — $E = 2310$ эВ. Во всех случаях плотность плазмы твердотельная, а температура электронов $T_e = 200$ эВ.

энергии падающего фотона потенциалу ионизации, а порогу ступенчатой ионизации, который значительно ниже.

Это позволяет высказать предположение, почему в экспериментах с рентгеновскими лазерами на свободных электронах [4, 5] получены результаты, противоречащие моделям SP (и Хаммера–Михаласа [3]) и результатам экспериментов [6, 7] по измерению понижения потенциала ионизации в плазме, создаваемой оптическими лазерами.

В работах [4, 5, 7] измерения ППИ делались, исходя из анализа эмиссионных рентгеновских спектров плазмы, однако использованные методики были принципиально различными. В [7] эффекты ППИ измерялись по сдвигу границы фоторекомбинационного континуума (ГФК) в длинноволновую область спектра и оценивались по пропаданию спектральных линий с большими значениями главного квантового числа n . В этом случае необходимо, во-первых, вложить энергию оптического лазерного импульса непосредственно в твердое вещество и, во-вторых, обеспечить регистрацию спектров излучения только до момента разлета плазмы. Если первую проблему можно решить, используя короткие лазерные импульсы сверхвысокого контраста, то вторую решить значительно сложнее, поскольку детекторов рентгеновского излучения с необходимым временным разрешением в настоящее время не существует. В связи с этим единственным применимым подходом является увеличение времени существования плазмы в состоянии с твердотельной плотностью. Это может быть сделано, например, ограничением разлета с помощью твердотельной оболочки, например за счет применения слоистых мишеней (см., например, [11–15]). Тем не менее, в той или иной степени разлет высокотемпературной плазмы будет иметь место почти всегда, и средняя ионная плотность плазмы не будет твердотельной, а подлежит измерению. С одной стороны, это является недостатком подхода, а с другой — преимуществом, поскольку позволяет исследовать эффекты ППИ при разных плотностях.

В подходе, использованном в [4, 5], нагревающий рентгеновский импульс заведомо проникает вглубь твердотельной мишени, а разлет сформированной плазмы с твердотельной плотностью благодаря существенно более низкой начальной температуре не столь важен, что, безусловно, является преимуществом. Однако, как мы показали выше на примере ионов даже с очень простой энергетической структурой, полученные экспериментальные результаты могут не позволить извлечь из них данные о потенциалах ионизации из-за вклада процессов ступенчатой ионизации. Аналогичные альтернативные каналы ионизации, причем гораздо более разнообразные, существуют и для процессов образования многоэлектронных ионов, поскольку в этих случаях большую роль играют состояния ионов с одной или несколькими (полые ионы) вакансиями во внутренних оболочках. На наш взгляд, именно недостаточно полный учет состояний полых ионов привел к переоценке эффектов ППИ в работах [4, 5].

В заключение хотелось бы подчеркнуть, что, вообще говоря, использование мощных лазеров на свободных электронах является очень многообещающим подходом в исследованиях роли эффектов плотности в неидеальной плазме. Особенно перспективно его использование при меньших потоках рентгеновского излучения, когда получаемая плазма будет сравнительно холодной (низкотемпературная плазма, warm dense matter) и столкновительная ионизация внешних ионных оболочек будет подавлена. Отметим, что в этом случае данный подход позволит исследовать ППИ в условиях, когда ионы будут упорядочены, а газ свободных электронов вырожденным. Напротив, для высокотемпературной плазмы более надежные измерения ППИ предполагают непосредственное наблюдение сдвига ГФК.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2021-1361). Работа Рязанцева С.Н. проводилась при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований в рамках научного проекта №19-32-60050. Расчеты были выполнены с использованием ресурсов МСЦ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ecker G and Kröll W 1963 *Phys. Fluids* **6** 62
2. Stewart J C and Jr Pyatt K D 1966 *Astrophys. J.* **144** 1203
3. Hummer D G and Mihalas D 1988 *Astrophys. J.* **331** 794
4. Ciricosta O *et al* 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 065002
5. Ciricosta O *et al* 2016 *Nat. Commun* **7** 11713
6. Fletcher L B *et al* 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 145004
7. Hoarty D J *et al* 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 265003
8. PrismSPECT overview URL <https://www.prism-cs.com/Software/PrismSPECT/overview.html>
9. База данных spectr-w3 по спектроскопическим характеристикам атомов и ионов URL <http://spectr-w3.snz.ru/index.phtml>
10. Skobelev I Y, Loboda P A, Gagarin S V, Ivliev S V, Kozlov A I, Morozov S V, Pikuz S A, Pikuz T A, Popova V V and Faenov A Y 2016 *Opt. Spectrosc.* **120** 507–514
11. Riley D, Angulo-Gareta J J, Khattak F Y, Lamb M J, Foster P S, Divall E J, Hooker C J, Langley A J, Clarke R J and Neely D 2005 *Phys. Rev. E* **71** 016406

12. Wharton K B, Boley C D, Komashko A M, Rubenchik A M, Zweiback J, Crane J, Hays G, Cowan T E and Ditmire T 2001 *Phys. Rev. E* **64** 025401
13. Kritcher A, Neumayer P, Urry M, Robey H, Niemann C, Landen O, Morse E and Glenzer S 2007 *High Energy Density Phys.* **3** 156–162
14. Chen S N *et al* 2007 *Phys. Plasmas* **14** 102701
15. Martynenko A S *et al* 2020 *Phys. Rev. E* **101** 043208

Динамика генерации свободных носителей в кремнии под действием ультракоротких интенсивных терагерцевых импульсов

А. В. Овчинников и О. В. Чефонов

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

E-mail: ovtch2006@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 2 декабря 2022 г.

Аннотация. Представлены результаты экспериментов по генерации свободных носителей заряда в легированном образце кремния р-типа толщиной 235 мкм при воздействии импульсов терагерцевого излучения с максимальной напряженностью электрического поля 22 МВ/см. Исследования проводились методом “накачка–зондирование”, в котором терагерцевые импульсы использовались в качестве накачки, а пуг фемтосекундных лазерных импульсов с длиной волны излучения 1240 нм, следующих с частотой 73 МГц — в качестве зондирующего излучения. <https://doi.org/10.33849/2022212>

1. ВВЕДЕНИЕ

Для управления свойствами полупроводников, которые используются для создания сверхбыстрых электронных и оптоэлектронных устройств, большое значение имеют исследования динамики свободных носителей заряда в сильном электрическом поле электромагнитного излучения дальнего инфракрасного и терагерцевого (ТГц) диапазонов спектра. Разработка источников когерентного ТГц-излучения с высокой интенсивностью [1–4] и методов их обнаружения [5, 6] сделало возможным развитие этой области исследований.

В оптическом спектральном диапазоне генерация электронно-дырочных пар фемтосекундными импульсами отличается от генерации свободных носителей заряда в кремнии субпикосекундными ТГц-импульсами. Поскольку энергия фотонов в ТГц спектральном диапазоне на два порядка меньше, чем в оптическом, то основным механизмом создания свободных носителей является ударная ионизация, а не межзонное поглощение.

Экспериментальные исследования генерации свободных носителей представляют не только фундаментальный интерес, но и имеют большое практическое значение для разработки материалов солнечных элементов с высокой эффективностью [7], чувствительных детекторов фотонов [8], для понимания физики разрушения диэлектриков фемтосекундными лазерными импульсами [9] и генерации высших гармоник [10].

В работе [11] люминесцентное излучение экситонов в ближней инфракрасной области спектра использовалось для исследования механизма ударной ионизации в кристалле GaAs при воздействии ТГц-импульсов с напряженностью электрического поля до 1 МВ/см. Было показано, что регистрируемое излучение люминесценции обусловлено увеличением концентрации свободных носителей на три порядка за счет механизма ударной ионизации.

Исследования механизма ударной ионизации в кремнии проводились в работе [12] при напряженности электрического поля ТГц-импульсов до 3.6 МВ/см. Для усиления входного импульса с полем 0.5 МВ/см на поверхность экспериментального образца была нанесена антенная решетка из золота толщиной 200 нм. В работе исследовалась скорость ударной ионизации в зависимости от начальной концентрации свободных носителей по изменению коэффициента отражения на длине волны

излучения 800 нм фемтосекундного лазерного импульса. Показано, что начальная концентрация свободных носителей существенно влияет на скорость ионизации. Аналогичные исследования были проведены в работе [13] в полупроводнике InSb с шириной запрещенной зоны 170 мэВ и начальной концентрацией свободных носителей 10^{14} – 10^{15} см⁻³ при воздействии импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля до 100 кВ/см.

В работе [14] были выполнены экспериментальные исследования генерации свободных носителей в кремнии р-типа при воздействии импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля до 22 МВ/см. Выполненное численное моделирование на основе полученных экспериментальных данных показало, что в образце кремния вдоль направления распространения импульса ТГц-излучения возникает неоднородная концентрация электронов с максимальным значением около 10^{19} см⁻³ во входном слое кремния.

В данной работе представлены экспериментальные исследования по генерации свободных носителей в кремнии (р-типа с начальной концентрацией дырок $\sim 10^{15}$ см⁻³) при воздействии импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля 22 МВ/см, но в качестве зондирующего излучения использовался пуг фемтосекундных лазерных импульсов с длиной волны излучения 1240 нм, что позволило в одном импульсе ТГц-излучения получить данные об изменении пропускания образца и оценить среднее значение концентрации генерируемых свободных носителей.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СХЕМА

Экспериментальная схема измерений представлена на рисунке 1. Генерация импульсов ТГц-излучения осуществлялась методом оптического выпрямления фемтосекундных лазерных импульсов в нелинейном органическом кристалле DSTMS (4-N,N-dimethylamino-4'-N'-methyl-stilbazolium 2,4,6-trimethylbenzenesulfonate) [15, 16]. В качестве накачки терагерцевого кристалла использовались импульсы фемтосекундной хром-форстеритовой лазерной системы с длиной волны излучения 1240 нм, длительностью импульса 80 фс и энергией в импульсе до 80 мДж [17].

Излучение хром-форстеритовой лазерной системы является оптимальным источником накачки для гене-

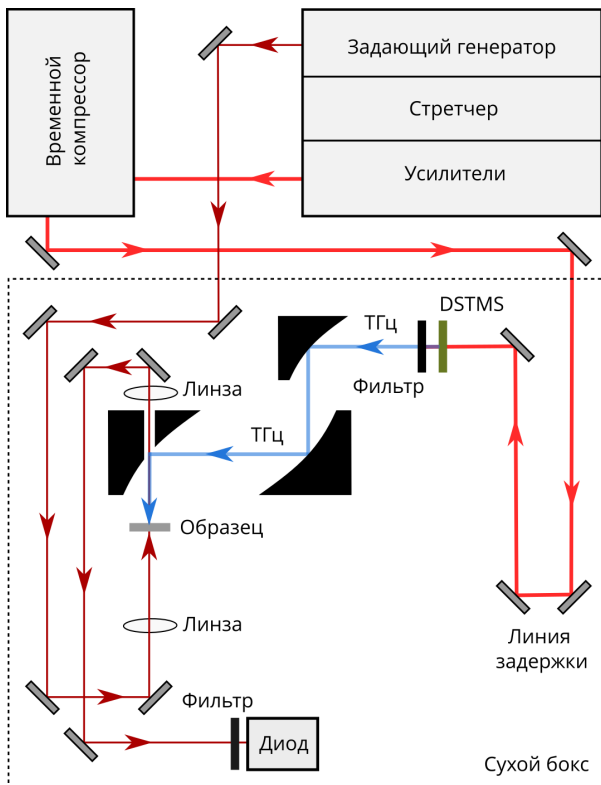


Рисунок 1. Экспериментальная схема измерений.

рации ТГц-излучения в кристалле DSTMS с эффективностью до 3% и гауссовым пространственным распределением [1, 18], что позволяет фокусировать ТГц-пучок в размер, близкий к дифракционному пределу [19, 20]. Для проведения экспериментов использовался ТГц-кристалл диаметром 8 мм и толщиной 440 ± 5 мкм. Эффективность преобразования составляла 1.6%, а энергия импульса — 120 мкДж. Для разделения излучения лазерной накачки от ТГц-излучения после кристалла ОН1 был установлен фильтр (LPF8.8-47, Tuxdex), который ослаблял в 10^8 раз излучение с длиной волны меньше 34 мкм. Для достижения максимальной напряженности электрического поля пучок ТГц-излучения расширялся до ~ 50 мм с помощью телескопа, состоящего из двух внеосевых параболических зеркал с эффективным фокусным расстоянием 25.4 мм и 152.4 мм. Фокусировка ТГц-излучения осуществлялась с помощью внеосевого параболического зеркала с эффективным фокусным расстоянием 50.8 мм и диаметром 50.8 мм. Благодаря полному заполнению апертуры фокусирующей параболы диаметр ТГц-пучка в фокальной плоскости составлял 170 ± 10 мкм по уровню $1/e$, что близко к дифракционному пределу 154 мкм (для центральной длины волны 170 мкм). Пространственное распределение ТГц-пучка измерялось с помощью ТГц-камеры (RIGI Swiss Terahertz). Часть экспериментальной схемы, которая связана с генерацией ТГц-излучения и изучением взаимодействия ТГц-излучения с кремнием, была размещена в боксе с осушенным воздухом (относительная влажность была менее 5%). В качестве зондирующего излучения использовался цуг фемтосекундных импульсов с частотой следования 73 МГц из задающего генератора лазерной системы (около 4% от общей мощности задающего генератора).

Временная форма ТГц-импульса измерялась методом электрооптического детектирования в кристалле фосфида галлия GaP с кристаллографической плоскостью (110) толщиной 200 мкм. В качестве зондирующего излучения использовался фемтосекундный оптический импульс с длиной волны излучения 1240 нм. Измеренная временная форма ТГц-импульса и его спектр представлены на рисунках 2 и 3. Максимальное значение напряженности электрического поля достигало 22 МВ/см.

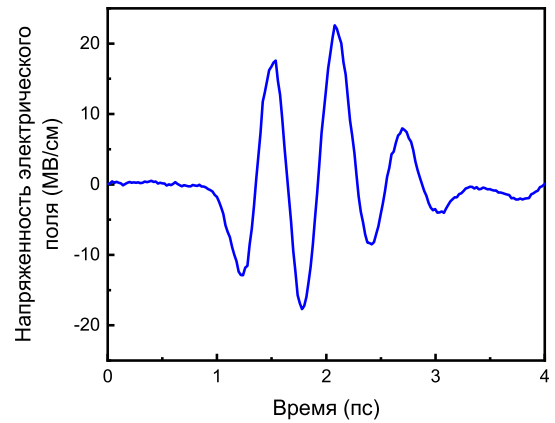


Рисунок 2. Временная форма ТГц-импульса.

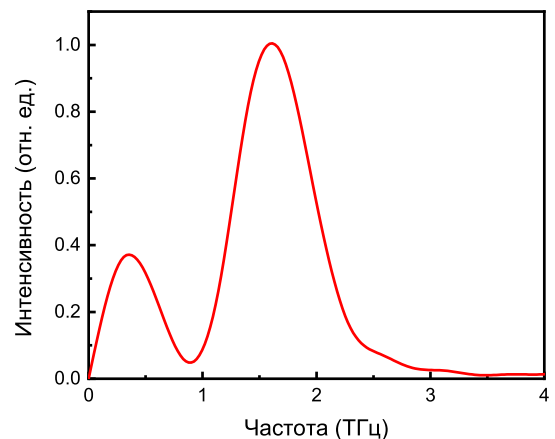


Рисунок 3. Спектр ТГц-импульса.

В эксперименте для исследования процессов, происходящих в кремнии при воздействии ТГц-импульсов, измерялось пропускание излучение зондирующего импульса, распространяющегося во встречном направлении относительно ТГц-импульса. Излучение фокусировалось в центральную область ТГц-пучка в пятно диаметром 20 мкм (по уровню $1/e$) с помощью линзы с фокусным расстоянием 100 мм. Регистрация интенсивности излучения зондирующего импульса, прошедшего через экспериментальный образец, осуществлялась InGaAs фотодиодом PD (DET01CFC/M, Thorlabs) с максимальной чувствительностью в диапазоне 800–1700 нм и постоянной времени ~ 1 нс. Интенсивность пробного излучения составляла $\sim 10^9$ Вт/см², что было существенно ниже порога генерации свободных носителей за счет двухфотонного поглощения (энергия кванта излучения зондирующего импульса 0.98 эВ меньше ширины запрещенной зоны кремния).

В качестве экспериментального образца в работе использовалась полированная пластина кристаллического кремния, легированного атомами бора (р-тип), с ориентацией (100) и толщиной 235 мкм. Концентрация легирующей примеси составляла $1.6 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ по измеренному удельному сопротивлению (12.2 Ом см) четырехзондовым методом. Образец был установлен на моторизованном трансляторе для оптимального расположения в фокальной плоскости фокусирующего параболического зеркала.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рисунке 4 представлены экспериментальные данные по изменению пропускания кремния при воздействии импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля 22 МВ/см. Изменение пропускания образца кремния связано с поглощением зондирующего излучения свободными носителями, которые были созданы при воздействии импульса ТГц-излучения. Поэтому изменение пропускания будет свидетельствовать и об изменении концентрации свободных носителей, в частности, их релаксации. Как видно из рисунка, при воздействии ТГц-импульса происходит резкое (в течении действия ТГц-импульса) уменьшение пропускания кремния на длине волны 1240 нм, что свидетельствует о генерации свободных носителей, а затем медленное восстановление пропускания за счет рекомбинации свободных носителей.

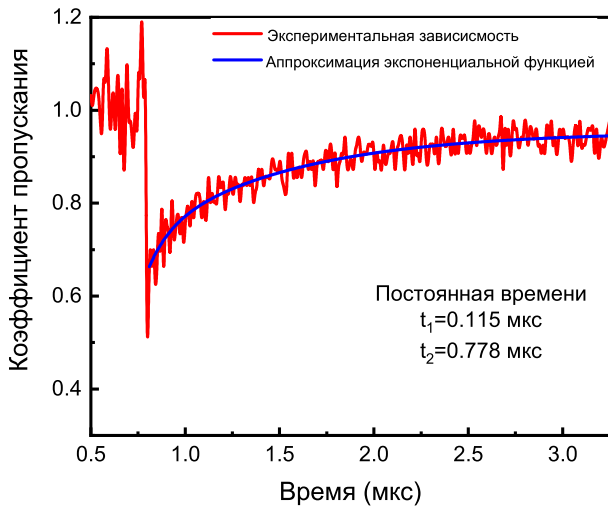


Рисунок 4. Зависимость коэффициента пропускания кремния на длине волны зондирующего импульса 1240 нм после воздействия импульса ТГц-излучения с напряженностью электрического поля 22 МВ/см. Значение коэффициента пропускания 1 соответствует начальному (невозбужденному) коэффициенту пропусканию кремния.

Расчеты, выполненные в работе [14], показывают, что концентрация генерируемых свободных носителей под действием ТГц-импульса с напряженностью 22 МВ/см распределена неоднородно в кремнии вдоль направления распространения ТГц-излучения. Максимальная концентрация свободных носителей достигается во входном слое (для ТГц-импульса) и минимальная — при выходе ТГц-импульса из образца. Полученные экспериментальные данные с помощью цуга фем-

тосекундных импульсов не позволяют получить информацию о пространственном распределении концентрации свободных носителей. Однако, может быть сделана оценка средней концентрации по толщине образца свободных носителей, генерируемых вдоль направления распространения ТГц-импульса, используя временную зависимость изменения пропускания кремниевой пластины (рисунок 4).

Экспериментальная кривая (красная линия) может быть аппроксимирована нелинейной функцией, состоящей из двух экспоненциальных зависимостей ($y = y_0 + A_1 \exp(-(x - x_0)/t_1) + A_2 \exp(-(x - x_0)/t_2)$) с постоянными времени 0.115 мкс и 0.778 мкс (синяя кривая, $y_0 = 1$, $x_0 = 0.82$, $A_1 = -0.074$, $A_2 = -0.213$).

Основной процесс рекомбинации свободных носителей в кремнии происходит за счет процесса Оже-рекомбинации, при котором время релаксации связано с концентрацией носителей следующим выражением:

$$\tau^{-1} = Cn^2, \quad (1)$$

где τ — время релаксации свободных носителей, C — коэффициент Оже-рекомбинации ($C = 2.8 \times 10^{-31} \text{ см}^6/\text{с}$ [21]), n — концентрация свободных носителей. На начальном участке пропускание изменяется с постоянной времени 115 нс, что соответствует концентрации носителей $5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Также оценка среднего значения концентрации генерируемых свободных носителей в кремнии была сделана на основе экспериментальных данных о начальном максимальном изменении коэффициента пропускания, которое составляло ~ 0.35 . При толщине пластины 235 мкм и коэффициенте пропускания $T = 0.65$ коэффициент поглощения, в соответствии с законом Бугера ($\alpha = -\ln T/l$, где l — толщина пластины кремния), составляет величину $\alpha = 18 \text{ см}^{-1}$. Показатель поглощения связан с концентрацией свободных носителей моделью Друде [22], и определяется следующим выражением:

$$\alpha_{\text{Drude}} = \frac{e^2 n_c \lambda^2}{4\pi^2 c^3 \epsilon n_0 m_e^* \tau_e}, \quad (2)$$

где e — заряд электрона, c — скорость света, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная, n_0 — показатель преломления материала, λ — длина волны излучения, n_c — концентрация свободных носителей, m_e^* — эффективная масса электрона ($m_e^* = 0.15 m_e$), τ_e — время между столкновениями. Концентрация свободных носителей при показателе поглощения $\alpha = 18 \text{ см}^{-1}$ составила величину $4 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, что хорошо коррелирует с определением концентрации по времени рекомбинации. При оценке концентрации в выражении (2) время между столкновениями было взято 10^{-14} с на основе квантово-механических расчетов скорости столкновений $v(\epsilon)$ как функции энергии электронов ϵ и импульса, представленных в [23, 24].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены экспериментальные исследования взаимодействия импульсов ТГц-излучения с напряженностью электрического поля 22 МВ/см на кремний р-типа.

Разработанная экспериментальная методика с применением в качестве зондирующего излучения задающего генератора с длиной волны излучения 1240 нм, фемтосекундные импульсы которого следуют с частотой 73 МГц, позволила за один импульс нагревающего ТГц-импульса зарегистрировать релаксацию свободных носителей на временном масштабе несколько микросекунд. По полученным экспериментальным данным были сделаны оценки среднего значения по толщине образца концентрации генерируемых свободных носителей вдоль направления распространения ТГц-импульса, которые показали, что при напряженности электрического поля ТГц-импульса 22 МВ/см средняя концентрация достигает величины $(4-5) \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, что хорошо коррелирует со средним значением концентрации по толщине образца $5.5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, оценки которого были получены по данным, представленным на рисунке 5 в работе [14].

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации “Росатом” в рамках научного проекта № 20-21-00043.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vicario C, Ovchinnikov A, Ashitkov S, Agranat M, Fortov V and Hauri C 2014 *Opt. Lett.* **39** 6632–35
2. Shalaby M and Hauri C P 2015 *Nat. Commun.* **6** 5976
3. Koulouklidis A D, Gollner C, Shumakova V, Fedorov V Y, Pugžlys A, Baltuška A and Tzortzakis S 2020 *Nat. Commun.* **11** 1–8
4. Fülöp J A, Ollmann Z, Lombosi C, Skrobel C, Klingebiel S, Pálfalvi L, Krausz F, Karsch S and Hebling J 2014 *Opt. Express* **22** 20155–163
5. Shen Y, Watanabe T, Arena D A, Kao C C, Murphy J B, Tsang T Y, Wang X J and Carr G L 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 043901
6. Kim K Y, Glowina J H, Taylor A J and Rodriguez G 2007 *Opt. Express* **15** 4577
7. Pijpers J J H, Ulbricht R, Tielrooij K J, Osherov A, Golan Y, Delerue C, Allan G and Bonn M 2009 *Nat. Phys.* **5** 811–14
8. Hadfield R H 2009 *Nat. Photonics* **3** 696–705
9. Lenzer M, Krüger J, Sartania S, Cheng Z, Spielmann C, Mourou G and Kautek F 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4076–79
10. Ghimire S, Dichiara A D, Sistrunk E, Agostini P, DiMauro L F and Reis D A 2011 *Nat. Phys.* **7** 138–41
11. Hirori H, Shinokita K, Shirai M, Tani S, Kadoya Y and Tanaka K 2011 *Nat. Commun.* **2** 8–13
12. Tarekgegne A T, Hirori H, Tanaka K, Iwaszczuk K and Jepsen P U 2017 *New J. Phys.* **19** 123018
13. Hoffmann M C, Hebling J, Hwang H Y, Yeh K L and Nelson K A 2009 *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **79** 3–6
14. Ovchinnikov A V, Chefonov O V, Agranat M B, Kudryavtsev A V, Mishina E D and Yurkevich A A 2021 *Opt. Express* **29** 26093–102
15. Yang Z, Mutter L, Stillhart M, Ruiz B, Aravazhi S, Jazbinsek M, Schneider A, Gramlich V and Günter P 2007 *Advanced Functional Materials* **17** 2018–23
16. Stillhart M, Schneider A and Günter P 2008 *J. Opt. Soc. Am. B* **25** 1914
17. Agranat M, Ashitkov S, Ivanov A, Konyashchenko A, Ovchinnikov A and Fortov V 2004 *Quantum Electron.* **34** 506–08
18. Vicario C, Jazbinsek M, Ovchinnikov A, Chefonov O, Ashitkov S, Agranat M and Hauri C 2015 *Opt. Express* **23** 4573–80
19. Chefonov O V, Ovchinnikov A V, Agranat M B and Stepanov A N 2019 *Opt. Lett.* **44** 4099–102
20. Chefonov O V, Ovchinnikov A V, Hauri C P and Agranat M B 2019 *Opt. Express* **27** 27273
21. Dziewior J and Schmid W 1977 *Appl. Phys. Lett.* **31** 346–48
22. Ashcroft N and Mermin N 1976 *Solid State Physics* (Saunders College Publishing)
23. Meng F, Thomson M D, Sernelius B E, Jörgen M and Roskos H G 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **91** 1–8
24. Kunikiyo T, Takenaka M, Kamakura Y, Yamaji M, Mizuno H, Morifuji M, Taniguchi K and Hamaguchi C 1994 *J. Appl. Phys. (Melville, NY, U. S.)* **75** 297–312

Повышение пространственного разрешения при измерении поверхностного заряда методом емкостных зондов

И. В. Селивонин и И. А. Моралев

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва
125412, Россия

E-mail: inock691@ya.ru

Статья поступила в редакцию 16 декабря 2022 г.

Аннотация. В работе предложена численная методика повышения пространственного разрешения при измерении плотности поверхностного заряда методом емкостных зондов, заключающаяся в решении обратной задачи электростатики для плоского распределения заряда. Показано, что подобный подход позволяет улучшить разрешение метода, когда характерные размеры неоднородности заряда меньше толщины диэлектрика. Методика применена для исследования распределения амплитуды заряда, переносимого на поверхность барьера в поверхностном барьерном разряде.
<https://doi.org/10.33849/2022213>

1. ВВЕДЕНИЕ

При развитии электрических разрядов в электродных конфигурациях, содержащих диэлектрические элементы, происходит зарядка диэлектрических поверхностей. Плотность поверхностного заряда и вид ее распределения является фактором, определяющим развитие разряда в таких конфигурациях. Количественные методы измерения заряда диэлектрика являются косвенными, и для обеспечения высокого разрешения требуют решения обратной задачи электростатики. В данной работе описывается такая методика применительно к плоским конфигурациям, характерным для поверхностного барьерного разряда (БР).

Барьерным называют импульсный или импульсно-периодический слаботочный разряд в конфигурациях, где электроды разделены диэлектриком [1]. Питается система, как правило, переменным напряжением 0.1–100 кВ синусоидальной либо прямоугольной формы с частотой от сотен Гц до нескольких МГц.

При атмосферном давлении барьерный разряд реализуется в виде отдельных токопроводящих каналов, которые называют микроразрядами (МР) [2]. Развитие микроразряда происходит в электрическом поле в промежутке, ограниченном (по крайней мере, с одной стороны) поверхностью диэлектрика. Заряженные частицы, дрейфуя в этом поле, заряжают поверхность диэлектрика. Электрическое поле такого поверхностного заряда экранирует внешнее, приложенное к электродам, в результате чего развитие микроразряда останавливается и происходит распад образовавшейся плазмы [3]. При дальнейшем увеличении напряжения, приложенного к электродам, напряженность результирующего электрического поля в промежутке снова достигает порогового пробивного значения, и стартует следующий МР [4, 5]. В результате этих процессов организуется импульсный режим горения разряда.

Таким образом, величина и распределение плотности заряда, оседающего на поверхности диэлектрического барьера, является одним из ключевых параметров, определяющих процессы развития БР. Стоит также отметить, что структура электрического поля в разрядном промежутке зачастую является основной величиной, определяющей эксплуатационные характеристики устройств на основе барьерного разряда, например, тягу плазменного актуатора на основе БР [6, 7]. Таким об-

разом, точное измерение распределений плотности поверхностного заряда является востребованной задачей, важной как в фундаментальных исследованиях, так и в рамках различных приложений.

2. МЕТОДИКА ПОВЫШЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ ИЗМЕРЯЕМЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ПЛОТНОСТИ ЗАРЯДА

Существует две группы техник визуализации распределений поверхностного заряда, заключающиеся в нанесении различных покрытий на заряжаемую поверхность — методы пылевых фигур и электрографии. При использовании метода пылевых фигур используется тонер или пыль различного состава, которая за счет электростатики распределяется по заряженной поверхности в соответствии с плотностью поверхностного заряда [8]. При электрографии используется специальный тонер, проявляя который можно получить картины распределений поверхностного заряда различного знака [9]. Методы пылевых фигур и электрографии позволяют построить качественные распределения поверхностного заряда с очень хорошим пространственным разрешением, позволяя детально проследить за путем распространения отдельных стримеров, наблюдать области прямого и обратного разряда в случае наносекундного БР и т.д. [10, 11]. Однако, эти методики по определению являются качественными и не позволяют получить величину плотности поверхностного заряда. Кроме того, важным ограничением применимости этих методов является тот факт, что их использование может проводиться только при отсутствии разряда и для оценки остаточного заряда поверхности.

Если говорить о количественных методах, следует отметить, что поверхностный заряд является косвенно измеряемой величиной. Непосредственно измеряется либо электрическое поле, создаваемое зарядом (в случае использования ячейки Поккельса [12–14]), либо электрический потенциал на секциях электрода, размещенного под поверхностью диэлектрика (при использовании емкостных зондов [15, 16]). В связи с этим возникает необходимость правильной интерпретации полученных данных. Следует также упомянуть, что существуют и иные техники использования емкостных зондов, когда зонд подводится с внешней стороны к поверх-

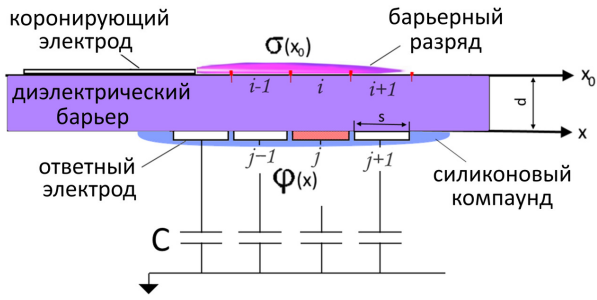


Рисунок 1. Измерение плотности заряда поверхности барьера с использованием секционированного ответного электрода.

ности барьера [6, 7]. При такой реализации достигается хорошая точность измерений и пространственное разрешение, однако, как и в случае использования методов электрографии и пылевых картин, полностью исключается возможность измерений *in situ*. В дальнейшем в тексте под методом емкостных зондов будет подразумеваться его вариант с использованием зондов под поверхностью барьера.

Суть этого метода заключается в следующем (см. рисунок 1). Электрод, расположенный под поверхностью диэлектрика, секционируется. Каждая секция соединяется через достаточно большую емкость C с землей. В этом случае каждый элемент диэлектрика вместе с емкостью зонда представляет собой емкостной делитель. Измеряя потенциал каждой секции, можно получить распределение заряда по поверхности диэлектрика $\sigma(x_0) = C\phi(x)$.

При конечных размерах секции полученное распределение $\phi(x)$ будет несколько отличаться от $\sigma(x_0)$ в связи с тем, что потенциал на j -той секции будет создаваться не только поверхностным зарядом на i -том участке поверхности барьера, находящимся непосредственно над секцией, но и зарядом на соседних $(i - 1)$ и $(i + 1)$ -ом участках барьера. Более далекие участки также будут вносить вклад в создание потенциала на j -той секции.

В работах, посвященных измерению распределенной плотности поверхностного заряда в БР или ее производных (распределения плотности тока или плотности мощности разряда) с применением метода емкостных зондов, например [15], молчаливо предполагается, что распределение измеренного распределения потенциала в точности соответствует искомому распределению заряда по поверхности. Данное приближение справедливо только для тонких диэлектриков, когда толщина диэлектрика меньше характерных размеров зонда: $d/s < 1$. В противном случае (толстый диэлектрик: $d/s \geq 1$) разрешение метода оказывается ограничено величиной d . Кажущимся решением проблемы может быть отделение сенсора от ответного электрода с помещением его в толщу диэлектрика максимально близко к поверхности, как было сделано, например, в работе [16], однако при этом возникает проблема достижения компромисса между возмущающим действием измерительной части на разряд при большой емкости зонда и малыми значениями измеряемых сигналов при малой емкости. Не возмущающей методика будет только в случае использования ответного электрода как сенсора.

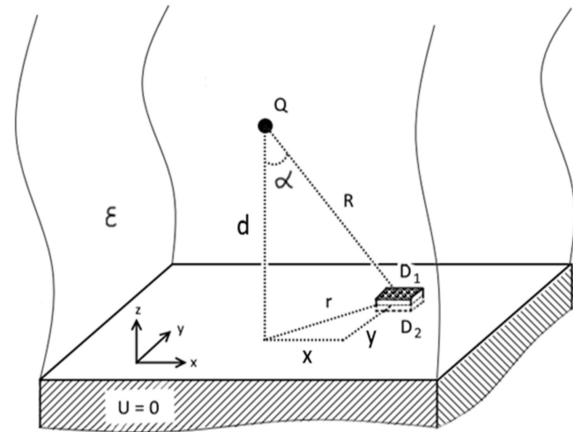


Рисунок 2. Расчетная конфигурация для определения ядра функции $PSF(x, y)$.

Повышение пространственного разрешения метода требует более аккуратного восстановления распределения поверхностного заряда по измеренному потенциалу электродов, то есть, решения обратной задачи электростатики.

В соответствии с принципом суперпозиции, распределение потенциала по электродам будет представлять собой свертку искомого распределения заряда на поверхности барьера и распределения потенциала, создаваемого на зондах точечным зарядом, помещенным на поверхность диэлектрика. В двумерном виде распределение потенциала в плоскости (x, y) будет записано как:

$$\phi(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} PSF(x - x_0, y - y_0) \sigma(x_0, y_0) dx_0 dy_0, \quad (1)$$

где $\phi(x, y)$ — полученное экспериментально распределение потенциала, $\sigma(x_0, y_0)$ — искомое распределение поверхностного заряда, $PSF(x - x_0, y - y_0)$ — распределение потенциала от единичного точечного заряда, которое можно рассматривать как сигнал на системе зондов при помещении точечного заряда на поверхность диэлектрика. Решение уравнения (1) может быть найдено методом обратного Фурье преобразования [17, 18]:

$$\sigma(x_0, y_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{\phi}(\omega_x, \omega_y)}{PSF(\omega_x, \omega_y)} e^{i(\omega_x x_0 + \omega_y y_0)} d\omega_x d\omega_y, \quad (2)$$

где тильда обозначает прямое Фурье-преобразование, а образы $\tilde{\phi}(\omega_x, \omega_y)$ и $\tilde{PSF}(\omega_x, \omega_y)$ задаются в частотном пространстве. Ядро уравнения $PSF(x, y)$ можно определить аналитически для приближенного случая, когда заряд находится не на поверхности диэлектрика, а в его толще (рисунок 2).

Рассмотрим элемент поверхности диэлектрика. Для электрического смещения в данном случае справедливо: $D_1 = D_2$. Расписав выражения для D_1 и D_2 , получаем:

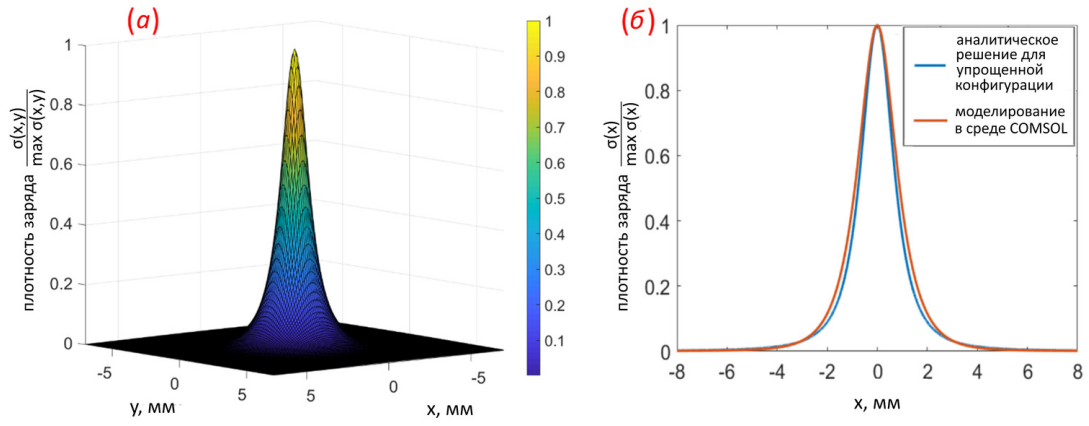


Рисунок 3. (а) Вид распределения потенциала на зондах, создаваемого существующим в толще диэлектрика на расстоянии от поверхности d точечным зарядом Q (вид функции (3)). (б) Сравнение полученной аналитической зависимости для приближенного случая (заряд в толще диэлектрика) и точного решения (заряд на другой поверхности диэлектрика), полученного в результате численного моделирования в среде COMSOL 5.6.

$$\varepsilon \left[\frac{Q}{R^2} \cos \alpha + 2\pi \sigma(x, y) \right] = 0. \quad (3)$$

Выразим R и $\cos \alpha$ через d , x и y . Получаем итоговое выражение:

$$\sigma(x, y) = \frac{Q}{2\pi} \frac{d}{(d^2 + x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (4)$$

Вид данной функции показан на рисунке 3(а). Соответствие между приближенным аналитическим расчетом и численным решением уравнения Пуассона (для полноценной задачи с двумя поверхностями) приведено на рисунке 3(б). Можно видеть, что различие между приближенным и точным решением невелико.

Функция распределения потенциала, создаваемого точечным зарядом на зондах, может быть задана в форме 4. Таким образом, для произвольного распределения заряда поверхности распределение потенциала по зондам может быть записано как

$$\phi(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d \cdot \sigma(x_0, y_0) dx_0 dy_0}{(d^2 + (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (5)$$

Задача (5) является математически некорректной, так как достоверное восстановление исходной размытой функции возможно только с конечной точностью. Для нахождения решения в этом случае используются методы регуляризации, ограничивающие мелкомасштабные осцилляции решения. В данной работе реализация алгоритма выполнялась с помощью встроенных в MATLAB функций для обработки изображений [19, 20]. Входными параметрами таких функций являются представленные в виде двумерной матрицы размытое изображение и функция размытия точки. В контексте данной работы этими параметрами выступали, соответственно, измеренное зондами распределение потенциала на зондах и аналитически полученная функ-

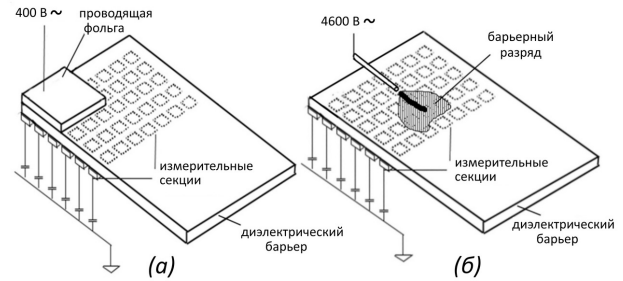


Рисунок 4. (а) Схематичное изображение тестовой конфигурации. Толщина диэлектрика 2 мм. (б) Схематичное изображение конфигурации поверхностного БР. Толщина диэлектрика 1 или 2 мм. Прямоугольниками обозначены измерительные секции ответного электрода.

ция распределения потенциала, создаваемого точечным зарядом (4). Дополнительным входным параметром является количество итераций, которое подбиралось вручную из соображений сходимости результатов реализации алгоритма. Для подавления краевых эффектов исходные распределения экстраполировались за границы области измерений на расстояния порядка размера ядра (см. [19–21]). При этом значения на границах расширенной расчетной области равнялись 0, в промежуточных точках использовалась линейная экстраполяция распределения. В результате параметрических исследований было выявлено, что наилучший результат получается при применении алгоритма Люси–Ричардсона [22] при количестве итераций 30–100.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Описанный метод был применен для исследования распределения заряда поверхности диэлектрика в электродной конфигурации поверхностного барьерного разряда. В качестве диэлектрика использовалась алундовая керамика марки ВК-94 толщиной 1 и 2 мм с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 10$. Секционированный электрод представлял собой матрицу размером 14x14, состоящую из измерительных секций размером 1x1 мм, подключенных к земле через емкости $C = 400$ пФ.

Измерение потенциала производилось путем последовательного измерения потенциала на секциях с помощью делителя с $R = 10 \text{ M}\Omega$, что позволило получить характерную временную постоянную схемы на уровне 5 мс. В эксперименте для каждой секции регистрировались амплитудные значения потенциала на секциях ответного электрода. Была проведена верификация метода на тестовом объекте (рисунок 4(а)), затем были получены распределения заряда поверхности в поверхностном барьерном разряде в конфигурации острие–плоскость (рисунок 4(б)).

3.1. Апробация методики на тестовом объекте

Описанная методика была апробирована на тестовом объекте, который представлял собой наклеенный на поверхность диэлектрика проводящий прямоугольный электрод, на который подавалось переменное синусоидальное напряжение частотой 150 кГц и амплитудой 400 В (рисунок 4(а)). Предполагалось, что растекания заряда по поверхности диэлектрика не происходит. На рисунке 5(б) приведены исходные результаты измерений распределения поверхностного заряда. Значения потенциала были пересчитаны в плотность поверхностного заряда. Можно видеть, что при прямом измерении распределение оказывается размыто приблизительно на величину толщины диэлектрика. При коррекции данных путем решения обратной задачи форма распределения восстанавливается до формы заданного на поверхности диэлектрика распределения потенциала (рисунок 5(в)). Дополнительная верификация метода восстановления была выполнена путем восстановления синтетических данных, полученных при решении в среде COMSOL 5.6 уравнения Пуассона для аналогичной тестовой конфигурации с бесконечной поверхностью диэлектрика. На рисунках 5(г) и 5(д) приведено теоретическое распределение потенциала на измерительных секциях, полученное в результате моделирования в среде COMSOL Multiphysics, и восстановленное распределение, соответственно. Можно видеть, что метод работает как в синтетических задачах, так и на реальных экспериментальных данных в присутствии конечной ошибки измерения.

3.2. Апробация методики на поверхностном БР

Апробация методики на БР выполнялась для поверхностной конфигурации острие–плоскость, где высоковольтным коронирующим электродом являлась медная проволока диаметром 0,5 мм. Разряд питался переменным синусоидальным напряжением частотой 150 кГц и амплитудой 4,6 кВ. Параметры питающего напряжения подбирались так, чтобы разрядный факел был стабилен в течение длительного времени (на временах более времени экспозиции съемки, что существенно превышало длительность измерения потенциала на секциях). Так как в рамках данной работы имелась возможность оптической регистрации только интегрального за много периодов питания свечения разряда (минимальная экспозиция ПЗС камеры на несколько порядков превышала период питающего разряд напряжения), то электрические измерения также производились интегрально — регистрировалась величина амплитуды перенесенного заряда, которая включала в себя переносимый за обе полярности заряд. На рисун-

ках 6(а) и 6(в) приведены результаты измерения распределений, полученных в случае диэлектриков с толщиной $d = 1$ и $d = 2$ мм, соответственно. На распределения наложены изображения разряда, полученные с помощью ПЗС камеры с экспозицией 30 мс. При толщине диэлектрика 1 мм полученное распределение (рисунок 6(а)) практически совпадает с видимой областью светимости разряда, в результате реализации алгоритма обработки (рисунок 6(б)) распределение практически не изменяется. При толщине 2 мм полученное распределение (рисунок 6(в)) оказывается существенно шире видимой области светимости разряда, что соответствует представлениям о размытии распределения вследствие вклада соседних областей диэлектрика. В результате восстановления (рисунок 6(г)) распределения наблюдается неплохое соответствие его с видимой областью светимости разряда.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана методика восстановления распределений заряда поверхности диэлектрика в барьерном разряде. Методика применима для обработки первичных данных, представляющих из себя распределение потенциала секционированных емкостных зондов на обратной стороне диэлектрика. Результатом работы алгоритма восстановления является приближение пространственного разрешения полученных распределений к пространственному разрешению измерительной части. Показано, что метод работает как в синтетических задачах, так и на реальных экспериментальных данных. Разработанный алгоритм дает существенный результат в случае, когда реальный масштаб неоднородности заряда либо масштаб разрешения сенсора оказываются меньше толщины диэлектрика, что было продемонстрировано на примере измеренных и восстановленных распределений плотности поверхностного заряда, оседающего на диэлектрике при горении факела поверхностного барьерного разряда на диэлектриках толщиной 1 и 2 мм.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Гос.задание № 075-01056-22-00)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Raizer Y P and E A J 1997 *Gas discharge physics* (Berlin: Springer)
2. Kogelschatz U, Eliasson B and Egli W 1997 *J. PHYS IV Fr.* **7** 1997405
3. Kogelschatz U 2002 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **30** 1400–8
4. Gibalov V and Pietsch G 2012 *Plasma Sources Sci. Technol.* **21** 024010
5. Brandenburg R 2017 *Plasma Sources Sci. Technol.* **26** 053001
6. Cristofolini A, Neretti G and Borghi C 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 073303
7. Cristofolini A, Borghi C and Neretti G 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 143307
8. Murooka Y, Takada T and Hidaka K 2001 *IEEE Electr. Insul. Mag.* **17** 6–16
9. Иванов А В и Ларионов В П 1970 *Электричество* **3** 71–74

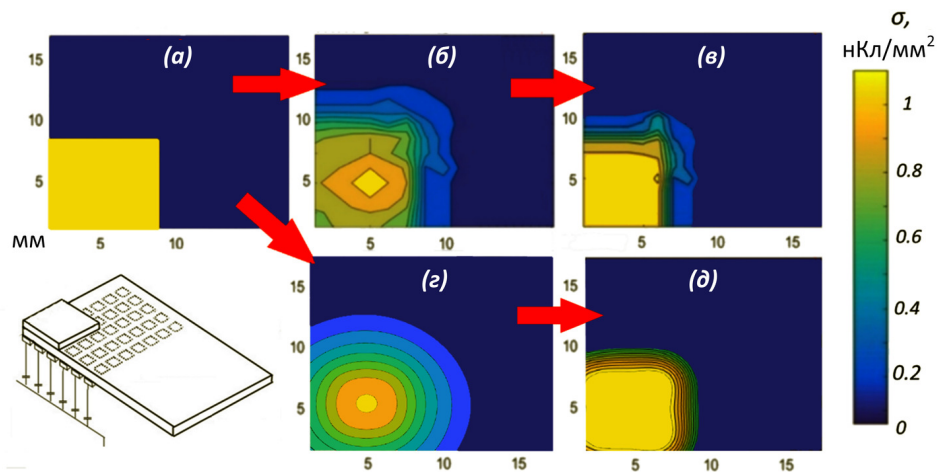


Рисунок 5. (а) Теоретическое распределение поверхностного заряда. (б) Измеренное распределение потенциала на измерительных сечениях. (в) Восстановленное с помощью разработанного алгоритма измеренное распределение. (г) Теоретическое распределение потенциала на измерительных сечениях, полученное путем моделирования в среде COMSOL 5.6. (д) Восстановленное теоретическое распределение.

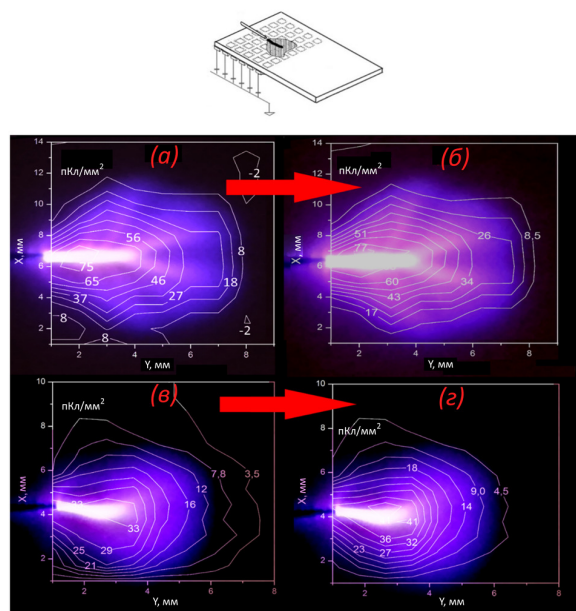


Рисунок 6. Изображения разряда, полученные с экспозицией 30 мс, и соответствующие им распределения поверхностного заряда, представленные в виде эквилиний его плотности: (а) измеренное при $d = 1$ мм, (б) восстановленное при $d = 1$ мм, (в) измеренное при $d = 2$ мм, (г) восстановленное при $d = 2$ мм.

<p>10. Sokolova M V <i>et al</i> 2019 <i>J. Phys. D. Appl. Phys.</i> 52 324001</p> <p>11. Gibalov V and Pietsch G 2000 <i>J. Phys. D. Appl. Phys.</i> 33 2618–36</p> <p>12. Stollenwerk L, Laven J and Purwins H G 2007 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 98 255001</p> <p>13. Kumada A, Chiba M and Hidaka K 1998 <i>J. Appl. Phys.</i> 84 3059</p> <p>14. Stollenwerk L 2009 <i>New J. Phys.</i> 11 103034</p> <p>15. Тыл С <i>et al</i> 2021 <i>Rev. Sci. Instrum.</i> 92 053552</p> <p>16. Houtp A and Leonov S 2015 <i>J. Appl. Math. Phys.</i> 03 1062–71</p> <p>17. Манжиров А В и Полянин А Д 1999 <i>Методы решений</i></p>	<p><i>интегральных уравнений</i> (Москва: Факториал)</p> <p>18. Pratt W K 2001 <i>Digital Image Processing</i> (Los Altos, California: PixelSoft)</p> <p>19. Журавель И М 2015 Краткий курс теории обработки изображений URL http://hub.exponenta.ru/post/kratkiy-kurs-teorii-obrabotki-izobrazheniy734</p> <p>20. Дьяконов В и Абраменкова И 2002 <i>MATLAB. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник</i> (Санкт-Петербург: Питер)</p> <p>21. Bates R H T and McDonnell M J 1986 <i>Image Restoration and Reconstruction</i> (Oxford: Oxford University Press)</p> <p>22. Biggs D S C and Andrews M 1997 <i>Appl. Opt.</i> 36 1766–75</p>
---	--