



ISSN 2072-8387 (print)
ISSN 2310-7251 (online)



Вестник

МОСКОВСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
ОБЛАСТНОГО
УНИВЕРСИТЕТА

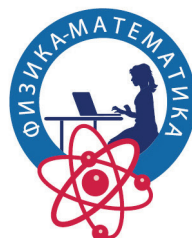
Серия

**Физика-
МАТЕМАТИКА**

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕЧЕНИЯ
НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ
В ТУРБУЛЕНТНОМ ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ,
ВЛИЯЮЩИХ НА ОБРАЗОВАНИЕ ГРАННЫХ
ФОРМ РОСТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ

ПЕРВИЧНЫЕ ЧЁРНЫЕ ДЫРЫ, ДИФфуЗНОЕ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЕ
ВСЕЛЕННОЙ И ВОЗМОЖНАЯ ПРИРОДА ТЁМНОЙ МАТЕРИИ



2020/ № 4

ВЕСТНИК
МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ОБЛАСТНОГО УНИВЕРСИТЕТА

ISSN 2072-8387 (print)

2020 / № 4

ISSN 2310-7251 (online)

серия

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

Рецензируемый научный журнал. Основан в 1998 г.

Журнал «Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика» включён Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» по следующим научным специальностям: 01.04.02 – Теоретическая физика (физико-математические науки); 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки) (См.: Список журналов на сайте ВАК при Минобрнауки России).

The peer-reviewed journal was founded in 1998

«Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics» is included by the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation into "the List of leading reviewed academic journals and periodicals recommended for publishing in corresponding series basic research thesis results for a Ph.D. Candidate or Doctorate Degree" on the following scientific specialties: 01.04.02 – Theoretical physics (physical-mathematical sciences); 01.04.07 – Physics of the condensed state (physical-mathematical sciences) (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

ISSN 2072-8387 (print)

2020 / № 4

ISSN 2310-7251 (online)

series

PHYSICS AND MATHEMATICS

BULLETIN OF THE MOSCOW REGION
STATE UNIVERSITY

Учредитель журнала

«Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика»

Государственное образовательное учреждение высшего образования Московской области

Московский государственный областной университет

Выходит 4 раза в год

Редакционная коллегия

Главный редактор:

Бугаев А. С. — д. ф.-м. н., академик РАН, Московский физико-технический институт (Государственный университет)

Заместитель главного редактора:

Жачкин В. А. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный областной университет

Ответственный секретарь:

Васильчикова Е. Н. — к. ф.-м. н., доц., Московский государственный областной университет

Члены редакционной коллегии:

Беляев В. В. — д. т. н., проф., Московский государственный областной университет;

Боголюбов Н. Н. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Бугримов А. Л. — д. т. н., проф., Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

Геворкян Э. В. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный областной университет;

Гладков С. О. — д. ф.-м. н., проф., Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет);

Емельяненко А. В. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Калашников Е. В. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный областной университет;

Осипов М. А. — д. ф.-м. н., проф., Университет Стратклайд (Великобритания);

Рыбаков Ю. П. — д. ф.-м. н., проф., Российский университет дружбы народов;

Чаругин В. М. — д. ф.-м. н., проф., Московский педагогический государственный университет;

Чигринов В. Г. — д. ф.-м. н., проф., Гонконгский университет науки и технологий (Китай)

ISSN 2072-8387 (print)

ISSN 2310-7251 (online)

Рецензируемый научный журнал «Вестник московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика» публикует статьи по математическим проблемам термодинамики, кинетики и статистической физики; теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем; изучению различных состояний вещества и физических явлений в них; статистической физике и кинетической теории равновесных и неравновесных систем; теоретическому и экспериментальному исследованию физических свойств неупорядоченных неорганических систем; изучению экспериментального состояния конденсированных веществ и фазовых переходов в них. Журнал адресован ученым, докторантам, аспирантам и всем, интересующимся достижениями физико-математических наук.

Журнал «Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Физика-математика» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Регистрационное свидетельство ПИ № ФС 77-73344.

Индекс серии «Физика-математика» по Объединенному каталогу «Пресса России» 40723

Журнал включён в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), имеет полнотекстовую сетевую версию в Интернете на платформе Научной электронной библиотеки (www.elibrary.ru), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (<https://cyberleninka.ru>), а также на сайте Московского государственного областного университета (www.vestnik-mgou.ru).

При цитировании ссылка на конкретную серию «Вестника Московского государственного областного университета» обязательна. Публикация материалов осуществляется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

Ответственность за содержание статей несут авторы. Мнение автора может не совпадать с точкой зрения редколлегии серии. Рукописи не возвращаются.

Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. — 2020. — № 4. — 96 с.

© МГОУ, 2020.

© ИИУ МГОУ, 2020.

Адрес Отдела по изданию научного журнала «Вестник Московского государственного областного университета»

г. Москва, ул. Радио, д.10А, офис 98

тел. (495) 723-56-31; (495) 780-09-42 (доб. 6101)

e-mail: info@vestnik-mgou.ru; сайт: www.vestnik-mgou.ru

Founder of journal
«Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics»
Moscow Region State University

———— Issued 4 times a year ————

Editorial board

Editor-in-chief:

A. S. Bugaev – Doctor of Physics and Mathematics, Academician of RAS, Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

Deputy editor-in-chief:

V. A. Zhachkin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Region State University

Executive secretary:

E. N. Vasilchikova – Ph.D. in Physics and Mathematics, Associate Professor, Moscow Region State University

Members of Editorial Board:

V. V. Belyaev – Doctor of Technical Sciences, Professor, Moscow Region State University;

N. N. Bogolyubov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

A. L. Bugrimov – Doctor of Technical Sciences, Professor, Kosygin State University of Russia;

E. V. Gevorkyan – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Region State University;

S. O. Gladkov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University);

A. V. Emelyanenko – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

E. V. Kalashnikov – Doctor of Physics and Mathematics, Moscow Region State University;

M. A. Osipov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Strathclyde University (Glasgow, UK);

Yu. P. Rybakov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, RUDN University;

V. M. Charugin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State Pedagogical University;

V. G. Chigrinov – Hong Kong University of Science and Technology (China)

ISSN 2072-8387 (print)

ISSN 2310-7251 (online)

The reviewed scientific journal “Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics” publishes articles on mathematical problems of thermodynamics, kinetics and statistical physics; the theory of the condensed state of classical and quantum, macroscopic and microscopic systems; the study of various states of substance and physical phenomena in them; statistical physics and the kinetic theory of equilibrium and non-equilibrium systems; theoretical and experimental research of physical features of disordered inorganic systems; the study of the experimental state of condensed substances and phase transitions in them. The journal is addressed to scientists, doctoral students, PhD students and everyone interested in the achievements of physical and mathematical sciences.

The series “Physics and Mathematics” of the Bulletin of the Moscow Region State University is registered in Federal service on supervision of legislation observance in sphere of mass communications and cultural heritage protection. The registration certificate ПИ № 00С 77 – 73344.

Index series «Physics and Mathematics» according to the union catalog «Press of Russia» 40723

The journal is included into the database of the Russian Science Citation Index, has a full text network version on the Internet on the platform of Scientific Electronic Library (www.elibrary.ru), and from August 2017 on the platform of the Scientific Electronic Library “CyberLeninka” (<https://cyberleninka.ru>), as well as at the site of the Moscow Region State University (www.vestnik-mgou.ru)

At citing the reference to a particular series of «Bulletin of the Moscow Region State University» is obligatory. Scientific publication of materials is carried out in accordance with the license of Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

The authors bear all responsibility for the content of their papers. The opinion of the Editorial Board of the series does not necessarily coincide with that of the author Manuscripts are not returned.

Bulletin of the Moscow State Regional University. Series: Physics and Mathematics. – 2020. – № 4. – 96 p.

© MRSU, 2020.

© Moscow Region State University Editorial Office, 2020.

The Editorial Board address:

Moscow Region State University

10A Radio st., office 98, Moscow, Russia

Phones: (495) 723-56-31; (495) 780-09-42 (add. 6101)

e-mail: info@vestnik-mgou.ru; site: www.vestnik-mgou.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Соколов В. В. ИЗОТЕРМИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП ВИРТУАЛЬНЫХ РАБОТ ДЛЯ УПРУГОГО ТВЁРДОГО ТЕЛА6

Жаров В. А., Липатов И. И., Селим Р. С. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕЧЕНИЯ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ТУРБУЛЕНТНОМ ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ.....12

Юсим В. А., Саркисов С. Э., Калимуллин Р. К, Петров С. В., Клосс Ю. Ю. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ОБРАЗОВАНИЕ ГРАННЫХ ФОРМ РОСТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ.....28

Каримов Ф. А., Юшканов А. А. ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКОГО СЛОЯ МЕТАЛЛА С УЧЁТОМ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ЗЕРКАЛЬНОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТЬ49

Чаругин В. М. ПЕРВИЧНЫЕ ЧЁРНЫЕ ДЫРЫ, ДИФфуЗНОЕ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЕ ВСЕЛЕННОЙ И ВОЗМОЖНАЯ ПРИРОДА ТЁМНОЙ МАТЕРИИ.66

Соломатин А. С., Царева Е. В., Богданов Д. Л., Барабанова Н. Н., Усачев В. В., Данкин Д. Г., Бугримов А. Л. НОВЫЕ ПРИНЦИПЫ ОРГАНИЗАЦИИ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТНЫХ ПЕРЕНАСТРАИВАЕМЫХ (ПЕРЕЗАПИСЫВАЕМЫХ) СВЕТООРИЕНТИРУЕМЫХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ФАЗОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.....73

Демидов И. В., Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПАР МОЛЕКУЛ В УДАРНОЙ ВОЛНЕ86

ПАМЯТИ ГЕВОРКЯНА ЭДВАРДА ВИГЕНОВИЧА95

CONTENTS

PHYSICS

V. Sokolov. THE ISOHERMAL PRINCIPLE OF VIRTUAL WORK FOR AN ELASTIC SOLID	6
V. Zharov, I. Lipatov, R. Selim. SPECTRAL CHARACTERISTICS OF AN INCOMPRESSIBLE FLUID FLOW IN TURBULENT BOUNDARY LAYERS	12
V. Yusim, S. Sarkisov, R. Kalimullin, S. Petrov, Y. Kloss. MODELING OF THERMAL PROCESSES AFFECTING THE ORIGIN OF FACIAL GROWTH FORMS IN SINGLE CRYSTALS	28
F. Karimov, A. Yushkanov. CONDUCTIVITY OF A THIN METAL LAYER TAKING INTO ACCOUNT THE DEPENDENCE OF THE SPECULARITY COEFFICIENT ON THE ANGLE OF THE ELECTRON'S INCIDENCE ON THE SURFACE	49
V. Charugin. PRIMORDIAL BLACK HOLES, DIFFUSE GAMMA RADIATION OF THE UNIVERSE AND POSSIBLE NATURE OF DARK MATTER	66
A. Solomatin, Ye. Tsareva, D. Bogdanov, N. Barabanova, V. Usachev, D. Dankin, A. Bugrimov. NEW PRINCIPLES FOR THE ORGANIZATION OF LIQUID CRYSTAL COMPOSITE RETURNABLE (REWRITABLE) LIGHT-ORIENTED GEOMETRIC PHASE ELEMENTS	73
I. Demidov, M. Kuznetsov, M. Kuzmin, Ju. Kuleshova. ASYMPTOTIC APPROXIMATION FOR THE DISTRIBUTION OF PAIRS OF MOLECULES IN A SHOCK WAVE	86
IN MEMORY OF GEVORKYAN EDVARD VIGENOVICH.....	95

УДК 538.951

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-6-11

ИЗОТЕРМИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП ВИРТУАЛЬНЫХ РАБОТ ДЛЯ УПРУГОГО ТВЁРДОГО ТЕЛА

Соколов В. В.

*МИРЭА – Российский технологический университет
119454, г. Москва, проспект Вернадского, д. 78, Российская Федерация*

Аннотация

Цель исследования – вывод изотермического принципа виртуальных работ для упругого твёрдого тела.

Процедура и методы. Под упругим телом будем понимать математическую модель сплошной среды, в которой удельная плотность свободной энергии является функцией только температуры и производных векторов смещений. В рамках равновесной термодинамики получен изотермический принцип виртуальных работ для упругого твёрдого тела.

Результаты. Выведен изотермический принцип виртуальных работ для упругого твёрдого тела. Получены условия механического равновесия внутри и на поверхности упругого твёрдого тела.

Теоретическая и практическая значимость. При заданной функции удельной плотности свободной энергии и известном значении температуры возможно определить зависимость функций смещений от координат, которые характеризуют деформированное состояние рассматриваемого упругого твёрдого тела.

Ключевые слова: упругое твёрдое тело, виртуальная работа, виртуальное смещение, лагранжева вариация, удельная свободная энергия, соотношение Гиббса, условие равновесия

THE ISOHERMAL PRINCIPLE OF VIRTUAL WORK FOR AN ELASTIC SOLID

V. Sokolov

*MIREA – Russian Technological University
prosp. Vernadskogo 78, 119454 Moscow, Russian Federation*

© CC BY Соколов В. В., 2020.

Abstract

The aim of the research is the derivation of the isothermal principle of virtual work for an elastic solid.

Methodology. By an elastic solid we mean a mathematical model of a continuous medium, in which the specific density of free energy is a function of only temperature and derivatives of displacement vectors. In the framework of equilibrium thermodynamics, the isothermal principle of virtual work for an elastic solid is obtained.

Results. The isothermal principle of virtual work for an elastic solid is derived. The conditions for mechanical equilibrium inside and on the surface of an elastic solid are obtained.

Research implications. For a given function of the specific density of free energy and the known value of the temperature, it is possible to determine the dependence of the displacement functions on the coordinates that characterize the deformed state of the considered elastic solid.

Keywords: elastic solid, virtual work, virtual displacement, Lagrangian variation, free energy density, Gibbs relation, equilibrium condition.

Введение

В статье [1] был дан вывод изотермического принципа виртуальных работ, когда выполнено условие теплового равновесия, то есть температура T во всех точках тела одинакова и остаётся всё время неизменной, и тело подвергается действию заданных внешних сил с объёмной плотностью $\vec{f}$ и с поверхностной плотностью $\vec{F}$, Ψ – свободная энергия тела.

$$\delta\Psi = \int_V \rho (f_k \delta^* q_k) dV + \int_\Sigma (F_k \delta^* q_k) d\Sigma, \quad (1)$$

Виртуальное смещение индивидуальных точек сплошного тела из начального состояния описывается лагранжевой вариацией координат $\delta^* \vec{q}$, ρ – плотность массы тела.

В статье [1] вариационное уравнение (1) было применено для сжимаемого жидкого сплошного тела.

В [2] указывается, что в большинстве учебников, например [3–5], изложение теории упругости ограничивается определением тензора деформации (только для бесконечно малых деформаций) и тензора напряжений и связующим их эмпирическим соотношением, то есть законом Гука.

В другом подходе [6–9] термодинамическое состояние твёрдого тела определяется через компоненты тензора деформаций. Основными уравнениями теории упругости здесь являются выражения термодинамических потенциалов через компоненты тензора деформаций.

Постановка задачи исследования

Целью данной статьи является формулировка изотермического принципа виртуальных работ для упругого твёрдого тела.

Далее под упругим телом будем понимать математическую модель сплошной среды, в которой удельная плотность свободной энергии ψ является функцией только температуры и производной векторов смещений $q_{n,m}$, характеризующих деформированное состояние упругого твёрдого тела:

$$\psi(T, q_{n,m}).$$

Вывод изотермического принципа виртуальных работ для упругого твёрдого тела

В такой модели свободная энергия Ψ такого тела является интегралом от удельной плотности удельной свободной энергии:

$$\Psi = \int_V \rho \psi(T, q_{n,m}) dV. \quad (1)$$

Приращение свободной энергии упругого тела на виртуальном смещении равно:

$$\delta \Psi = \int_V \rho \delta^* \psi(T, q_{n,m}) dV \quad (2)$$

где $\delta^* \psi$ – лагранжева вариация удельной плотности свободной энергии, равная:

$$\delta^* \psi = \frac{\partial \psi}{\partial q_{n,m}} \delta^* q_{n,m}.$$

Следовательно:

$$\delta \Psi = \int_V \rho \frac{\partial \psi}{\partial q_{n,m}} \delta^* q_{n,m} dV.$$

Выразим вариацию производной векторов смещений $\delta^* q_{n,m}$ через $\delta^* q_i$:

$$\delta^* \left(\frac{\partial q_n}{\partial x_m} \right) = \frac{\partial (\delta^* q_i)}{\partial x_m} - \frac{\partial q_n}{\partial x_i} = \left(\delta_{ni} - \frac{\partial q_n}{\partial x_i} \right) \frac{\partial (\delta^* q_i)}{\partial x_m}.$$

Отсюда получим:

$$\delta^* q_{n,m} = (\delta_{ni} - q_{n,i}) \frac{\partial (\delta^* q_i)}{\partial x_m}.$$

В результате уравнение принципа виртуальных работ (1) примет вид:

$$\int_V \rho \frac{\partial \psi}{\partial q_{n,q}} (\delta_{ni} - q_{n,i}) \frac{\partial (\delta^* q_i)}{\partial x_m} dV = \int_V \rho (f_k \delta^* q_k) dV + \int_{\Sigma} (F_k \delta^* q_k) d\Sigma.$$

Для получения вариационного условия равновесия преобразуем левую часть к виду:

$$\begin{aligned}
& \int_V \rho \frac{\partial \Psi}{\partial q_{n,q}} (\delta_{ni} - q_{n,i}) \frac{\partial (\delta^* q_i)}{\partial x_m} dV = \\
& = \int_{\Sigma} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial q_{n,q}} (\delta_{ni} - q_{n,i}) n_m \delta^* q_i d\Sigma - \\
& - \int_V \frac{\partial}{\partial x_m} \left[\rho \frac{\partial \Psi}{\partial q_{n,q}} (\delta_{ni} - q_{n,i}) \right] \delta^* q_i dV.
\end{aligned}$$

Здесь n_m означает компоненту внешней нормали к поверхности Σ объёма V .

Далее для компактности записи введём обозначение для тензора внутренних напряжений:

$$P_{im} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial q_{n,q}} (\delta_{ni} - q_{n,i}). \quad (3)$$

В переменных Лагранжа плотность массы определяется формулой:

$$\rho = \rho_0 \det \|\delta_{ij} - q_{i,j}\|,$$

в которой ρ_0 – произвольная константа.

В результате вариационное условие равновесия для обратимых виртуальных перемещений примет вид:

$$\int_{\Sigma} P_{im} n_m \delta^* q_i d\Sigma - \int_V \frac{\partial P_{im}}{\partial x_m} \delta^* q_i dV = \int_V \rho (f_i \delta^* q_i) dV + \int_{\Sigma} (F_i \delta^* q_i) d\Sigma. \quad (4)$$

Полученное равенство должно выполняться при произвольных смещениях $\delta^* \vec{q}$. Приравнявая нулю коэффициенты при смещениях $\delta^* \vec{q}$ в объёмных интегралах (4), приходим к следующему условию, которое должно выполняться внутри упругого твёрдого тела:

$$\frac{\partial P_{im}}{\partial x_m} = -\rho f_i. \quad (5)$$

Приравнявая нулю коэффициенты при смещениях $\delta^* \vec{q}$ в поверхностных интегралах (4), получим условие, которое должно выполняться на поверхности упругого твёрдого тела:

$$P_{im} n_m = F_i. \quad (6)$$

Согласно термодинамическому тождеству Гиббса [7], для дифференциала внутренней энергии ϵ выполняется соотношение:

$$d\epsilon = Tds + \frac{1}{\rho} \tilde{P}_{nm} dq_{n,m},$$

где s – удельная энтропия и введено обозначение:

$$\tilde{P}_{nm} = \rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial q_{n,q}} \right)_s.$$

В результате для дифференциала удельной свободной энергии $\psi = \varepsilon - Ts$ получаем соотношение:

$$d\psi = -sdT + \frac{1}{\rho} P_{nm} dq_{n,m},$$

в котором:

$$P_{nm} = \rho \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_{n,q}} \right)_s.$$

Заключение

В рамках равновесной термодинамики выведен изотермический принцип виртуальных работ для упругого твёрдого тела. Получены условия механического равновесия внутри и на поверхности упругого твёрдого тела.

Показано, что при заданной функции удельной плотности свободной энергии Ψ и известном значении температуры T возможно определить зависимость функций смещений от координат $q_i(x_m)$, которые характеризуют деформированное состояние рассматриваемого упругого твёрдого тела.

Статья поступила в редакцию 21.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Соколов В. В. Изотермический принцип виртуальных работ // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2019. № 3. С. 80–84.
2. Goldsmid H. J. Problems in solid state physics. New York: Academic Press, 1968. 468 p.
3. Reddy J. N. An introduction to continuum mechanics. Cambridge: Cambridge University Press, 2013. 315 p.
4. Oliver X., Agelet de Saracibar C. Continuum Mechanics for Engineers. Theory and Problems. USA: CRC Press, 2017. 550 p.
5. Mase G. T., Smelser R. E., Rossmann J. S. Continuum mechanics for engineers. Boca Raton, FL: CRC Press, 2020. 450 p.
6. Толмачев В. В., Головин А. М., Потапов В. С. Термодинамика и электродинамика сплошной среды. М.: МГУ, 1986. 312 с.
7. Wilmanski K. Fundamentals of solid mechanics. Pavia, IUSS Press, 2010. 183 p.
8. Жермен П. Курс механики сплошных сред: Общая теория / пер. с фр. В. В. Федудова. М.: Высшая школа, 1983. 399 с.
9. Базаров И. П., Геворкян Э. В., Николаев П. Н. Термодинамика и статистическая физика. М.: МГУ, 1986. 312 с.

REFERENCES

1. Sokolov V. V. [The isothermal principle of virtual work]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow State Regional University. Series: Physics and Mathematics], 2019, no. 3, pp. 80–84.
2. Goldsmid H. J. Problems in solid state physics. New York, Academic Press Publ., 1968. 468 p.

3. Reddy J. N. An introduction to continuum mechanics. Cambridge, Cambridge University Press Publ., 2013. 315 p.
4. Oliver X. Agelet de Saracibar C. Continuum Mechanics for Engineers. Theory and Problems. USA, CRC Press Publ., 2017. 550 p.
5. Mase G. T., Smelser R. E., Rossmann J. S. Continuum mechanics for engineers. Boca Raton, FL, CRC Press Publ., 2020. 450 p.
6. Tolmachev V. V., Golovin A. M., Potapov V. S. *Termodinamika i elektrodinamika sploshnoi sredy* [Thermodynamics and electrodynamics of continuous media]. Moscow, Moscow State University Publ., 1986. 312 p.
7. Wilmanski K. Fundamentals of solid mechanics. Pavia, IUSS Press Publ., 2010. 183 p.
8. Germain P. *Cours de mecanique des milieux continus. Tome I. Theorie generale* (Russ. ed.: Fedulov V. V., transl. *Kurs mekhaniki sploshnykh sred: Obshchaya teoriya*. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1983. 399 p.)
9. Bazarov I. P., Gevorkyan E. V., Nikolaev P. N. *Termodinamika i statisticheskaya fizika* [Thermodynamics and statistical physics]. Moscow, Moscow State University Publ., 1986. 312 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Соколов Виктор Васильевич – доктор физико-математических наук, советник по научной работе МИРЭА – Российского технологического университета;
e-mail: v_sokolov@mirea.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Victor V. Sokolov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Science Advisor, MIREA – Russian Technological University;
e-mail: v_sokolov@mirea.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Соколов В. В. Изотермический принцип виртуальных работ для упругого твёрдого тела // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2020. № 4. С. 6–11.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-6-11

FOR CITATION

Victor V. Sokolov. The isothermal principle of virtual work for an elastic solid. In: *Bulletin of Moscow State Regional University. Series: Physics and Mathematics*, 2020. no. 4. pp. 6–11.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-6-11

УДК 533.6

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-12-27

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕЧЕНИЯ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ТУРБУЛЕНТНОМ ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ

Жаров В. А.¹, Липатов И. И.^{1,2}, Селим Р. С.²

¹ *Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора*

Н. Е. Жуковского

140180, г. Жуковский, Московская область, ул. Жуковского, д. 1, Российская Федерация

² *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*

141701, г. Долгопрудный, Московская область, Институтский пер., д. 9, Российская Федерация

Аннотация

Цель работы – исследование модели развитого турбулентного течения несжимаемой жидкости в пограничном слое на пластине, основанное на анализе уравнений Навье-Стокса, описывающих поведение амплитуд волн Толлмина-Шлихтинга в одномодовом приближении.

Процедура и методы. Рассмотрен слабонелинейный вариант волновой модели развитого турбулентного пограничного слоя. Определены дисперсионные характеристики волн наименее затухающей моды, проанализированы условия множественного 3-х волнового резонанса этой моды волн Толлмина-Шлихтинга. На основе метода многих масштабов получены уравнения для когерентной части.

Результаты. В дискретном представлении когерентной структуры показано, что сумма квадратов модулей амплитуд волн в состоянии множественного 3-х волнового резонанса, умноженных на действительные весовые множители, является инвариантом исходной динамической системы.

Теоретическая и практическая значимость. Инвариант динамической системы нормируется к единице, и формулируется теория Биркгофа–Хинчина.

Ключевые слова: множественный 3-волновой резонанс, несжимаемая вязкая жидкость, турбулентный пограничный слой, волны Толлмина-Шлихтинга, когерентные структуры

Благодарность. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-08-00790.

SPECTRAL CHARACTERISTICS OF AN INCOMPRESSIBLE FLUID FLOW IN TURBULENT BOUNDARY LAYERS

V. Zharov¹, I. Lipatov^{1,2}, R. Selim²

¹ *Central Aerohydrodynamic Institute*

ul. Zhukovskogo 1, 140180 Zhukovsky, Moscow region, Russian Federation

² *Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)
Institutskii per. 9, 141701 Dolgoprudnyi, Moscow region, Russian Federation*

Abstract

The aim is to study a model of a developed turbulent flow of an incompressible fluid in a boundary layer on a plate. The study is based on the analysis of the Navier–Stokes equations describing the behaviour of Tollmien–Schlichting wave amplitudes in a single-mode approximation.

Methodology. A weakly nonlinear version of the wave model of a developed turbulent boundary layer is considered. The dispersion characteristics of the waves of the least damped mode are determined, and the conditions of multiple three-wave resonance of this mode of Tollmien–Schlichting waves are analyzed. Equations for the coherent part are obtained using the many-scale method.

Results. In the discrete representation of the coherent structure, it is shown that the sum of the squares of the moduli of the wave amplitudes in the state of multiple three-wave resonance, multiplied by real weight factors, is an invariant of the original dynamical system.

Research implications. The invariant of the dynamic system is normalized to unity, and the Birkhoff–Khinchin theory is formulated.

Keywords: three-wave resonance, incompressible viscous liquid, turbulent boundary layer, Tollmien–Schlichting waves, coherent structures.

Acknowledgments. The study was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Scientific Project No. 20-08-00790).

Введение

На основе большого объёма экспериментальных данных в работах [1–4] были проанализированы физические процессы в ламинарных и турбулентных пограничных слоях. В работе [5], показано, что развитый турбулентный пограничный слой содержит организованные вихревые структуры, определяющие многие физические свойства этих течений [6]. Методы идентификации особенностей этих течений были предложены в работах [7; 8]. В работах [9; 10] исследованы механизмы формирования когерентных структур и генерации поперечных структур (поточковых вихрей) в задаче сверхзвукового обтекания плоской пластины при падении на неё ударной волны.

В случае турбулентного пограничного слоя рассматриваются модели, основанные на волноводном представлении динамики пульсации в турбулентном пограничном слое. Полученная таким образом система уравнений очень хорошо описывает свойство развитого турбулентного пограничного слоя. Таким образом, модель заслуживает серьёзного обоснования, которое может быть достигнуто за счёт использования более точных численных методов и привлечения методов теории динамических систем. Эти методы требуют знания современной математики [11].

Тем не менее, можно воспользоваться формулировкой известной теоремы Биркгофа–Хинчина, которая была представлена в работе А. Н. Колмогорова [12] и в доступной форме даёт условия существования средних для динамических систем определённого вида. Далее приводится теоретическая постановка задачи описания когерентной структуры [13] в развитом турбулентном пограничном

слое (ТПС) и показывается, что с точки зрения теоремы Биркгофа-Хинчина результаты, полученные в ранних работах [13], вполне обоснованы.

В настоящей работе используется спектр собственных значений уравнения Орра-Зоммерфельда на профиле развитого турбулентного пограничного слоя [14], полученный с помощью метода коллокации, основанного на многочленах Чебышева [15]. В разделе 2 рассмотрена теоретическая часть задачи, связанная с решением уравнения для когерентной структуры, некоторым приближением которого является совокупность гармоник в состоянии 3-х волнового резонанса. Динамика гармоник описывается автономной системой обыкновенных дифференциальных уравнений, решение которой финитно в некоторой области пространства волновых векторов.

Инвариант этой системы, который, благодаря инвариантности исходного уравнения относительно простого преобразования подобия, в масштабе t_1 может быть нормирован на 1, что и позволяет применить теорему Биркгофа-Хинчина [12]. В результате можно утверждать, что определённые ранее [13] средние по времени величины квадратов модулей амплитуд существуют и допускают корректную численную оценку. Кроме того, проведено сравнение средних квадратов амплитуд по времени и по репрезентативному набору начальных данных.

Постановка задачи

В работе [13], по аналогии с волноводной моделью [16], из уравнений Навье-Стокса получено нелинейное уравнение для Фурье-составляющей вертикальной скорости волн Толлмина-Шлихтинга, описывающей пульсации в пограничном слое, в одномодовом приближении. Тогда уравнение для когерентной части пульсаций с точностью до членов порядка ϵ представляется в виде:

$$\frac{\partial A_{\mathbf{k}}^c}{\partial t} = -\epsilon \int \bar{H}_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} A_{\mathbf{k}_1}^c A_{\mathbf{k}_2}^c d\mathbf{k}_1, \quad (1)$$

$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k} - \mathbf{k}_1$

где функция $\bar{H}_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}$ определена в работе [13]. Уравнение содержит малый параметр $\epsilon^2 = \frac{\delta^{**}}{L}$, где δ^{**} – толщина потери импульса, L – характерный продоль-

ный масштаб длины. Для согласования членов уравнения вводится соотношение (закон подобия):

$$\frac{\delta^{**}}{L} \sim \frac{\delta^{**} |\text{Im}(\omega^{**}(\mathbf{k}, \delta^{**}))|}{U_{\infty}}, \quad (2)$$

где $|\text{Im}(\omega^{**}(\mathbf{k}, \delta^{**}))|$ – минимальный по $\mathbf{k}$ инкремент основной моды волн Толлмина-Шлихтинга, U_{∞} – скорость набегающего потока. Амплитуды волн, в соответствии с принципом тройной декомпозиции [5], представляются в виде суммы когерентной и некогерентной частей, для которых получается система уравнений, содержащих малый параметр ϵ . Наличие малого параметра ϵ позво-

ляет искать решение уравнений (1) для амплитуд в виде разложения по этому параметру. Кроме того, появляется иерархия масштабов по времени:

$$\tau_0 = \frac{\delta^{**}}{U_\infty}, \tau_1 = \frac{\tau_0}{\varepsilon}, \tau_2 = \frac{\tau_0}{\varepsilon^2}.$$

Для решения уравнения (1) воспользуемся методом многих масштабов [17]. Представим производную по времени и амплитуду A_k^c в виде разложения по параметру ε :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots, \\ A_k^c &= A_k^{c(0)} + \varepsilon A_k^{c(1)} + \varepsilon^2 A_k^{c(2)} + \dots, \end{aligned}$$

Собирая члены при одинаковых степенях ε , в итоге получаем последовательность из трёх уравнений. Разрешая эти уравнения последовательно в масштабах τ_0, τ_1 , исключая секулярные члены, получим из первых двух:

$$\begin{aligned} A_k^{c(0)} &= A_k^{c(0)}(t_1, t_2), \frac{\partial A_k^{c(0)}}{\partial t_1} = -\int H_{kk_1k_2} \Xi(\Omega_3) A_{k_1}^{c(0)} A_{k_2}^{c(0)} d\mathbf{k}_1, \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{k} - \mathbf{k}_1, \Omega_3 = \omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{k}_1) - \omega(\mathbf{k}_2), \Xi(x) = 1, x = 0, \Xi(x) = 0, x \neq 0 \quad (3) \end{aligned}$$

Отметим свойство уравнения (3) для $A_k^{c(0)}$ в масштабе t_1 . Оно инвариантно относительно замены:

$$A_k^{c(0)}(t_1, t_2) = \varphi(t_2) \tilde{A}_k^{c(0)}(t_1'), \quad t_1' = \varphi(t_2) t_1, \quad (4)$$

которая в модельном варианте имеет вид:

$$a_m(t_1, t_2) = \varphi(t_2) \tilde{a}_m(\varphi(t_2) t_1), \quad m = 1, 2, 3.$$

В итоге решение для когерентной частей допускает, в частности, представление в виде (в общем случае когерентная составляющая содержит бесконечную совокупность субгармоник, находящихся в 3-х волновом резонансе):

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}^{c(0)} &= a_1 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1^0) + \sum \left\{ a_2 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_2^0) + a_3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_3^0) \right\} + \\ &+ a_1^* \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1^0) + \sum \left\{ a_2^* \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2^0) + a_3^* \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_3^0) \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\omega_{\mathbf{k}_1^0}^{(0)} = \omega_{\mathbf{k}_2^0}^{(0)} + \omega_{\mathbf{k}_3^0}^{(0)}, \quad \mathbf{k}_1^0 = \mathbf{k}_2^0 + \mathbf{k}_3^0, \quad \omega_{-\mathbf{k}}^{(0)} = -\omega_{\mathbf{k}}^{*(0)}, \quad \varphi_{-\mathbf{k}}^{(0)} = \varphi_{\mathbf{k}}^{*(0)},$$

где $\mathbf{k}_1^{(0)}, \mathbf{k}_2^{(0)}, \mathbf{k}_3^{(0)}$, – множество векторов, удовлетворяющих уравнениям трёхугольного резонанса [17], а также $a_i, i = 1, 2, 3$ – амплитуды гармоник в 3-х волновом резонансе, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, $\mathbf{k}_i^{(0)}, i = 1, 2, 3, \mathbf{k}_1^{(0)} = \mathbf{k}_2^{(0)} + \mathbf{k}_3^{(0)}$, – волновые вектора гармоник.

Векторы выбираются так, чтобы они удовлетворяли равенству $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, а концы векторов должны лежать на резонансных кривых, определяемых вектором $\mathbf{k}_0$. В этом случае уравнения для амплитуд когерентной составляющей могут быть представлены в виде [13]:

$$\begin{aligned}
 a_1^* \frac{da_1}{dt_1} &= \Lambda_1 a_1^* a_2 a_3, & a_1 \frac{da_1^*}{dt_1} &= \Lambda_1^* a_1 a_2^* a_3^*, \\
 a_2^* \frac{da_2}{dt_1} &= \Lambda_2 a_1 a_2^* a_3^*, & a_2 \frac{da_2^*}{dt_1} &= \Lambda_2^* a_1^* a_2 a_3, \\
 a_3^* \frac{da_3}{dt_1} &= \Lambda_3 a_1 a_2^* a_3^*, & a_3 \frac{da_3^*}{dt_1} &= \Lambda_3^* a_1^* a_2 a_3,
 \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь Λ_i , $i = 1, 2, 3$, комплексные числа [13], не зависящие от времени. Умножим теперь каждое уравнение на некоторое положительное число q_i , $i = 1, 2, 3$, и сложим. В результате получим:

$$\begin{aligned}
 \frac{d(q_1 |a_1|^2 + q_2 |a_2|^2 + q_3 |a_3|^2)}{dt_1} &= q_1 (\Lambda_1 a_1^* a_2 a_3 + \Lambda_1^* a_1 a_2^* a_3^*) + \\
 &+ q_2 (\Lambda_2 a_1 a_2^* a_3^* + \Lambda_2^* a_1^* a_2 a_3) + q_3 (\Lambda_3 a_1 a_2^* a_3^* + \Lambda_3^* a_1^* a_2 a_3) = \\
 &= (q_1 \Lambda_1 + q_2 \Lambda_2^* + q_3 \Lambda_3^*) a_1^* a_2 a_3 + (q_1 \Lambda_1^* + q_2 \Lambda_2 + q_3 \Lambda_3) a_1 a_2^* a_3^*
 \end{aligned}$$

Полагая $(q_1 \Lambda_1 + q_2 \Lambda_2^* + q_3 \Lambda_3^*) = (q_1 \Lambda_1^* + q_2 \Lambda_2 + q_3 \Lambda_3) = 0$, для q_2/q_1 и q_3/q_1 получаем алгебраическую систему уравнений:

$$\begin{aligned}
 \left(\operatorname{Re}(\Lambda_1) + \frac{q_2}{q_1} \operatorname{Re}(\Lambda_2^*) + \frac{q_3}{q_1} \operatorname{Re}(\Lambda_3^*) \right) &= 0, \\
 \left(\operatorname{Im}(\Lambda_1) + \frac{q_2}{q_1} \operatorname{Im}(\Lambda_2^*) + \frac{q_3}{q_1} \operatorname{Im}(\Lambda_3^*) \right) &= 0.
 \end{aligned} \quad (7)$$

Если выполняется условие разрешимости для линейной системы:

$$\det \begin{pmatrix} \operatorname{Re}(\Lambda_2^*), \operatorname{Re}(\Lambda_3^*) \\ \operatorname{Im}(\Lambda_2^*), \operatorname{Im}(\Lambda_3^*) \end{pmatrix} \neq 0, \quad (8)$$

то решение существует. Определяем значения q_{12} и q_{13} :

$$q_{12} = \frac{q_2}{q_1}, \quad q_{13} = \frac{q_3}{q_1}, \quad (9)$$

которые определяются по коэффициентам Λ_i , $i = 1, 2, 3$.

В случае положительности q_{12} и q_{13} динамика системы финитна и происходит на поверхности единичной сферы. Таким образом, выражение для инварианта имеет следующий вид:

$$I(t_1) = |a_1|^2 + q_{12} |a_2|^2 + q_{13} |a_3|^2 = 1, \quad q_{12} = \frac{q_2}{q_1}, \quad q_{13} = \frac{q_3}{q_1}. \quad (10)$$

Результаты обобщаются на случай множественного 3-х волнового резонанса:

$$\frac{da_l}{dt} = \sum_{l=1}^n \Lambda_l^l a_1^l a_3^l, \quad \frac{da_2^l}{dt} = \Lambda_2^l a_1 a_3^{l*}, \quad \frac{da_3^l}{dt} = \Lambda_3^l a_1 a_2^l, \quad l = 1, 2, \dots, n. \quad (11)$$

В этом случае выражение для инварианта можно представить в виде:

$$I^{(n)}(t_1) = |a_1|^2 + \sum_j q_{12}^{(j)} |a_2^{(j)}|^2 + q_{13}^{(j)} |a_3^{(j)}|^2 = 1,$$

$$q_{12}^{(j)} = \frac{q_2^{(j)}}{q_1}, \quad q_{13}^{(j)} = \frac{q_3^{(j)}}{q_1}, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (12)$$

Здесь сумма берётся по всем субгармоникам в состоянии 3-х волнового резонанса с основной гармоникой. В случае, когда $q_{12}^{(j)} > 0$, $q_{13}^{(j)} > 0$, инвариант $I^{(n)}(t_1)$ можно преобразовать к уравнению n -мерной единичной сферы. В этом случае здесь также формулируются все условия, которые используются для простого 3-х волнового резонанса. Таким образом, динамика множественного 3-х волнового резонанса в представлении дискретного набора n триплетов удовлетворяет инварианту, который представляется квадратичной формой для амплитуды основной гармоники и амплитуд субгармоник.

Теорема Биркгофа-Хинчина

Приведём здесь теорему Биркгофа-Хинчина в формулировке А. Н. Колмогорова, так как в этой формулировке очень просто найти соответствие с исследуемой задачей. Пусть состояние рассматриваемой системы представлено точкой P на замкнутом n -мерном многообразии.

Пусть координаты $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ точки P удовлетворяют следующей автономной системе дифференциальных уравнений:

$$\frac{da_i}{dt} = \mathbf{A}_i(a_1, a_2, \dots, a_n), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (13)$$

Уравнения (13) в предположении однозначности их решения определяют для каждого t преобразование T_t любого подмножества E многообразия M^n : $T_t E = E'$, где E' есть множество всех точек P' , в которые передвинутся точки P множества E за промежуток времени t . Интегральным инвариантом называется такая функция множества $I(E)$, для которой всегда $I(T_t E) = I(E)$, где $I(M^n) = 1$.

Так что, для любой вещественнозначной функции $f(P)$, определённой на M^n и суммируемой относительно $I(E)$, предел существует и конечен для всех P :

$$\lim_{c \rightarrow \infty} \frac{1}{c} \int_0^c f(T_t P) dt = \psi(P). \quad (14)$$

В предыдущем разделе получена система дифференциальных уравнений (6). Инвариант системы (10) может быть нормализован к единице преобразованием (4). Таким образом, динамика автономной системы осуществляется на поверхности n -мерной, здесь $n = 42$, единичной сферы, что и определяет применимость теоремы Биркгофа-Хинчина [12] к данному случаю. Следует подчеркнуть, что средняя величина квадратов амплитуд гармоники и субгармоники зависит от начальных условий для системы (11).

Численные результаты

Теорема Биркгофа-Хинчина [12] гарантирует нам существование средних по времени значений квадратов амплитуд гармоник и множества субгармоник. В данной статье представлены результаты численного определения этих величины с помощью спектральных характеристик волн Толлмина-Шлихтинга на профиле средней продольной скорости развитого турбулентного пограничного слоях [15].

На рис. 1 представлена кривая 3-х волнового резонанса для $\mathbf{k}_0 = (2, 0)$, $\mathbf{k}_1 = (\alpha_1(\beta_1), \beta_1)$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1$, $\text{Re}\delta = 10^4$. Кривая представляет решение системы уравнений $\omega(\mathbf{k}_0) = \omega(\mathbf{k}_1) + \omega(\mathbf{k}_2)$, $\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$, для наименее затухающей моды волн Толлмина-Шлихтинга.

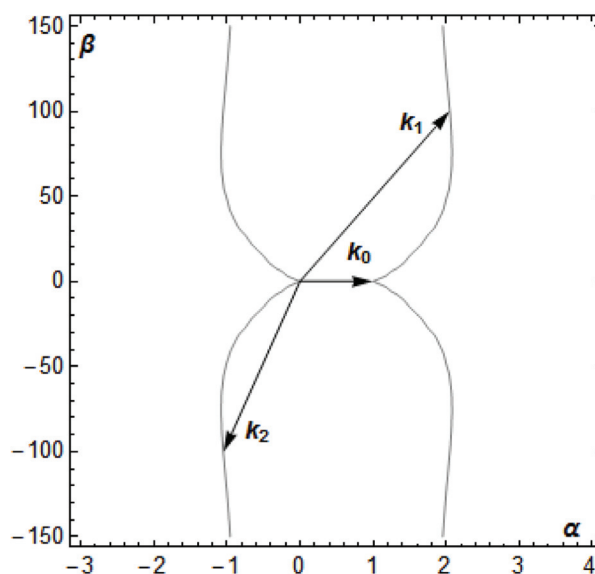


Рис. 1. Кривая 3-х волнового резонанса для наименее затухающей моды волн Т-Ш /

Fig. 1. Curve of three-wave resonance for the least damped mode of T-Sh waves.

Источник: по данным авторов.

Следует обратить внимание на то, что на рис. 1 по горизонтали отложены единицы, а по вертикали – сотни. Рис. 1 показывает, что с продольной волной Толлмина-Шлихтинга вступают в резонанс субгармоники с $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$, которые имеют волновые вектора практически параллельные плоскости среднего течения, то есть волны с продольной завихрённостью.

В нашем исследовании нас интересуют начальные условия для системы уравнений (11). Эти условия задаются вектором на n -мерной ($n = 42$) единичной сфере. В реальности эти граничные условия сформировываются в нелинейной области перехода. Однако окончательные представления об этом процессе являются ещё предметом исследований [18; 19]. Далее, для упрощения задачи будем задавать эти условия точкой, взятой из множества точек статистически равномерно

распределённых на n -мерной ($n = 42$) единичной сфере. Для этого достаточно использовать гауссово распределение для каждой из координат вектора точки с последующей нормировкой этого вектора на единицу [20]. Мы можем найти средние значения квадратов их амплитуд за достаточно длительную реализацию во времени численно.

На рис. 2 представлены зависимости среднего квадрата модуля основной гармоники и двух амплитуд субгармоник множественного 3-х волнового резонанса, описываемого системой уравнений (11).

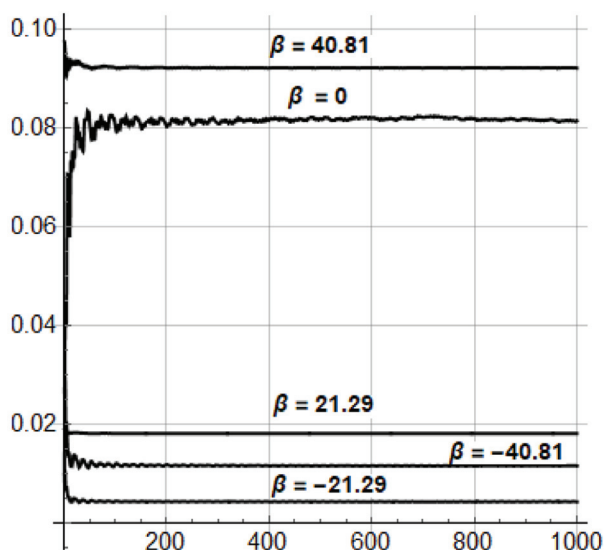


Рис. 2. Временные зависимости ($0 \leq t \leq 1000$) средних значений квадрата амплитуды основной гармоники $a_1(t)$, $\beta = 0$ и $a_{11}(t)$, $a_{21}(t)$ при $\beta = (21, 29, 40, 81)$ и двух субгармоник $a_{12}(t)$, $a_{22}(t)$, где $\beta = (-21, 29, -40, 81)$ / Fig. 2. Time dependences ($0 \leq t \leq 1000$) of the average values of the square of the amplitude of the fundamental harmonic $a_1(t)$, $\beta = 0$ and $a_{11}(t)$, $a_{21}(t)$ at $\beta = (21, 29, 40, 81)$, and two subharmonics $a_{12}(t)$, $a_{22}(t)$, где $\beta = (-21, 29, -40, 81)$.

Источник: по данным авторов.

На рис. 2 представлены типичные зависимости от времени амплитуды $a_1(t)$ основной гармоники при $\beta = 0$ и амплитуд двух субгармоник $a_{11}(t)$, $a_{21}(t)$ при $\beta = (21, 29, 40, 81)$, соответственно, из набора множественного 3-х волнового резонанса первой моды, где они изменяются со временем.

На рис. 3 можно видеть поведение $q_{12}^{(j)}(\beta)$ для множественного 3-х волнового резонанса, когда мы имеем точки, расположенные на кривой 3-х волнового резонанса, чтобы получить зависимость множителей $q_{12}^{(j)}$, $q_{13}^{(j)}$ от β . Таким образом, каждая точка на резонансной кривой соответствует значению волнового числа β . Как показано, значения $q_{12}^{(j)}$, представленные на рис. 3, и $q_{13}^{(j)}$ имеют одинаковое поведение.

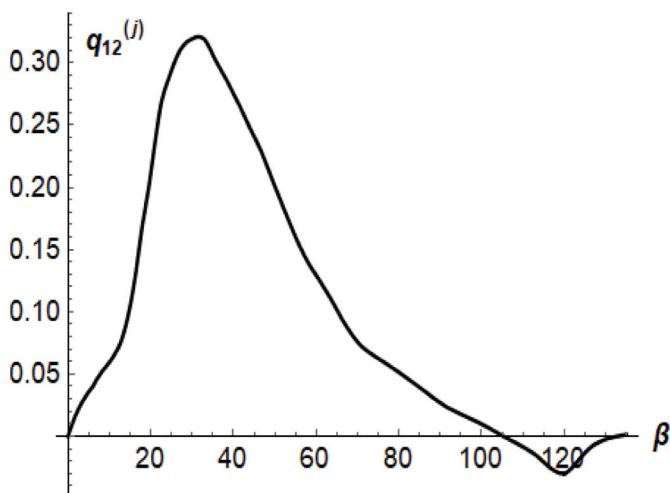


Рис. 3. Зависимость значений множителей $q_{12}^{(j)}(\beta)$ для множества 3-х волнового резонанса от поперечной составляющей волнового вектора / Fig. 3. Dependence of the values of the factors $q_{12}^{(j)}(\beta)$ for a set of three-wave resonance on the transverse component of the wave vector.

Источник: по данным авторов.

На рис. 4 представлена совокупность векторов субгармоник в выражении (5) для $A_k^{c(0)}$, которая берётся по всем резонансным тройкам и симметричным к ним относительно горизонтальной оси.

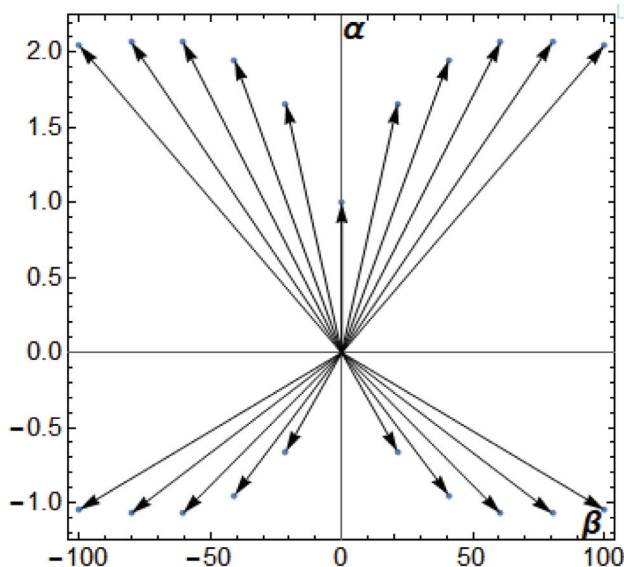


Рис. 4. Совокупность волновых векторов множественного 3-х волнового резонанса / Fig. 4. Set of wave vectors of multiple three-wave resonance.

Источник: по данным авторов.

Выбор набора субгармоник производится из области положительной определённости множителей $q_{12}^{(j)}$, $q_{13}^{(j)}$ в зависимости от места нахождения субгармоники на резонансной кривой.

Система уравнений для множественного трёхволнового резонанса решалась численно. На рис. 5. представлен пример финитного детерминированного (при одинаковых начальных условиях решения совпадают) поведения гармоник в зависимости от времени в масштабе t_1 .

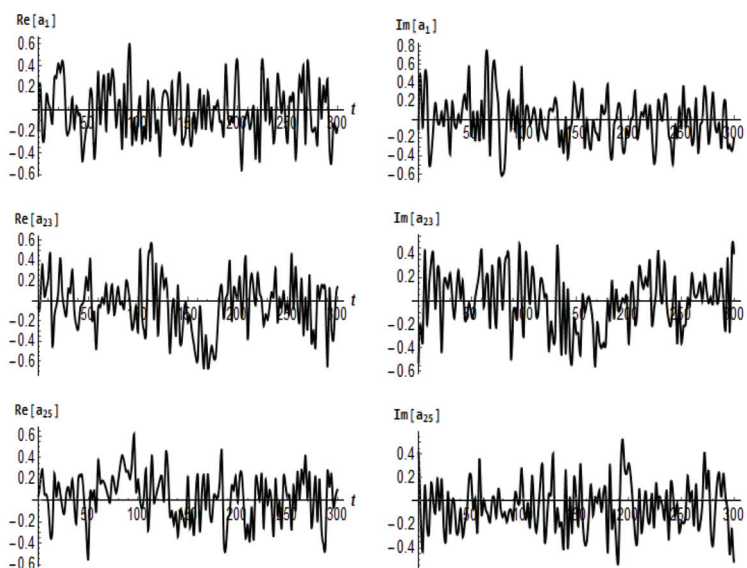


Рис. 5. Пример зависимости от времени действительной и мнимой части амплитуд основной гармоники $\beta = 0$ и двух субгармоник $\beta = (100, 1, -100, 1)$ из набора множественного 3-х волнового резонанса первой моды / Fig. 5. Example of the time dependence of the real and imaginary parts of the amplitudes of the fundamental harmonic $\beta = 0$ and two subharmonics $\beta = (100, 1, -100, 1)$ from a set of multiple three-wave resonance of the first mode.

Источник: по данным авторов.

На рис. 5 представлены типичные зависимости от времени амплитуды $a_1(t)$ основной гармоники ($\beta = 0$) и амплитуд субгармоник $a_{23}(t)$ при $\beta = 100, 1$ и $a_{25}(t)$ при $\beta = -100, 1$.

Система уравнений для множественного трёхволнового резонанса решается с помощью пакета МАТЕМАТИКА¹. На рис. 6 показана временная зависимость динамического инварианта формулы (12) от времени, который постоянен с очень большой точностью, полученная методом Рунге-Кутты с некоторым стохастически заданным набором начальных данных. Видно, что за очень большой промежуток времени ($0 \leq t \leq 1000$) инвариант меняется в шестом знаке.

¹ См.: Mathematica 5.0, User's Guide. Wolfram Research, 2003. 1301 p.

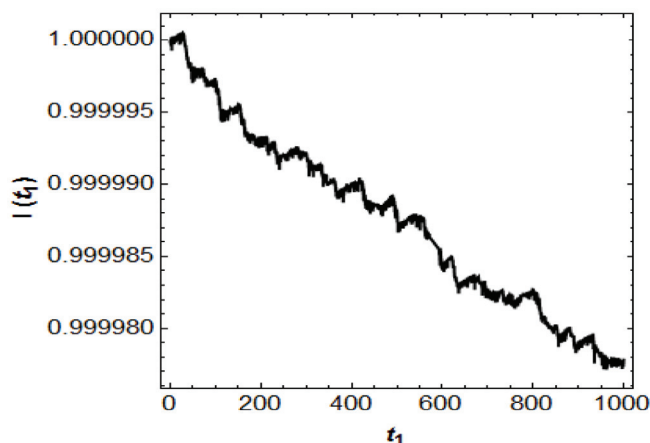


Рис. 6. Зависимость инварианта множественного 3-х волнового резонанса от времени. Метод Рунге-Кутты / Fig. 6. Time dependence of the invariant of multiple three-wave resonance. Runge-Kutta method.

Источник: по данным авторов.

На рис. 7 представлено сравнение для среднего квадрата модулей амплитуд гармоник и субгармоник по времени, и среднее по времени, усреднённое по репрезентативному набору начальных данных (100 точек), (обозначается пустыми и сплошными квадратами, соответственно). Средние значения по набору начальных данных незначительно отличаются от средних по времени для единичного начального значения системы (11).

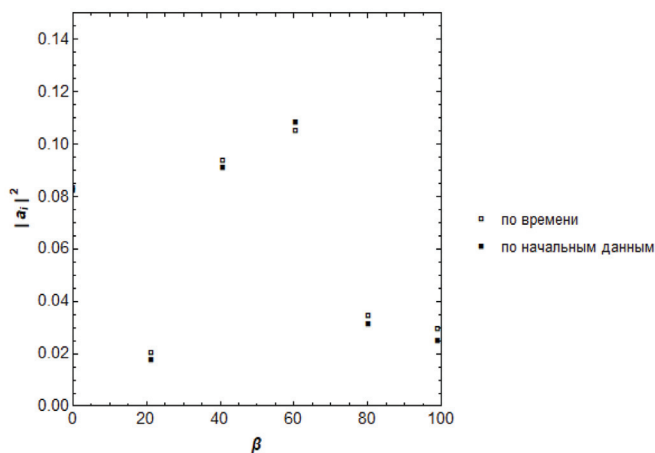


Рис. 7. Сравнение среднего квадрата модулей амплитуд по времени и по репрезентативному набору начальных данных (100 точек) / Fig. 7. Comparison of the mean square of the moduli of the amplitudes over time and over a representative set of initial data (100 points).

Источник: по данным авторов.

Заключение

На основе известного из эксперимента профиля [14] средней продольной скорости развитого турбулентного пограничного слоя проведён численный анализ уравнений для когерентной структуры. Получены дисперсионные характеристики волн Толлмина-Шлихтинга и матричные элементы в виде функций от компонентов волнового вектора. Кривая 3-х волнового резонанса представлена на рис. 1 и показывает, что в турбулентном пограничном слое вследствие наличия когерентной структуры появляются продольные вихри.

Когерентная составляющая представлена в виде дискретного множества волн, подверженных 3-х волновому резонансу, где амплитуды волн определяются системой дифференциальных уравнений (11). Кроме того, она содержит набор субгармоник, которые находятся в 3-х волновом резонансе с основной гармоникой, как показано на рис. 4. Эта система решается численно с высокой точностью с помощью метода Рунге-Кутты в пакете МАТЕМАТИКА¹ и приводится зависимость инварианта множественного 3-х волнового резонанса от времени, как показано на рис. 5. Вычисления показали, что исследуемая величина сохраняет своё значение на значительном интервале по времени. Весовые множители $q_{12}^{(j)}$, 1, 2, ... 5 для каждой тройки волн, рассчитанные отдельно, определяют поведение этих величин с поперечным волновым числом β , как показано на рис. 3. Множители $q_{12}^{(j)}$, 1, 2, ... 5, исследуются на положительность в зависимости от положения субгармоник на резонансной кривой. Найден интервал значений β , на котором весовые множители положительны.

Формула (12) нормируется к единице, и это позволяет опираться на теорему Биркгофа-Хинчина в смысле существования средних по времени квадратов амплитуд волн. Для сравнения приведены средние по времени, усреднённые по репрезентативному набору начальных данных (100 точек), как показано на рис. 7. Получена небольшая разница между средними значениями по набору начальных данных от средних по времени для единичного начального значения системы (11). Максимальное значение среднего значения квадрата амплитуд гармоник и субгармоник по 100 начальным данным имеет место при $\beta \approx 61$.

Статья поступила в редакцию 02.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kachanov Y. S. Physical mechanisms of laminar-boundary-layer transition // Annual Review of Fluid Mechanics. 1994. Vol. 26. P. 411–482. DOI: 10.1146/annurev.fl.26.010194.002211.
2. Репик Е. У., Соседко Ю. П. Исследование прерывистой структуры течения в пристенной области турбулентного пограничного слоя // Турбулентные течения: сборник трудов / отв. ред. В. Б. Струминский. М.: Наука, 1974. С. 172–184.
3. Robinson S. K. Coherent motions in the turbulent boundary layer // Annual Review of Fluid Mechanics. 1991. Vol. 23. P. 601–639. DOI: /10.1146/annurev.fl.23.010191.003125.

¹ См.: Mathematica 5.0, User's Guide. Wolfram Research, 2003. 1301 p.

4. Boiko A. V., Grek G. R., Dovgal' A. V., Kozlov V. V. *Vozniknovenie turbulentnosti v pristennykh techeniyakh* [The emergence of turbulence in near-wall flows]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1999. 328 p.
5. Организованные структуры в турбулентных течениях. Анализ экспериментальных работ по турбулентному пограничному слою: монография / Белоцерковский О. М., Хлопков Ю. И., Жаров В. А., Горелов С. Л., Хлопков А. Ю. М.: МФТИ, 2009. 302 с.
6. Benney D. J., Gustavsson H. L. A new mechanism for linear and nonlinear hydrodynamic instability // *Studies in Applied Mathematics*. 1981. Vol. 64. P. 185–209. DOI: 10.1002/sapm1981643185.
7. Жаров В. А. Вариант описания слабонелинейной динамики волнового пакета в пограничном слое на пластине в несжимаемой жидкости // *Труды ЦАГИ*. 1993б. Вып. 2523. С. 17–28.
8. Жаров В. А. О волновой теории развитого турбулентного пограничного слоя // *Ученые записки ЦАГИ*. 1986. Т. 17. № 5. С. 28–38.
9. Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. Mechanism of Transverse Structure Formation in Supersonic Flow Past a Body // *Fluid Dynamics*. 2014. Vol. 49. No. 5. P. 681–687. DOI: 10.1134/S0015462814050159.
10. Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. Influence of spatial effects on coherent structures formation in a supersonic flow near a plate // *Progress in Flight Physics*. 2017. Vol. 9. P. 423–434. DOI: 10.1051/eucass/2016090423.
11. Каток А. Б., Хасселблат Б. Введение в современную теорию динамических систем. М.: «ФАКТОРИАЛ», 1999. 768 с.
12. Колмогоров А. Н. Избранные труды. Математика и механика. М: Наука, 1985. 470 с.
13. Zharov V. A. Waveguide model of coherent structures in the developed turbulent boundary layer // *Proceeding of 14th European Turbulence Conference (1–4 September, 2013, Lyon, France)* [Электронный ресурс]. URL: http://etc14.ens-lyon.fr/openconf/modules/request.php?module=oc_proceedings&action=view.php&a=Poster&id=28 (дата обращения: 20.09.2020).
14. Musker A. J. Explicit expression for the smooth wall velocity distribution in turbulent boundary layer // *AIAA Journal*. 1979. Vol. 17. No. 6. P. 655–657. DOI: 10.2514/3.61193.
15. Селим Р. С. Собственные моды уравнения Орра-Зоммерфельда в развитом турбулентном пограничном слое // *Труды МАИ (сетевое научное издание)*. 2019. № 109. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=111352> (дата обращения: 30.08.2020). DOI: 10.34759/trd-2019-109-5.
16. Landahl M. T. A wave-guide model for turbulent shear flow // *Journal of Fluid Mechanics*. 1967. Vol. 29. Iss. 3. P. 441–459. DOI: 10.1017/S0022112067000953.
17. Davidson R. C. *Method in nonlinear plasma theory*. New York, London: Academic Press, 1972. 356 p.
18. Pushpender K. S., Tapan K. S. Effect of frequency and wave number on the three-dimensional routes of transition by wall excitation // *Physics of Fluids*. 2019. Vol. 31. Iss. 6. P. 64–107. DOI: 10.1063/1.5097272
19. Zhang W., Liu P., Guo H. Conditional Sampling and Wavelet Analysis in Early Stage of Step-Generated Transition // *AIAA Journal*. 2018. Vol. 56. No. 6. P. 2471–2477. DOI: 10.2514/1.j056800.
20. Хлопков Ю. И., Горелов С. Л. Приложение методов статистического моделирования (Монте-Карло): учебное пособие. М.: МФТИ, 1994. 103 с.

REFERENCES

1. Kachanov Y. S. Physical mechanisms of laminar-boundary-layer transition. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1994, vol. 26, pp. 411–482. DOI: 10.1146/annurev.fl.26.010194.002211.
2. Repik E. U., Sosedko Yu. P. [Study of the discontinuous flow structure in the near-wall region of a turbulent boundary layer]. In: Struminsky V. V., chief ed. *Turbulentnye techeniya* [Turbulent flows]. Moscow, Nauka Publ., 1974, pp. 172–184.
3. Robinson S. K. Coherent motions in the turbulent boundary layer. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1991, vol. 23, pp. 601–639. DOI: /10.1146/annurev.fl.23.010191.003125.
4. Boiko A. V., Grek G. R., Dovgal' A. V., Kozlov V. V. *Vozniknovenie turbulentnosti v pristennykh techeniyakh* [The emergence of turbulence in near-wall flows]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1999. 328 p.
5. Belotserkovskii O. M., Khlopkov Yu. I., Zharov V. A., Gorelov S. L., Khlopkov A. Yu. *Organizovannyye struktury v turbulentnykh techeniyakh. Analiz eksperimental'nykh rabot po turbulentnomu pogrannichnomu sloyu* [Organized structures in turbulent flows. Analysis of experimental work on a turbulent boundary layer]. Moscow, Moscow Institute of Physics and Technology Publ., 2009. 302 p.
6. Benney D. J., Gustavsson H. L. A new mechanism for linear and nonlinear hydrodynamic instability. In: *Studies in Applied Mathematics*, 1981, vol. 64, pp. 185–209. DOI: 10.1002/sapm1981643185.
7. Zharov V. A. [A variant of describing the weakly nonlinear dynamics of a wave packet in a boundary layer on a plate in an incompressible fluid]. In: *Trudy TSAGI* [Proceedings of Central Aerohydrodynamic Institute], 1993b, no. 2523, pp. 17–28.
8. Zharov V. A. [On the wave theory of a developed turbulent boundary layer]. In: *Uchenye zapiski TSAGI* [TsAGI scientific notes], 1986, vol. 17, no. 5, pp. 28–38.
9. Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. Mechanism of Transverse Structure Formation in Supersonic Flow Past a Body. In: *Fluid Dynamics*, 2014, vol. 49, no. 5, pp. 681–687. DOI: 10.1134/S0015462814050159.
10. Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. Influence of spatial effects on coherent structures formation in a supersonic flow near a plate. In: *Progress in Flight Physics*, 2017, vol. 9, pp. 423–434. DOI: 10.1051/eucass/2016090423.
11. Katok A. B., Khasselblat B. *Vvedenie v sovremennuyu teoriyu dinamicheskikh sistem* [Introduction to modern theory of dynamical systems]. Moscow, FAKTORIAL Publ., 1999. 768 p.
12. Kolmogorov A. N. *Izbrannyye trudy. Matematika i mekhanika* [Selected Works. Mathematics and Mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1985. 470 p.
13. Zharov V. A. Waveguide model of coherent structures in the developed turbulent boundary layer. In: *Proceeding of 14th European Turbulence Conference (1–4 September, 2013, Lyon, France)*. Available at: http://etc14.ens-lyon.fr/openconf/modules/request.php?module=oc_proceedings&action=view.php&a=Poster&id=28 (accessed: 20.09.2020).
14. Musker A. J. Explicit expression for the smooth wall velocity distribution in turbulent boundary layer. In: *AIAA Journal*, 1979, vol. 17, no. 6, pp. 655–657. DOI: 10.2514/3.61193.
15. Selim R. S. [Eigenmodes of the Orr–Sommerfeld equation in the developed turbulent boundary layer]. In: *Trudy MAI (setevoe nauchnoe izdanie)* [Electronic journal “Trudy MAI”], 2019, no. 109. Available at: <http://trudymai.ru/published.php?ID=111352> (accessed: 30.08.2020). DOI: 10.34759/trd-2019-109-5.
16. Landahl M. T. A wave-guide model for turbulent shear flow. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 1967, vol. 29, iss. 3, pp. 441–459. DOI: 10.1017/S0022112067000953.

17. Davidson R. C. Method in nonlinear plasma theory. New York, London, Academic Press Publ., 1972. 356 p.
18. Pushpender K. S., Tapan K. S. Effect of frequency and wave number on the three-dimensional routes of transition by wall excitation. In: *Physics of Fluids*, 2019, vol. 31, iss. 6, pp. 64–107. DOI: 10.1063/1.5097272.
19. Zhang W., Liu P., Guo H. Conditional Sampling and Wavelet Analysis in Early Stage of Step-Generated Transition. In: *AIAA Journal*, 2018, vol. 56, no. 6, pp. 2471–2477. DOI: 10.2514/1.J056800.
20. Khlopkov Yu. I., Gorelov S. L. *Prilozhenie metodov statisticheskogo modelirovaniya (Monte-Karlo)* [Application of Statistical Modeling Methods (Monte Carlo)]. Moscow, Moscow Institute of Physics and Technology Publ., 1994. 103 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Жаров Владимир Алексеевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, НИО-8, Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского;
e-mail: v_zharov@mail.ru;

Липатов Игорь Иванович – доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, профессор кафедры теоретической и прикладной аэрогидромеханики Московского физико-технического института (национального исследовательского университета); начальник отдела, НИО-8, Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского;
e-mail: igor_lipatov@mail.ru;

Селим Рами Салах Сабер – аспирант кафедры компьютерного моделирования Московского физико-технического института (национального исследовательского университета);
e-mail: selim.rs@phystech.edu

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Vladimir A. Zharov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Leading Researcher, RSD-8, Central Aerohydrodynamic Institute;
E-mail: v_zharov@mail.ru;

Igor I. Lipatov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, Prof., Department of Theoretical and Applied Aerohydromechanics, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University); Head of Department, RSD-8, Central Aerohydrodynamic Institute;
e-mail: igor_lipatov@mail.ru;

Ramy Salah Saber Selim – postgraduate student, Department of Computer Modeling, Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University);
e-mail: selim.rs@phystech.edu

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Жаров В. А., Липатов И. И., Селим Р. С. Спектральные характеристики течения несжимаемой жидкости в турбулентном пограничном слое // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. №4. С. 12–27.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-12-27

FOR CITATION

Zharov V. A., Lipatov I. I., Selim R. S. Spectral characteristics of an incompressible fluid flow in turbulent boundary layers. In: *Bulletin of the Moscow state regional University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 12–27.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-12-27

УДК 6.62.620.66.66-6

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-28-48

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ОБРАЗОВАНИЕ ГРАННЫХ ФОРМ РОСТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ

Юсим В. А., Саркисов С. Э., Калимуллин Р. К., Петров С. В., Клосс Ю. Ю.

Научный исследовательский центр «Курчатовский институт»

123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1, Российская Федерация

Аннотация

Целью данной работы является исследование распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания.

Процедура и методы. В рамках комплекса SolidWorks Premium в пакете Flow Simulation для построенных геометрических моделей кристаллизационных аппаратов методов Бриджмена, Чохральского и ГНК (горизонтальной направленной кристаллизации) была сформирована криволинейная блочно-структурированная базовая сетка и решалась сопряжённая задача в тепловом узле и водоохлаждаемой рубашке по исследованию процессов тепло-массопереноса и распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания.

Результаты. Получены результаты компьютерного моделирования распределения профилей температур по вертикальным и поперечным сечениям кристаллов, выращиваемых методами Бриджмена и Чохральского, а также получены картины характерного расположения фасеток, которые полностью согласуются с известными соответствующими экспериментальными результатами для кристаллов иттрий-алюминиевого граната.

Теоретическая и практическая значимость. Анализ полученных результатов компьютерного моделирования, проведённый на основе рассмотрения общей теории механизмов роста кристаллов и морфологической неустойчивости фронта кристаллизации для трёх основных методов выращивания, подтвердил правильность полученных модельных картин возникновения форм гранного роста.

Ключевые слова: тепломассоперенос, моделирование, граничные условия

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1919 от 25.09.2020) и грантов РФФИ № 19-29-02007, 20-08-00278, 20-08-00211, 19-29-02018.

MODELING OF THERMAL PROCESSES AFFECTING THE ORIGIN OF FACIAL GROWTH FORMS IN SINGLE CRYSTALS

V. Yusim, S. Sarkisov, R. Kalimullin, S. Petrov, Y. Kloss

National Research Centre 'Kurchatov Institute'

pl. Akad. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russian Federation

Abstract

The aim of this work is to study the distribution of the thermal field inhomogeneity in the melt along the crystal growth axis for different growth methods.

Methodology. Within the framework of the SolidWorks Premium complex, in the Flow Simulation package for the constructed geometric models of the crystallization apparatus of the Bridgman, Czochralski and HDC (horizontal directional crystallization) methods, a curvilinear block-structured base mesh was formed. The conjugate problem was solved in the thermal unit and the water-cooled jacket to study the processes of heat-mass transfer and the distribution of the thermal field inhomogeneity in the melt along the crystal growth axis for different growth methods.

Results. The results of computer simulation of the distribution of temperature profiles over the vertical and cross sections of the crystals grown by the Bridgman and Czochralski methods are presented. Pictures of the characteristic arrangement of facets are obtained. The obtained data fully agree with the known corresponding experimental results for yttrium-aluminum garnet crystals.

Research implications. The analysis of the obtained results of computer simulation, carried out on the basis of consideration of the general theory of crystal growth mechanisms and morphological instability of the crystallization front for the three main methods of growth, confirmed the correctness of the obtained model pictures of the appearance of faceted growth forms.

Keywords: heat and mass transfer, modeling, boundary conditions.

Acknowledgments. This work was supported by the National Research Center 'Kurchatov Institute' (Order No. 1919 dated September 25, 2020) and the Russian Foundation for Basic Research (Grant Nos 19-29-02007, 20-08-00278, 20-08-00211, and 19-29-02018).

1. Введение

Известно, что особенности фронта роста монокристаллов, проявляющиеся в виде гранных и негранных форм роста, в значительной степени зависят от метода выращивания монокристаллов [1]. На возникновение подобных форм роста могут оказывать влияние как неоднородность расплава на фронте роста, зависящая от особенностей направленности гидродинамических потоков расплава, характерных для каждого метода выращивания, так и теплофизические причины [2]. Из-за различий в конвективных потоках в расплаве при выращивании монокристаллов по методу Бриджмена и Чохральского в условиях выпуклого фронта кристаллизации геометрия расположения гранных форм различна. К числу теплофизических причин следует отнести влияние переохлаждения расплава и энтропии плавления на поверхность фронта кристаллизации.

Настоящая работа посвящена математическому моделированию процессов тепло- и массопереноса и исследованию распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания. Выявленная картина распределения областей переохлаждения в расплавах для рассмотренных методов Бриджмена, Чохральского и ГНК хорошо согласуется с известным специфическим характером геометрического расположения гранных форм роста в кристаллах, выращенных по каждому из методов.

2. Экспериментальная часть

Рассматриваемые в работе методы выращивания являются одними из основных и часто используемых методов направленной кристаллизации для получения монокристаллов из расплава [1; 3–7]. Наличие большого объёма общедоступных информационных ресурсов, включающих чертежи и конструктивно-компоновочные схемы как самих установок, так и тепловых узлов, позволяет построить достаточно точные геометрические модели [1; 8–10].

Для математического описания геометрии каждой модели были построены условно однотипные углеграфитовые тепловые узлы, соответствующие прообразу каждого метода. Для данных узлов и кристаллизационных установок были заложены одинаковые материалы с сохранением приблизительных соотношений расстояний между компонентами углеграфитовых узлов, углеграфитового узла и кристаллизационной установки, нагревательных элементов и углеграфитового узла, а также нагревательных элементов и кристаллизуемого материала.

2.1. Геометрические модели и материалы

Геометрические модели углеграфитовых тепловых узлов [8–10], конструктивно-компоновочные схемы кристаллизационных аппаратов к данным узлам, чертежи отдельных модулей, а также различные эксплуатационные характеристики данных аппаратов, по которым строились геометрические модели, взяты из общедоступных информационных ресурсов [1; 13]. На рис. 1(а–в) показаны кристаллизационные аппараты для различных методов выращивания с углеграфитовыми тепловыми узлами.

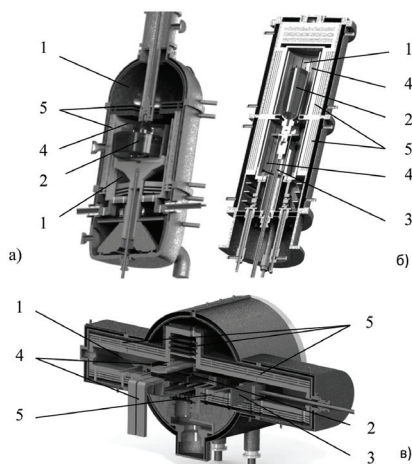


Рис. 1. Вид кристаллизационных установок по методу Бриджмена-Стокбаргера (а), Чохральского (б) и ГНК (в) с тепловым узлом: 1) загрузочный модуль; 2) кристалл в тигле; 3) приёмный модуль; 4) нагреватели; 5) системы тепловых экранов /
Fig. 1. Type of crystallization plants according to (a) Bridgman–Stockbarger, (b) Czochralski and (c) HDC methods with a heating unit: 1) loading module; 2) crystal in a crucible; 3) receiving module; 4) heaters; 5) heat shield systems.

Источник: данные авторов.

В данной работе кристалл флюорита CaF_2 , являющийся известным многофункциональным оптическим и лазерным материалом [11; 12] был выбран в качестве модельного объекта исследования.

Для расчётов по методам Чохральского и Бриджмена была выбрана площадь кристалла с одинаковым поперечным сечением 8036 мм^2 , что примерно соответствует крупногабаритному монокристаллу диаметром 101 мм. В методе ГНК площадь исследуемого сечения была аналогичной с габаритами 180 мм по ширине и 44 мм по высоте кристалла. В табл. 1 [14] приведены взятые для расчёта теплофизические характеристики исследуемого кристалла.

Расстояние между стенками тигля и нагревателем во всех методах было равным и составляло в среднем 40–50 мм. Системы экранов состояли из одинаковых по толщине внутренних экранов с размером 30 мм и внешних с размером 8–10 мм; расстояния между ними составляли 8–4 мм. Расстояние между системой экранов и нагревателем составляло в среднем 10–15 мм. Во всех трёх методах углеграфитовый узел отделён от водоохлаждаемой рубашки кристаллизационного аппарата слоем изолирующего графитового войлока толщиной 10–20 мм.

Ввиду особенности методов выращивания монокристаллов, кристаллизационные аппараты для расплавления шихты имеют различное количество нагревателей. Так, в методе ГНК используются два нагревателя, а в методе Бриджмена и Чохральского по одному. Конструкции нагревателей в методах Бриджмена и Чохральского однотипны, а в методе ГНК имеют Г-образную (верхний нагреватель) и перевернутую П-образную (нижний нагреватель) форму, которые, находясь друг над другом, образуют кольцо.

Теплофизические характеристики исследуемого кристалла приведены в табл. 1.

Таблица 1 / Table 1

Теплофизические характеристики исследуемого кристалла / Thermophysical characteristics of the crystal under study.

Плотность	3,18 г/см ³
Температура плавления	1418 °C
Коэффициент теплопроводности	9,71 Вт/(м К)
Коэффициент термического расширения	$18,5 \cdot 10^{-6}/\text{К}$
Твёрдость по Кнупу	158,3 кг/мм ² (100)
Удельная теплоёмкость	854 Дж/(кг · К)
°C Коэффициент излучения (степень черноты) ϵ	0,45–0,70(на графите)

Источник: [14].

Также в конструкциях используемых аппаратов применяются условно однотипные узлы и приспособления для зацепления и удержания монокристаллов, изготовленные из одинаковых тугоплавких металлов, медные шины и тоководы, вакуумные уплотнения и различный крепёж. Теплофизические характеристики

основных используемых материалов углеродистых тепловых узлов приведены в табл. 2 [14].

Таблица 2 / Table 2

Теплофизические характеристики основных используемых материалов / Thermophysical characteristics of the main materials used.

Материал	Теплопроводность λ [Вт/м · К]	Теплоёмкость [Дж/(кг · К)]	Плотность ρ [кг/м ³]	Степень черноты ϵ
Сталь 15-20	46	460	7874	0,4
Сталь 3-5	55	460	7874	0,4
Графит SGL Carbon R4550	105	840	1830	0,81
Графит МПГ-8,7	95	840	1850	0,8
Графитовый войлок МГВ	0,3	1000	97	0,9
SGL Carbon SIGRAFLEX	5	900	700	0,115
SGL Carbon SIGRABOND	13	800	1450	0,8
Вольфрам ВМ	129	129	19300	0,04
Медь М1, М3	386,1	400	8950	0,7
Молибден	138	195	10220	0,3

Источник: [14].

2.2. Расчётные сетки

После построения геометрических моделей кристаллизационных аппаратов была сформирована криволинейная блочно-структурированная базовая сетка с разделением физического объёма на ряд обособленных блоков, в каждом из которых разрешение локальной сетки подбиралось исходя из особенностей исследуемой области. На рис. 2 показаны расчётные сетки для кристаллизационных аппаратов с углеродистыми узлами.

На рис. 2а (метод Бриджмена) общее количество ячеек базовой сетки составило 4342596, в том числе ячеек в текучей среде – 1573114, ячеек в твёрдой среде – 2769482 и ячеек на границе раздела твёрдого тела с текучей средой – 1268100 с размерностью базовой сетки $N_x = 40$, $N_y = 124$, $N_z = 40$. Разрешение локальной сетки в выделенной области составляло (в данном расчёте область кристалла с тиглем) 137748 ячеек.

На рис. 2б (метод Чохральского) общее количество ячеек базовой сетки составило 8685192, в том числе ячеек в текучей среде – 3146228, ячеек в твёрдой среде – 5538964 и ячеек на границе раздела твёрдого тела с текучей средой – 1381026 с размерностью базовой сетки $N_x = 40$, $N_y = 156$, $N_z = 50$. Разрешение локальной сетки в выделенной области составляло (в данном расчёте область кристалла с тиглем) 1033110 ячеек.

На рис. 2в (метод ГНК) общее количество ячеек базовой сетки составило 4721500, в том числе ячеек в текучей среде – 1036504, ячеек в твёрдой среде – 3684996 и ячеек на границе раздела твёрдого тела с текучей средой – 1036504 с размерностью базовой сетки $N_x = 36$, $N_y = 30$, $N_z = 70$. Разрешение локальной

сетки в выделенной области составляло (в данном расчёте область кристалла с тиглем) 446727 ячеек.

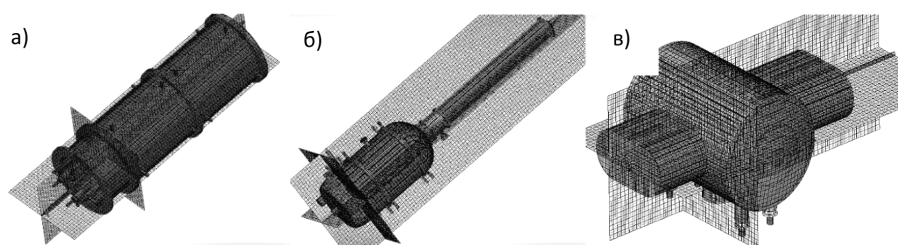


Рис. 2. Объёмная расчётная сетка для кристаллизационных аппаратов с углеграфитовыми тепловыми узлами: а) для Бриджмена; б) для Чохральского; в) для ГНК / Fig. 2. Volumetric computational grid for the crystallization apparatus with graphite-carbon thermal units: a) for Bridgman; b) for Czochralski; c) for HDC.

Источник: данные авторов.

2.3. Описание экспериментальной процедуры

В данной работе исследовались процессы тепло- и массопереноса и распределения неоднородности теплового поля в расплаве вдоль оси роста кристаллов для различных методов выращивания. Для этого решалась сопряжённая задача в тепловом узле и водоохлаждаемой рубашке.

Углеграфитовый тепловой узел каждого исследуемого аппарата имеет сложную конструкцию, которая состоит из нагревателей, защитных слоёв из различных материалов, а также включает графитовый тигель с исследуемым монокристаллом. Температурное поле в такой конструкции определяется процессами теплопроводности и переизлучения между поверхностями. Углеграфитовые тепловые узлы находятся внутри вакуумной кристаллизационной камеры ростовой установки, имеющей водоохлаждающую рубашку (канальный теплообменник). В ходе эксперимента температура на нагревателях устанавливалась исходя из особенностей метода выращивания кристалла CaF_2 : так, для установки Чохральского была задана температура 1550 °С, в установке Бриджмена основной нагреватель – 1550 °С, нижний отжиговой – 1100 °С, в ГНК нижний 1550 °С и 1650 °С, соответственно. Температура теплоносителя на входе для всех методов была взята одинаковая и равнялась 20 °С при давлении 202,6 КПа и скорости напора 2 м/с. Температура окружающей среды, воздействующей на теплообменник, также равнялась 20 °С при 101,3 КПа. В качестве среды внутреннего объёма кристаллизационного аппарата (среда синтеза монокристалла) была принята атмосфера инертного газа аргона при избыточном давлении 202,6 КПа.

В данном исследовании необходимо было определить распределение температуры в монокристалле и форму фронта кристаллизации. Так, в связи с низкими скоростями кристаллизации от 1 до 3–5 мм/ч для всех трёх методов, тепловой процесс рассматривался как квазистационарный. Тигель с синтезируемым кристаллом устанавливался стационарно, через градиентное поле из зоны плавления в холодную зону отжига (рис. 1а–в), то есть в позицию при выходе на посто-

янный диаметр после начала роста, таким образом подвергаясь асимметричному нагреву. Также, для упрощения решаемой задачи пренебрегаем движением потока внутри расплава вследствие предельно малых скоростей. И как следствие, исследуемый монокристалл рассматриваем в единственном агрегатном состоянии – твёрдом.

Механизм переноса тепла в исследуемом монокристалле во всех трёх методах осуществляем с помощью механизмов молекулярной теплопроводности и радиации (радиационно-кондуктивный теплообмен). Сам монокристалл находился в состоянии конвективного теплообмена со средой в тепловом узле и лучистого теплообмена с окружающими его поверхностями. В расчётную математическую модель для данного монокристалла для всех трёх методов использовали: уравнение энергии, уравнения переноса тепла и излучения, граничные условия теплопроводности и излучения на границах кристалла. Также данная модель является частью полной модели тепло- и массопереноса для обобщённого цикла.

Уравнение переноса энергии при направлении нормали к поверхности в объём среды для данной модели записывалось следующим образом [13]:

$$\frac{d\varepsilon}{d\tau} = \operatorname{div} \mathbf{q}_E + e_0, \quad \varepsilon = \varepsilon_C + \varepsilon_R, \quad \mathbf{q}_E = \mathbf{q}_C + \mathbf{q}_R \quad (1)$$

где $\mathbf{q}_E$, $\mathbf{q}_C$, $\mathbf{q}_R$ – векторы переноса энергии общей, теплопроводностью и излучением, ε , ε_C , ε_R – объёмные плотности энергий общей, внутренней и радиационной, e_0 – объёмная мощность источников энергии.

Уравнение переноса энергии теплопроводностью [13]:

$$\mathbf{q}_C = -\lambda \operatorname{grad} t, \quad (2)$$

а излучением [13]:

$$\frac{dI_s}{dS} = -kI_s + \eta, \quad (3)$$

где I_s – интенсивность излучения в направлении S ; η – объёмный коэффициент собственного излучения среды. При этом значения ε_R опускаем в связи с малыми величинами.

Составляющие векторов переноса по направлению n имеют вид [13]:

$$q_{cn} = -\lambda \frac{\partial t}{\partial n}, \quad (4)$$

$$q_{Rn} = \int_{4\pi} I_s \cos(n, s) d\omega. \quad (5)$$

В уравнениях (1), (3), (5) значения ε_R , q_R , I_s , k , η относятся к спектральному и интегральному излучениям или к зоне прозрачности монокристалла.

Граничные условия задавались различными, так на фиксированной поверхности кристалла для элементарной площадки dS_K^C с центром в точке M и записывались при направлении нормали n внутрь кристалла (рис. 3а) [13]:

$$-\frac{dt_K}{dn} = \frac{1}{\lambda_K} (\alpha(t_K - t_f) + E_C - aE_i - q_R), \quad (6)$$

где α – коэффициент теплообмена; t_K – температура кристалла; t_f – температура среды в тепловом узле; λ_K – коэффициент теплопроводности материала кристалла; E_C и E_i – плотности собственного и падающего потоков интегрального излучения; q_R – плотность результирующего потока излучения в интервале частичной прозрачности кристалла $\delta\lambda^t$ на внутренней оболочке кристалла; a – степень черноты излучения стенки контейнера.

На свободной поверхности в зоне непрозрачности кристалла для элементарной площадки dS_K^C с центром в точке N (рис. 3б) [13]:

$$-\frac{dt_K}{dn} = \frac{1}{\lambda_K} (\alpha(t_K - t_f) + E_C'' - a''E_i''), \quad (7)$$

где E_C'' и E_i'' – собственные и падающие поверхностные плотности потока излучения в зоне непрозрачности кристалла.

В зоне частичной прозрачности кристалла (рис. 3б) на внутренней границе площадки dS_K^F [13]:

$$I_{1S(\varphi_1)} = \bar{I}_{1S(\varphi_1)} R + I_{2S(\varphi_2)} (1 - R) \frac{n_2^2}{n_1^2}, \quad \text{при } \varphi_1 < \varphi_{BR}, \quad (8)$$

$$I_{1S(\varphi_3)} = \bar{I}_{1S(\varphi_3)}, \quad \text{при } \varphi_3 > \varphi_{BR},$$

на внешней границе площадки dS_K^F [13]:

$$\bar{I}_{2S(\varphi_2)} = I_{2S(\varphi_2)} R + \bar{I}_{1S(\varphi_1)} (1 - R) \frac{n_2^2}{n_1^2}, \quad \text{при } 0 < \varphi_2 < \frac{\pi}{2}, \quad (9)$$

где n_1 и n_2 – коэффициенты преломления материала кристалла и среды в тепловом узле; I_{1S} и I_{2S} – интенсивности излучения в интервале $\delta\lambda^t$ в кристалле и среде теплового узла; направление S определяется углом φ ; R – коэффициент отражения свободной поверхности кристалла.

Из (6) видно, что при отсутствии зоны непрозрачности в кристалле в тепловом узле соблюдалось условие:

$$\frac{dt_K}{dn} = 0.$$

Рассмотренная выше стационарная, трёхмерная математическая модель тепло- и массопереноса для обобщённого цикла направленной кристаллизации даёт общее представление о протекании процессов тепло- и массопереноса в монокристалле во всех трёх методах.

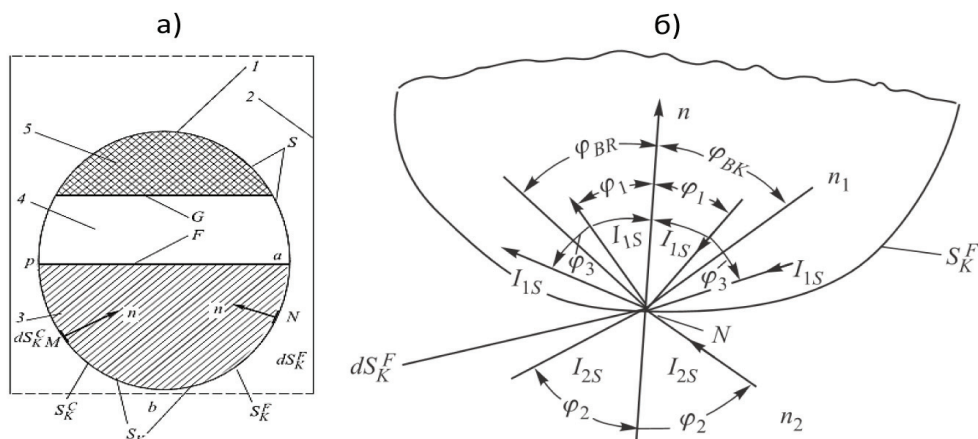


Рис. 3. а) Схема к формулировке математической модели, где: 1 – тепловая система; 2 – тепловой узел; 3 – кристалл; 4 – расплав; 5 – исходный материал; F – фронт кристаллизации; G – граница плавления исходного материала; S, S_K, S_K^F, S_K^C – общая поверхность тепловой системы, поверхности кристалла: общая, свободная и фиксированная; линии ab и bp условно изображают свободную и фиксированную поверхности; n – нормали к поверхности; б) Схема к формулировке граничного условия на свободной поверхности кристалла: $I_{1S}, I_{2S}, \varphi_1, \varphi_2$ – интенсивности излучения и углы их падения в кристалле и окружающей среде; n_1, n_2 – коэффициенты преломления кристалла и окружающей среды; φ_{BR} – угол Брюстера [13] /

Fig. 3. а) Diagram for the formulation of a mathematical model, where: 1 – heat system; 2 – heating unit; 3 – crystal; 4 – fusion; 5 – basic material; F – crystallization front; G – fusion boundary of basic material; S, S_K, S_K^F, S_K^C – total surface of the thermal system, crystal surface: total, free and fixed; lines ab and bp conventionally represent a free and fixed surface; n – normal to the surface; б) Scheme for the formulation of the boundary condition on the free surface of the crystal: $I_{1S}, I_{2S}, \varphi_1, \varphi_2$ – radiation intensities and angles of their incidence in the crystal and the environment; n_1, n_2 – refractive indices of the crystal and of the environment: φ_{BR} – Brewster angle.

Источник: [13]

Для тепловых узлов, помещённых в кристаллизационные аппараты, численное моделирование течения хладагента, механизма теплопередачи и теплопроводности в твёрдых телах тепловых узлов и окружающей его стальной водоохлаждаемой стенки проводилось по аналогии с расчётами работы [14]. Соответствующие расчёты распределения температурных неоднородностей в тепловых полях, возникающих в результате процессов тепло- и массопереноса, были выполнены по методике расчёта сопряжённого теплопереноса с использованием CFD-кода SolidWorks Premium в пакете Flow Simulation. На рис. 4 показаны распределения температур в продольных сечениях исследуемых углеграфитовых узлов кристаллизационных аппаратов различного типа.

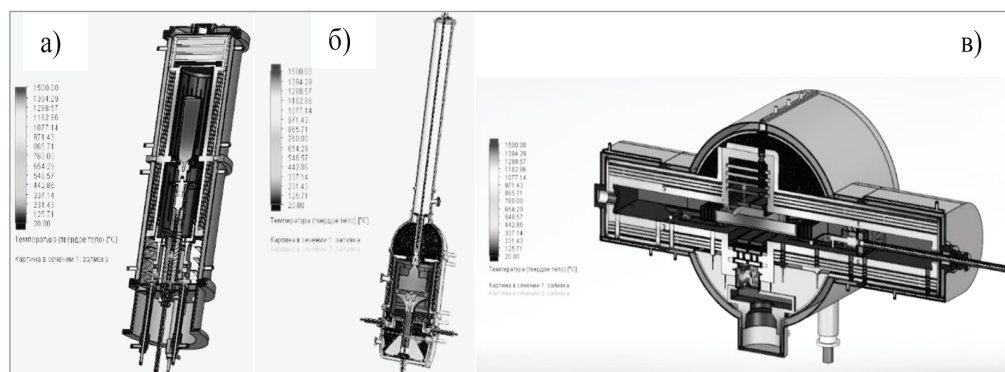


Рис. 4. Вид распределения температуры твёрдого тела для кристаллизационной установки с тепловыми узлами: а) Бриджмена-Стокбаргера; б) Чохральского; в) ГНК / Fig. 4. Type of temperature distribution of a solid for a crystallization unit with thermal units: а) Bridgman–Stockbarger; б) Czochralski; в) HDC.

Источник: данные авторов.

3. Обсуждение результатов

3.1. Метод Бриджмена

На рис. 5(а, б) показаны результаты компьютерного моделирования распределения температур твёрдого тела в продольном (рис. 5а) и поперечном сечении (рис. 5б) кристалла CaF_2 с тиглем при выращивании кристаллов методом Бриджмена. Как следует из рис. 5б, в сечении А-А на фронте кристаллизации имеет место неравномерный прогрев стенки тигля по окружности в силу характерных конструкторских особенностей, присущих графитовым нагревателям сопротивления в форме «корзинки», обусловленных перегревом их токоподводящих частей (сегментов).

Подобный неравномерный прогрев вызывает конвекцию расплава у стенок тигля и соответствующую в этих местах флуктуацию температуры в расплаве. Здесь можно рассматривать энергетическую природу тепловых флуктуаций в макроскопической системе и её влияние на температурное изменение и величины различных термодинамических параметров, например, теплоёмкости, энтальпии, энтропии плавления, определяющих кинетику и морфологические особенности растущих кристаллов [15]. В работе Джексона [16] приводятся корреляции значений энтропии плавления ΔS с изометричным, либо гранным ростом кристаллов. Согласно [17] при $\Delta S < 1$ имеет место изометричный рост без ячеек и дендритов, но при $\Delta S > 4$ – всегда образуются грани. Обнаруженные корреляции можно связать со степенью беспорядка (ΔS) в системе, которому способствуют, в том числе, вызываемые тепловой флуктуацией сильные конвекционные потоки в расплаве.

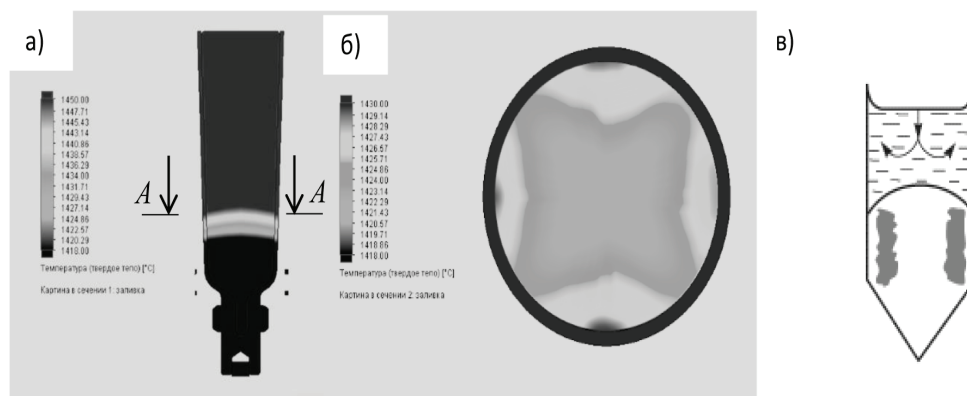


Рис. 5. Результат компьютерного моделирования распределения температуры по вертикальному (а) и поперечному (б) сечению в процессе кристаллизации по методу Бриджмена и картины характерного расположения фасеток (в) в кристаллах иттрий-алюминиевого граната / Fig. 5. Result of computer simulation of the temperature distribution over the vertical (a) and transverse (b) sections during crystallization by the Bridgman method and the pattern of the characteristic arrangement of facets (c) in yttrium-aluminum garnet crystals.

Источник: [1].

В полученной компьютерной модели наглядно проявляется анизотропия в распределении температурного поля в расплавном сегменте по направлениям X и Z в сечении $A-A$ на рис. 5б в области фронта кристаллизации. Разница в температурах расплава у стенок тигля в указанных направлениях достигает до 10–15 градусов.

Неоднородность прогрева тигля, вызывающая тепловые флуктуации в краевых областях расплава, прилегающих к стенкам тигля, формирует под углом 90 градусов симметричное чередование участков с повышенной и пониженной температурой. При дальнейшем понижении общей температуры расплава до температуры кристаллизации T_0 , при $T = T_0 - \Delta T_{max}$ (где ΔT_{max} – максимальное переохлаждение расплава на фронте роста) на F- участках (рис. 5б) изотермической поверхности фронта роста создаются теплофизические условия образования гранных форм [2].

Аналогичная картина расположения зон гранных форм роста по периферии кристаллов иттрий-алюминиевого граната, выращенных методом Бриджмена с выпуклым фронтом роста в сторону расплава, указывалась в [1] и для сравнения показана на фото на рис. 6.

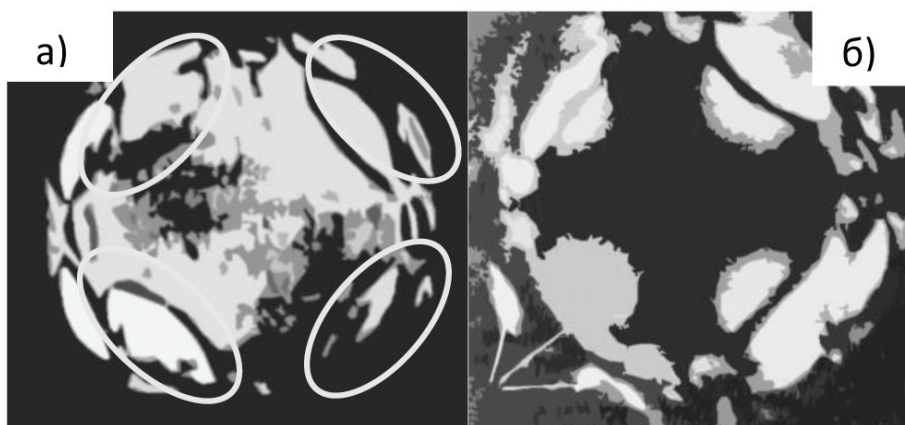


Рис. 6. Вид дефектов (отмечены кружками) в поляризованном свете вдоль образца кристалла иттрий-алюминиевого граната, выращенного методом Бриджмена: картины гранной формы роста (а) и связанными остаточными механическими напряжениями (б) / Fig. 6. Type of defects (marked in cercles) in polarized light along a sample of an yttrium-aluminum garnet crystal grown by the Bridgman method: patterns of faceted growth (a) and associated residual mechanical stresses (b).

Источник: [1], данные авторов.

3.2. Метод Чохральского

Исследования морфологической неустойчивости фронта роста кристаллов иттрий-алюминиевого граната ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$) при выращивании методом Чохральского показывают, что гранный рост проявляется в центре кристаллической були [1]. Результаты проведённого нами компьютерного моделирования распределения тепловых полей в расплаве и растущем кристалле для метода Чохральского, представленные на рис. 7(а, б), абсолютно коррелируют с данными ростовых экспериментов [7].

В методе Чохральского, в отличие от метода Бриджмена, растущий кристалл не контактирует со стенками тигля. Поэтому влияние, связанное с переносом тепла от стенок тигля и воздействием тепловых флуктуаций непосредственно на растущий кристалл со стороны тигля, отсутствуют. Тепловые флуктуации в объёме расплава связаны с существованием конвекционных потоков, на которые активным образом оказывает влияние перемешивание расплава вращающимся кристаллом. Благодаря этому, в методе Чохральского формируется более устойчивая однородная тепловая конвекция в расплаве вокруг растущего кристалла, тогда как в методе Бриджмена имеет место неустойчивая нерегулярная конвекция. Энергичное перемешивание расплава способствует снижению тепловых флуктуаций, вызываемых нерегулярной конвекцией.

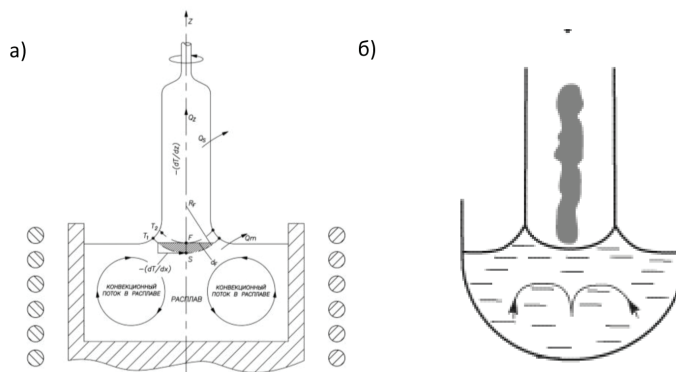


Рис. 8. Схема выращивания кристаллов по методу Чохральского, а) схема процессов теплопереноса в методе Чохральского: Q_z – тепловые потери вдоль кристалла; Q_m – тепловые потери из расплава; Q_c – тепловые потери от кристалла; T_1 и T_2 – изотермические поверхности; $T_1 = T_0$ (температура кристаллизации); $T_2 = T_0 - \Delta T_{max}$ (ΔT_{max} – максимально допустимое переохлаждение на фронте кристаллизации); dT/dz – осевой температурный градиент; dT/dx – радиальный температурный градиент на фронте кристаллизации; F и S – точки начала формирования области гранного роста; R_F – радиус кривизны фронта роста; d_F – размер грани (заштрихованная область); б) картина характерного распределения фасеток в кристаллах иттрий-алюминиевого граната / Fig. 8. Scheme of growing crystals by the Czochralski method, а) a diagram of heat transfer processes in the Czochralski method: Q_z – heat losses along the crystal; Q_m – heat loss from the melt; Q_c – heat losses from the crystal; T_1 and T_2 – isothermal surfaces; $T_1 = T_0$ (crystallization temperature); $T_2 = T_0 - \Delta T_{max}$ (ΔT_{max} is the maximum permissible overcooling at the crystallization front); dT/dz – axial temperature gradient; dT/dx – radial temperature gradient at the crystallization front; F and S – points of the beginning of the formation of the faceted growth area; R_F – radius of curvature of the growth front; d_F – face size (shaded area); б) a picture of the characteristic distribution of facets in yttrium-aluminum garnet crystals.

Источник: [1].

Переохлаждение, создаваемое осевым градиентом dT/dz в F -области изотермической поверхности T_2 вместе с радиальным градиентом dT/dx , повышает энтропию плавления [18] на границе раздела фаз расплав-кристалл и за счёт формирования беспорядка, то есть шероховатости на поверхности роста, создаёт условия для образования фасеток [1] в осевом направлении растущего кристалла (рис. 8б). При этом размер грани определяется из соотношения [1]:

$$d_F = 2\sqrt{\frac{R_F \Delta T_{max}}{G}}, \quad (13)$$

где G – общий градиент температуры на фронте кристаллизации равный сумме градиентов в кристалле и расплаве.

3.3. Метод ГНК

В методе горизонтально направленной кристаллизации (ГНК) тигель в форме лодочки с шихтой исходных материалов перемещается горизонтально через

градиентное поле из зоны плавления в холодную зону отжига. Расплав обычно составляет 1/3 часть лодочки. Отличительной особенностью этого метода от прочих расплавных является то, что в нём высота расплава намного меньше площади его поверхности. Для корректного сравнения полученных результатов математического моделирования по каждому из методов в исходные данные расчётов закладывались одинаковые поперечные сечения получаемых кристаллов и их объёмы. Так, если в случае метода Бриджмена кристаллы имели размеры длиной 345 мм и в диаметре 92 мм, то кристаллы по ГНК имели высоту 38 мм, ширину 183 мм и длину 346 мм. Таким образом, в процессе роста по методу Бриджмена, высота кристалла равнялась 345 мм, то есть в 9 раз больше, чем в случае ГНК. Значительная высота столба расплава по сравнению с площадью его поперечного сечения наряду с неоднородным нагревом на краях приводит к интенсивной неустойчивой нерегулярной конвекции расплава вдоль стенок тигля и образованию в этих местах гранных форм роста. Формируемые интенсивной тепловой конвекцией гидродинамические потоки расплава отесняют области с нарушенным морфологическим составом к периферии в случае метода Бриджмена (рис. 5б), и к центру (рис. 7б) в случае метода Чохральского [1]. В методе ГНК при небольшой высоте расплава, большой длине и большой площади поверхности расплава, открытой по отношению к нагревателю, возникают температурные условия мягкой естественной конвекции [7] ламинарного характера в придонной части и по поверхности расплава без вихревых потоков (рис. 9), что исключает образование интенсивных гидродинамических и конвективных потоков, влияющих на степень стабильности процесса кристаллизации и морфологическую устойчивость фронта кристаллизации.

На рис. 9 приведена схема распределения придонных, поверхностных и в объёме расплава конвекционных потоков в горизонтальном контейнере при выращивании кристаллов по методу ГНК [7].

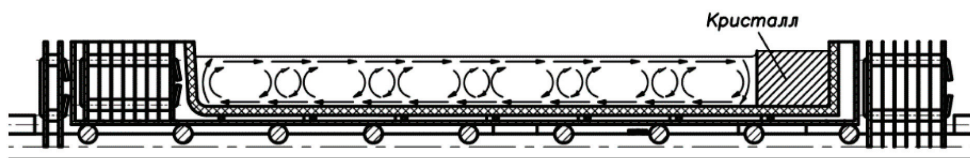


Рис. 9. Схема распределения придонных, поверхностных и в объёме расплава конвекционных потоков в горизонтальном контейнере при выращивании кристаллов по методу ГНК. / Fig. 9. Scheme of distribution of near-bottom and surface convection flows as well as convection flows in the volume of the melt in a horizontal container when growing crystals by the HDC method.

Источник: [7].

В результате, наличие слабой флуктуации температуры расплава вблизи межфазной границы практически не должно вызывать флуктуации скорости роста [7]. В нашем случае симметричное температурное поле, необходимое для создания морфологически устойчивого фронта кристаллизации, создавалось с

использованием двух графитовых ленточных дуговых нагревателей с отдельным управлением по мощности. При этом верхний над поверхностью шихты (и, соответственно, расплава) имел плоскую форму, а нижний имел перевёрнутую П-образную форму и размещался под тиглем (лодочкой) и обеспечивал равномерный прогрев как дна, так и боковых стенок тигля [19]. Как показано на рис. 10 (а, б), создаваемые тепловые условия обеспечивают слегка выпуклую изотерму фронта роста и, благодаря отдельному управлению нагревателей по мощности, нужный угол наклона вертикального градиента, что позволяет выращивать оптически совершенные кристаллы [1; 19].

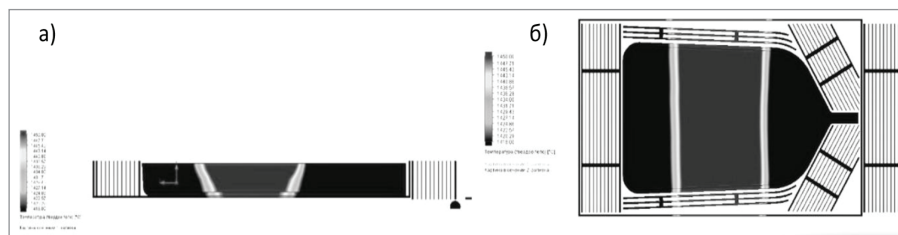


Рис. 10. Результат компьютерного моделирования распределения температуры по продольному (а) и поперечному (б) сечению кристалла CaF_2 с тиглем в процессе кристаллизации по методу ГНК / Fig. 10. Result of computer simulation of the temperature distribution over the longitudinal (a) and transverse (b) sections of a CaF_2 crystal with a crucible in the process of crystallization by the HDC method.

Источник: данные авторов.

На практике в кристаллах, выращенных методом ГНК, оптические дефекты, связанные с гранным ростом, замечены не были [1]. Полученные результаты математического моделирования процесса роста для данного метода также подтверждают эту особенность.

4. Заключение

Проведённые исследования путём математического моделирования в области высокотемпературного роста кристаллов из расплава показали хорошее совпадение полученных результатов анализа процессов, влияющих на морфологическую устойчивость фронта кристаллизации, с известными экспериментальными данными для основных расплавных методов выращивания кристаллов.

Анализ результатов проведённых исследований указывает на преимущественные особенности метода ГНК по сравнению с остальными рассмотренными ростовыми методами по целому ряду актуальных вопросов.

1. Однородное тепловое поле вдоль оси роста кристалла при выпуклом фронте кристаллизации не создаёт предпосылок образования гранных форм роста. Указывает на значительное влияние теплофизических причин в образовании гранного роста.

2. В методе Бриджмена неравномерный прогрев вызывает конвекцию расплава у стенок тигля и соответствующую в этих местах флуктуацию температу-

ры в расплаве, что оказывает влияние на температурное изменение и величину энтропии плавления, которая в числе прочих термодинамических параметров определяет кинетику и морфологические особенности растущих кристаллов, связанных с гранным ростом кристаллов. Согласно [7] при $\Delta S < 1$ имеет место изометричный рост без ячеек и дендритов, но при $\Delta S > 4$ – всегда образуются грани. Указанные корреляции можно связать со степенью беспорядка (ΔS) в системе, которому способствуют, в том числе, вызываемые тепловой флуктуацией сильные конвекционные потоки в расплаве. В вертикальном методе кристаллизации по Бриджмену при переходе от кристаллов большого диаметра к меньшему из-за изменения плотности потока излучения I от нагревателя до тигля с веществом, в соответствии с зависимостью $I \sim (1/R^2)$, для поддержания постоянных энергетических затрат на получение расплава необходимо изменить конструкцию теплового узла, соответственно приблизив нагреватель к тиглю для уменьшения расстояния R . В противном случае необходимо значительно увеличить энергетические затраты на нагрев.

3. В методе Чохральского тепловые флуктуации в объёме расплава связаны с существованием конвекционных потоков, на которые активным образом оказывает влияние перемешивание расплава вращающимся кристаллом. Благодаря этому, в методе Чохральского формируется более устойчивая однородная тепловая конвекция в расплаве вокруг растущего кристалла, в отличие от метода Бриджмена, в котором имеет место неустойчивая нерегулярная конвекция. Однако переохлаждение, создаваемое в центре изотермической поверхности фронта роста, повышает энтропию плавления на границе раздела фаз расплава-кристалл и за счёт формирования беспорядка, то есть шероховатости на поверхности роста, создаёт условия для образования фасеток в осевом направлении растущего кристалла.

4. В методе ГНК при небольшой высоте расплава, большой длине и большой площади поверхности расплава, открытой по отношению к нагревателю, возникают температурные условия мягкой естественной конвекции ламинарного характера в придонной части и по поверхности расплава без вихревых потоков, что исключает образование интенсивных гидродинамических и конвективных потоков, влияющих на степень стабильности процесса кристаллизации и морфологическую устойчивость фронта кристаллизации. Специфика выращивания кристаллов горизонтальным методом не требует изменения конструкции теплового узла для получения расплава при выращивании кристаллов любого размера в пределах длины нагревательного модуля. При ГНК-методе расстояние между нагревателем и тиглем с плавящимся веществом остаётся неизменным независимо от размера выращиваемого кристалла и, следовательно, плотность потока излучения, приходящегося на поверхность вещества от источника (нагревателя), не будет изменяться, как в случае метода Бриджмена.

Статья поступила в редакцию 29.11.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Багдасаров Х. С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. М.: Физматлит, 2004. 162 с.
2. Чернов А. А. Теория устойчивости гранных форм кристаллов // Кристаллография. 1971. Т. 16. № 4. С. 842–863.
3. The Bridgman Method Growth and Spectroscopic Characterization of Calcium Fluoride Single Crystals / Elswie H. I., Lazarević Z. Ž., Radojević V., Gilić M., Rabasović M., Šević D., Romčević N. Ž. // Science of Sintering. 2016. Vol. 48. Iss. 3. P. 333–341. DOI: 10.2298/SOS1603333E.
4. Nicoara I., Stef M., Pruna A. Growth of YbF₃+ -doped CaF₂+ crystals and characterization of Yb³⁺/Yb²⁺ conversion // Journal of Crystal Growth. 2008. Vol. 310. Iss. 7–9. P. 1470–1475. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.11.066.
5. Czochralski growth of UV-grade CaF₂ single crystals using ZnF₂ additive as scavenger / Ko J. M., Tozawa S., Yoshikawa A., Inaba K., Shishido T., Oba T., Oyama Y., Kuwabara T., Fukuda T. // Journal of Crystal Growth. 2001. Vol. 222. Iss. 1–2. P. 243–248. DOI: 10.1016/S0022-0248(00)00928-3.
6. Mazelsky R., Hopkins R. H., Kramer W. E. Czochralski-growth of calcium fluorophosphates // Journal of Crystal Growth. 1968. Vol. 3–4. P. 260–264. DOI: 10.1016/0022-0248(68)90145-0.
7. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов. М.: Мир, 1974. 540 с.
8. Тепловой узел установки для выращивания галоидных кристаллов методом горизонтально направленной кристаллизации. Патент РФ № 2643980 от 02.06.2018 г. / Юсим. В. А., Калиммулин Р. К., Рябченков В. В., Саркисов С. Э.
9. Соболев Б. П., Ломова В. И., Каримов Д. Н. Установка для выращивания кристаллов. Патент РФ № 120658 от 27.09.2012 г.
10. Алимов О. М., Аношин К. Е., Ежлов В. С. Устройство для выращивания монокристаллов из расплава методом Чохральского. Патент РФ № 2534103 от 27.11.2014 г.
11. Блистанов А. А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики: учебное пособие для вузов. М.: Наука, МИСИС, 2000. 432 с.
12. Сцинтилляционные детекторы на основе монокристаллов CaF₂-Eu / Шульгин Б. В., Бузмакова С. И., Викторов Л. В., Крымов А. Л., Петров В. Л., Подуровский С. В., Козлов А. А. и др. // Атомная энергия. 1993. Т. 75. № 1. С. 28–33.
13. Багдасаров Х. С. Горяинов Л. А. Тепло- и массоперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 224 с.
14. Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for Horizontal directional solidification method / Yusim V. A., Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V., Kloss Yu. Yu., Govorun I. V., Ivanova L. V., Sakmarov A. V. // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1560: International Interdisciplinary Scientific Conference “Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics” (20–23 April 2020, Moscow, Russian Federation). P. 012060. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012060.
15. Velazquez L., Curilef S. A thermodynamic fluctuation relation for temperature and energy // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2009. Vol. 42. No. 9. P. 095006–095025. DOI: 10.1088/1751-8113/42/9/095006.
16. Jackson K. A. Single Crystal Growth // Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids / ed. H. S. Peiser. New York: Pergamon Press, 1967. P. 17.
17. Tiller W. A. Crystal Growth from the melt // The art and Science of Growing Crystals / ed. J. J. Gilman. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1963. P. 277.

18. Utech H. P., Brower W. S., Early J. G. Thermal correction and crystal growth in horizontal boats, from pattern, velocity measurement, and solid distributions // *Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids B29* / ed. H. S. Peiser. New York: Pergamon Press, 1967. P. 201–205.
19. Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V. A device for producing single crystals of refractory fluorides. RF patent № 2608891, 26.01.2017.

REFERENCES

1. Bagdasarov Kh. S. *Vysokotemperaturnaya kristallizatsiya iz rasplava* [High temperature crystallization from the melt]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2004. 162 p.
2. Chernov A. A. [Stability theory of faceted crystal shapes]. In: *Kristallografiya* [Crystallography Reports], 1971, vol. 16, no. 4, pp. 842–863.
3. Elswie H. I., Lazarević Z. Ž., Radojević V., Gilić M., Rabasović M., Šević D., Romčević N. Ž. The Bridgman Method Growth and Spectroscopic Characterization of Calcium Fluoride Single Crystals. In: *Science of Sintering*, 2016, vol. 48, iss. 3, pp. 333–341. DOI: 10.2298/SOS1603333E.
4. Nicoara I., Stef M., Pruna A. Growth of YbF₃+doped CaF₂+ crystals and characterization of Yb³⁺/Yb²⁺ conversion. In: *Journal of Crystal Growth*, 2008, vol. 310, iss. 7–9, pp. 1470–1475. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2007.11.066.
5. Ko J. M., Tozawa S., Yoshikawa A., Inaba K., Shishido T., Oba T., Oyama Y., Kuwabara T., Fukuda T. Czochralski growth of UV-grade CaF₂ single crystals using ZnF₂ additive as scavenger. In: *Journal of Crystal Growth*, 2001, vol. 222, iss. 1–2, pp. 243–248. DOI: 10.1016/S0022-0248(00)00928-3.
6. Mazelsky R., Hopkins R. H., Kramer W. E. Czochralski-growth of calcium fluorophosphates. In: *Journal of Crystal Growth*, 1968, vol. 3–4, pp. 260–264. DOI: 10.1016/0022-0248(68)90145-0.
7. Додиз Р., Паркер Р. *The Growth of Single Crystals*. New Jersey, Englewood Cliffs, 1970.
8. Yusim V. A., Kalimmulin R. K., Ryabchenkov V. V., Sarkisov S. E. Thermal node of the installation for growing halide crystals by the method of horizontal directional crystallization. RF patent No. 2643980 dated 02.06.2018.
9. Sobolev B. P., Lomova V. I., Karimov D. N. Installation for growing crystals. RF patent no. 120658 dated 27.09.2012.
10. Alimov O. M., Anoshin K. E., Ezhlov V. S. A device for growing single crystals from a melt by the Czochralski method. RF patent no. 2534103 dated 27.11.2014.
11. Blistanov A. A. *Kristally kvantovoi i nelineinoi optiki* [Crystals of quantum and nonlinear optics]. Moscow, Nauka, MISIS Publ., 2000. 432 p.
12. Shul'gin B. V., Buzmakova S. I., Viktorov L. V., Krymov A. L., Petrov V. L., Podurovskii S. V., Kozlov A. A. [Scintillation detectors on the base of CaF₂-Eu single crystals]. In: *Atomnaya energiya* [Atomic Energy], 1993, vol. 75, no. 1, pp. 28–33.
13. Bagdasarov Kh. S., Goryainov L. A. *Teplo- i massoperenos pri vyrashchivanii monokristallov napravlennoi kristallizatsiei* [Heat and mass transfer in growing single crystals of directional solidification]. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2007. 224 p.
14. Yusim V. A., Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V., Kloss Yu. Yu., Govorun I. V., Ivanova L. V., Sakmarov A. V. Mathematical modeling of heat and mass transfer processes in the graphite thermal unit of the crystallization apparatus for horizontal directional solidification method. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1560: International Interdisciplinary Scientific Conference “Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics” (20–23 April 2020, Moscow, Russian Federation), pp. 012060. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012060.

15. Velazquez L., Curilef S. A thermodynamic fluctuation relation for temperature and energy. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2009, vol. 42, no. 9, pp. 095006–095025. DOI: 10.1088/1751-8113/42/9/095006.
16. Jackson K. A. Single Crystal Growth. In: Peiser H. S., ed. *Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids*. New York, Pergamon Press Publ., 1967, pp. 17.
17. Tiller W. A. Crystal Growth from the melt. In: J. J. Gilman, ed. *The art and Science of Growing Crystals*. New York, John Wiley and Sons, Inc. Publ., 1963, p. 277.
18. Utech H. P., Brower W. S., Early J. G. Thermal correction and crystal growth in horizontal boats, from pattern, velocity measurement, and solid distributions. In: Peiser H. S., ed. *Crystal Growth: Proceedings of an International Conference on Crystal Growth (Boston, 20–24 June, 1966). Supplement to the Journal of Physics and Chemistry of Solids B29*. New York, Pergamon Press Publ., 1967, pp. 201–205.
19. Sarkisov S. E., Ryabchenkov V. V. A device for producing single crystals of refractory fluorides. RF patent № 2608891, 26.01.2017.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Саркисов Степан Эрвандович – кандидат физико-математических наук, заведующий Лабораторией экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Юсим Валентин Александрович – старший научный сотрудник Лаборатории экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: Yusim_VA@nrcki.ru;

Калимуллин Раф Каюмович – научный сотрудник Лаборатории экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Петров Сергей Владимирович – младший научный сотрудник Лаборатории экспериментального моделирования и синтеза тугоплавких материалов Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: pilzeners@mail.ru

Клосс Юрий Юрьевич – доктор физико-математических наук, начальник отдела физических процессов и прикладных технологий (ОМФПиПТ) Управления по нераспространению и физической защите Курчатовского комплекса реабилитации и нераспространения Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;
e-mail: Kloss_YY@nrcki.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Stepan E. Sarkisov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Laboratory Head, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Centre ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Valentin A. Yusim – senior researcher, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: Yusim_VA@nrcki.ru;

Raf K. Kalimullin – researcher, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: dr.stevesarkisov@gmail.com;

Sergey V. Petrov – research assistant, Laboratory of Experimental Modeling and Synthesis of Refractory Materials, Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: pilzeners@mail.ru;

Yuri Y. Kloss – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Departmental Head, Department of Physical Processes and Applied Technologies (OMPPiPT) of the Directorate for Nonproliferation and Physical Protection of the Kurchatov Rehabilitation and Nonproliferation Complex, National Research Center ‘Kurchatov Institute’;

e-mail: Kloss_YY@nrcki.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Моделирование тепловых процессов, влияющих на образование гранных форм роста в монокристаллах / Юсим В. А., Саркисов С. Э., Калимуллин Р. К., Петров С. В., Клосс Ю. Ю. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. №4. С. 28–48.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-28-48

FOR CITATION

Yusim V. A., Sarkisov S. E., Kalimullin R. K., Petrov S. V., Kloss Y. Y. Modeling of thermal processes affecting the origin of facial growth forms in single crystals. In: *Bulletin of the Moscow state regional University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 28–48.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-28-48

УДК 533.72:535.3:539.1

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-49-65

ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКОГО СЛОЯ МЕТАЛЛА С УЧЁТОМ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ЗЕРКАЛЬНОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТЬ

Каримов Ф. А., Юшканов А. А.

Московский государственный областной университет

141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация

Аннотация

Цель: проанализировать зависимость электрической проводимости тонкой металлической плёнки от характера зависимости коэффициента зеркальности от угла падения электронов на поверхность металла. Рассмотрена зависимость коэффициента зеркальности от угла падения, удовлетворяющая условию Андреева.

Процедура и методы. Рассмотрена модель граничных условий, учитывающая зависимость коэффициента зеркальности от угла падения электронов на поверхность металла.

Результаты. Рассмотренная модель граничных условий в предельных случаях переходит в граничное условие Фукса и в граничное условие Соффера. Кроме того, рассмотренное граничное условие, в отличие от граничных условий Фукса и Соффера, удовлетворяет критерию Андреева при почти касательном падении электронов на поверхность металла.

Теоретическая и практическая значимость. Полученные результаты могут найти применение при рассмотрении взаимодействия электромагнитного излучения с тонкой металлической плёнкой, в проволоках, в мелких металлических частицах и при описании скин-эффекта в металле

Ключевые слова: электрическое поле, граничные условия, коэффициент зеркальности, угол падения, кинетическое уравнение, скин-эффект

Благодарности. Выражаем благодарность за полезные рекомендации доценту кафедры теоретической физики МГОУ, кандидату физико-математических наук Камалову Тимур Фяновичу.

CONDUCTIVITY OF A THIN METAL LAYER TAKING INTO ACCOUNT THE DEPENDENCE OF THE SPECULARITY COEFFICIENT ON THE ANGLE OF THE ELECTRON'S INCIDENCE ON THE SURFACE

F. Karimov, A. Yushkanov

Moscow Region State University

ul. Very Voloshinoy 24, 141014 Mytishchi, Moscow region, Russian Federation

Abstract

The aim of this work is to analyze the dependence of the electrical conductivity of a thin metal film on the nature of the dependence of the specular coefficient on the angle of incidence of electrons on the metal surface. The dependence of the specular coefficient on the angle of incidence is considered, satisfying the Andreev condition.

Methodology. A model boundary condition is considered, taking into account the dependence of the specular coefficient on the angle of incidence of electrons on the metal surface.

Results. The considered model of the boundary conditions in the limiting cases transforms into the Fuchs boundary condition and into the Soffer boundary condition. In addition, the considered boundary condition, in contrast to the Fuchs and Soffer boundary conditions, satisfies the Andreev criterion for an almost tangential incidence of electrons on the metal surface.

Research implications. The results obtained can find application in the study of the interaction of electromagnetic radiation with a thin metal film, wires, in small metal particles and in describing the skin effect in a metal.

Keywords: electric field, boundary conditions, specular coefficient, angle of incidence, kinetic equation, skin effect.

Acknowledgments. We are grateful to Timur Fyfanovich Kamalov [Cand. Sci. (Phys-Math.), Assoc. Prof., Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University] for useful recommendations.

Введение

Задача об электрической проводимости тонкой металлической плёнки имеет большое прикладное и теоретическое значение. Этой задаче посвящено большое число работ. Для тонких плёнок определяющее влияние на электрическую проводимость оказывают граничные условия при взаимодействии электронов с поверхностью металла. В большей части работ используются зеркально-диффузные граничные условия Фукса [9]. Предполагается, что q -я часть электронов, падающих на поверхность металла, отражается зеркально, а остальные – диффузно. При этом считается, что коэффициент зеркальности q не зависит от угла падения электронов на поверхность.

В такой постановке рассматривалась задача об электрической проводимости металлической плёнки в целом ряде работ. Обзор ранних работ можно найти в [10]. Отметим также работы [3; 7; 8; 14]. В последней из указанных работ рассмотрено влияние несферичности поверхности Ферми на электрическую проводимость металлической плёнки.

На самом деле коэффициент зеркальности q должен зависеть от угла падения электронов на поверхность металла. Вид такой зависимости был предложен на основе модельных представлений о поверхности металла в работе [11].

Модель Соффера была использована в работе [4] для расчёта электрической проводимости тонкой проволоки.

В работе Андреева [9] было доказано, что в пределе $\theta \rightarrow \pi/2$, где θ – угол между нормалью к поверхности и направлением движения электрона коэффициент зеркальности должен вести себя как:

$$q(\theta) \approx 1 - A |\cos \theta|. \quad (1)$$

В то же время модель Соффера в аналогичной ситуации предсказывает зависимость:

$$q(\theta) \approx 1 - B \cos^2 \theta. \quad (2)$$

Здесь величины A и B зависят от свойств поверхности.

Сравнение формул (1) и (2) показывает, что модель Соффера неверно описывает зависимость коэффициента зеркальности q от угла падения при почти касательном падении электрона на поверхность.

В нашей работе будет рассмотрена модель граничных условий, которая экстраполирует модели Фукса и Соффера. При этом она удовлетворяет условию Андреева (1).

Постановка задачи и основные уравнения

Кинетическое уравнение с интегралом столкновений релаксационного типа для электронов имеет следующий вид [1; 6; 10]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e_0 \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \nu (f_{eq} - f), \quad (3)$$

где f_{eq} – равновесное распределение Ферми в твердотельной плазме

$$f_{eq} = \left[1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right]^{-1}.$$

Здесь ε – энергия электронов, μ – химический потенциал, T – температура, k_B – постоянная Больцмана, e_0 – заряд электрона. Величина $\nu = 1/\tau$ – частота столкновений электронов, τ – среднее время между двумя последовательными столкновениями электрона. В [12] проведён анализ величины τ для различных материалов.

Будем предполагать, что распределение электронов можно считать сферически-симметричным. В этом случае для энергии электронов ε_0 имеем:

$$\varepsilon_0 = \frac{mv^2}{2}.$$

Здесь m – эффективная масса электрона.

Будем считать электрическое поле достаточно слабым, чтобы была возможна линеаризация. Скин-эффектом будем пренебрегать. То есть будем предполагать, что глубина скин-слоя превышает ширину плёнки. При этом локально равновесная функция распределения f_{eq} принимает вид:

$$f_{eq} = f_0, \quad f_0 = \left[1 + \exp \frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right]^{-1}.$$

В линейном случае слагаемое с электрическим полем в (1.2) [12] можно записать в виде:

$$e_0 \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial p} \simeq e_0 \mathbf{E} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}. \quad (4)$$

Будем предполагать, что толщина плёнки равна a . Рассмотрим декартову систему координат с центром на нижней поверхности плёнки. Направим ось x перпендикулярно поверхности плёнки вглубь металла. Ось y направим вдоль направления электрического поля, тогда электрическое поле будет иметь только y компоненту, и можно записать:

$$E_y = E_0 e^{-i\omega t}.$$

Линеаризованная функция распределения имеет вид [1]:

$$f = f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \psi e^{-i\omega t}. \quad (5)$$

Здесь ω – частота поля, t – время.

Рассмотрим случай вырожденного Ферми-газа электронов в металле:

$$f_0 = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon),$$

где $\Theta(x)$ – функция Хэвисайда $\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F), \quad f = f_0 + \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \psi e^{-i\omega t}. \quad (6)$$

Здесь $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, ε_F – энергия Ферми.

Линеаризованное уравнение для функции ψ может быть записано в следующем виде [10]:

$$-i\omega\psi + v_x \frac{\partial \psi}{\partial x} - e_0 v_y E_0 = -v\psi. \quad (7)$$

Рассмотрим граничные условия на поверхности плёнки. Введём обозначения:

$$\begin{aligned} \psi^+(x, v_x) &= \psi(x, v_x), & v_x > 0, \\ \psi^-(x, v_x) &= \psi(x, v_x), & v_x < 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Рассмотрим граничные условия на поверхности плёнки. С учётом обозначений (8) они имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi^+(0, v_x) &= q(\theta) \psi^-(0, -v_x), \\ \psi^-(a, v_x) &= q(\theta) \psi^+(a, -v_x). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь θ – угол между направлением движения электрона и осью x .

Решение задачи о проводимости тонкой металлической плёнки

Решая линеаризованное кинетическое уравнение, получаем:

$$\begin{aligned}\psi^+ &= \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + \psi_1^+ \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} x\right), \\ \psi^- &= \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + \psi_1^- \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} (x - a)\right).\end{aligned}\quad (10)$$

При этом ψ_1^+ , ψ_1^- – новые неизвестные функции, не зависящие от координаты x , определяемые из граничных условий.

Подставим функции ψ^+ , ψ^- в граничные условия. В результате получаем:

$$\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + \psi_1^+ = q(\theta) \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + q(\theta) \psi_1^- (-v_x) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right), \quad v_x > 0,$$

$$\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + \psi_1^- = q(\theta) \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + q(\theta) \psi_1^+ (-v_x) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right), \quad v_x < 0.$$

Отсюда имеем:

$$\begin{aligned}\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + \psi_1^+ &= q(\theta) \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + q(\theta) \left(-\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + q(\theta) \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + \right. \\ &\quad \left. + \psi_1^+ q(\theta) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \right) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right), \quad v_x > 0, \\ \left(1 - q^2(\theta) \exp\left(2 \frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \right) \psi_1^+ &= -\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} \left(1 - q(\theta) + q(\theta) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right) - \right. \\ &\quad \left. - q^2(\theta) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \right).\end{aligned}$$

Таким образом, получаем:

$$\psi_1^+ = -\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} \frac{(1 - q(\theta)) \left(1 + q(\theta) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \right)}{\left(1 - q^2(\theta) \exp\left(2 \frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \right)}.$$

Упрощая это выражение, получаем:

$$\psi_1^+ = -\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} \frac{1 - q(\theta)}{1 - q(\theta) \exp\left(\frac{i\omega - v}{v_x} a\right)}.\quad (11)$$

Для функции ψ_1^- получаем:

$$\begin{aligned} \psi_1^- &= -\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} + q(\theta) \frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} - \left(\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} \frac{1 - q(\theta)}{1 - q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right)} \right) \times \\ &\quad q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \\ \psi_1^- &= -\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} \left(1 - q(\theta) + \left(\frac{1 - q(\theta)}{1 - q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right)} \right) \times \right. \\ &\quad \left. q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right) \right). \\ \psi_1^- &= -\frac{E_0 e_0 v_y (1 - q(\theta))}{v - i\omega} \left(1 + \frac{q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right)}{1 - q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right)} \right). \end{aligned}$$

В результате получаем:

$$\psi_1^- = -\frac{E_0 e_0 v_y}{v - i\omega} \frac{1 - q(\theta)}{1 - q(\theta) \exp\left(-\frac{i\omega - v}{v_x} a\right)}. \quad (12)$$

Отметим, что имеет место соотношение:

$$\psi_1^-(v_x) = \psi_1^+(-v_x).$$

Введём сферическую систему координат в пространстве скоростей:

$$v_x = v_F \cos(\theta), \quad v_y = v_F \sin(\theta) \cos \varphi, \quad \cos(\theta) = v_x / v_F. \quad (13)$$

Тогда решение кинетического уравнения переписывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_1^+ &= \frac{E_0 e_0 a v_y}{v - i\omega} + \psi_1^+ \exp\left(-\frac{v - i\omega}{v_x} x\right). \\ \psi_1^- &= \frac{E_0 e_0 a v_y}{v - i\omega} + \psi_1^- \exp\left(-\frac{v - i\omega}{v_x} (x - a)\right). \end{aligned}$$

Введём безразмерную величину $z_0 = a(v - i\omega)/v_F$. Или $z_0 = x_0 + iy_0$, где $x_0 = av/v_F$, $y_0 = a\omega/v_F$. Через x_0 обозначена безразмерная частота столкновений электронов, а через y_0 – безразмерная частота поля.

Тогда выражения для ψ^+ , ψ^- примут следующий вид:

$$\psi^+ = \frac{E_0 e_0 a \sin(\theta) \cos \varphi}{z_0 v_F} \times \left(1 - \frac{1 - q(\theta)}{1 - q(\theta) \exp\left(-\frac{z_0 x v_F}{av_x \cos(\theta)}\right)} \exp\left(-\frac{z_0 x v_F}{av_x \cos(\theta)}\right) \right),$$

$$\psi^- = \frac{E_0 e_0 a \sin(\theta) \cos \varphi}{z_0 v_F} \times \left(1 - \frac{1 - q(\theta)}{q(\theta) \exp\left(\frac{z_0 v_F}{v_x \cos(\theta)}\right)} \exp\left(-\frac{z_0 (x - a) v_F}{av_x \cos(\theta)}\right) \right). \quad (14)$$

Для учёта зависимости коэффициента зеркальности q от угла падения θ электронов на поверхность Соффер предложил следующую модель:

$$q(\theta) = \exp\left(-\left(4\pi H\right)^2 \cos^2 \theta\right). \quad (15)$$

Здесь через H обозначена среднеквадратичная высота рельефа поверхности. При $\theta \rightarrow \pi/2$ мы из этой формулы получаем:

$$q(\theta) \simeq 1 - (4\pi H)^2 \cos^2 \theta, \quad (16)$$

что противоречит условию Андреева (1).

Через A обозначается некоторая постоянная, зависящая от свойств поверхности.

Таким образом, наблюдается противоречие между моделью Соффера (15) и условием Андреева [2]. Поэтому модель Соффера (2) нуждается в существенной доработке.

Нами предложено следующее модельное соотношение для коэффициента зеркальности, учитывающее зависимость коэффициента зеркальности от угла падения электрона θ на поверхность металла, то есть $v = v_F \cos \theta$:

$$q(\theta) = q_0 + (1 - q_0) \exp\left(-b_1 |\cos \theta| - b_2 |\cos^2 \theta|\right). \quad (17)$$

Здесь коэффициенты $q_0 > 0$, $b_1 > 0$, $b_2 > 0$ – величины, зависящие от свойств поверхности металла. В данном подходе они рассматриваются как эмпирические величины. Отметим, что в данном подходе имеем:

$$q(\theta) \rightarrow q(\cos(\theta)).$$

При $b_1 \gg 1$, $b_2 \gg 1$ почти при всех углах падения θ имеем $q(\theta) = q_0$. Таким образом, в этом пределе коэффициент зеркальности не зависит от угла падения

электронов на поверхность металла, и граничное условие переходит в граничное условие Фукса (рис. 1).

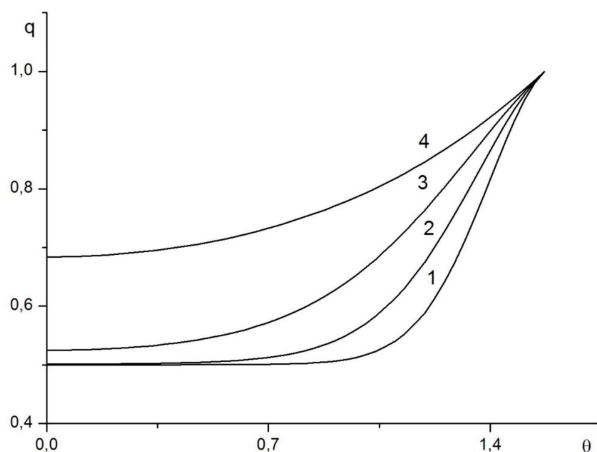


Рис. 1. Зависимость коэффициента зеркальности q от угла падения θ электрона на поверхность и переход в граничное условие Фукса / Fig. 1. Dependence of the specularity coefficient q on the angle of incidence θ of the electron on the surface and the transition to the Fuchs boundary condition.

Источник: подготовлено авторами с помощью математического приложения Mathcad.

Для всех кривых $b_1 = 1$, $q_0 = 0,5$. Для кривой 1 величина $b_2 = 10$, для кривой 2 величина $b_2 = 5$, для кривой 3 величина $b_2 = 2$, для кривой 4 величина $b_2 = 0$.

Рассмотрим другой случай. Пусть в некотором диапазоне углов θ $b_1 |\cos\theta| \ll b_2 \cos^2\theta$ $b_2 \cos^2\theta \ll 1$. Тогда рассматриваемое граничное условие принимает вид, показанный на рис. 2:

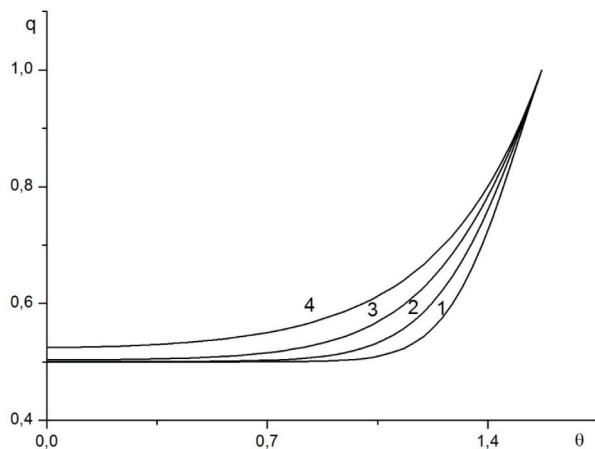


Рис. 2. Модель Соффера при $\theta \rightarrow \pi/2$ с коэффициентом зеркальности $q \rightarrow 1$ / Fig. 2 Soffer's model at $\theta \rightarrow \pi/2$ with a specular coefficient $q \rightarrow 1$.

Источник: подготовлено авторами с помощью математического приложения Mathcad.

Кривая 1 соответствует значению параметра $b_2 = 10$, кривая 2 соответствует $b_2 = 5$, кривая 3 соответствует $b_2 = 2$, кривая 4 соответствует $b_2 = 0$. Во всех случаях $b_1 = 3$, $q_0 = 0,5$.

$$q(\theta) \approx 1 - b_2(1 - q_0)\cos^2 \theta.$$

Это соотношение соответствует модели Соффера (16) при

$$b_2(1 - q_0) = (4\pi H)^2.$$

Из рис. 1 и 2 видно, что при $\theta \rightarrow \pi/2$ коэффициент зеркальности стремится к 1. В то же время для случая падения электронов в направлениях, близких к нормальному, коэффициент зеркальности перестаёт зависеть от угла θ .

Таким образом, рассматриваемая модель является экстраполяцией моделей граничных условий Фукса и Соффера.

При этом при $\theta \rightarrow \pi/2$ справедливо соотношение:

$$q \approx 1 - b_1(1 - q_0)|\cos \theta|.$$

Это соответствует условию Андреева [2].

Для плотности тока $\mathbf{j}$ справедливо выражение [1]:

$$\mathbf{j} = e \int \mathbf{v} f \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Направление вектора $\mathbf{j}$ совпадает с направлением электрического поля $\mathbf{E}$. В линейном приближении мы получаем следующий результат:

$$j_y = e_0 e^{-i\omega t} \int v_y \delta(\epsilon - \epsilon_F) \psi \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Подставляем в это соотношение явное выражение для функции ψ . В результате получаем:

$$j_y = j_v + j^+ + j^-. \quad (18)$$

Здесь величины j_v, j^+, j^- определены следующим образом:

$$j_v = e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} \int \frac{v_y^2 \delta(\epsilon - \epsilon_F)}{(\nu - i\omega)} \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$j^+ = e_0 e^{-i\omega t} \int_{v_x > 0} \delta(\epsilon - \epsilon_F) v_y \psi_1^+ \exp\left(-\frac{z_0 v_F x}{(\nu - i\omega)}\right) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$j^- = e_0 e^{-i\omega t} \int_{v_x < 0} \delta(\epsilon - \epsilon_F) v_y \psi_1^- \exp\left(-\frac{z_0 v_F (x - a)}{a \nu \cos(\theta)}\right) \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Величина j_v не зависит от коэффициента зеркальности и описывает объёмную проводимость. Величины j^+ и j^- описывают влияние поверхности на электрическую проводимость плёнки.

Учитывая, что $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, и переходя в сферическую систему координат в пространстве скоростей, получаем:

$$j_v = 2e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} \frac{am^3}{z_0 v_F (2\pi\hbar)^3} \int_{v=0}^{v=\infty} dv \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi v^4 \sin^3 \theta \cos^2 \varphi \delta(\varepsilon - \varepsilon_F),$$

$$j^+ = -\frac{2e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} am^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_{v=0}^{v=\infty} dv \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \times$$

$$\times v^4 \frac{\sin^3(\theta) \cos^2 \varphi (1 - q \cos(\theta))}{z_0 v_F \left(1 - q \cos(\theta) \exp\left(-\frac{z_0 v_F}{v_x \cos \theta}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 v_F x}{av \cos(\theta)}\right),$$

$$j^- = -\frac{2e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} am^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_{v=0}^{v=\infty} dv \int_{\pi/2}^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \times$$

$$\times v^4 \frac{\sin^3(\theta) \cos^2 \varphi (1 - q \cos(\theta))}{z_0 v_F \left(1 - q \cos(\theta) \exp\left(\frac{z_0 v_F}{v_x q \cos \theta}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 v_F (x-a)}{av \cos(\theta)}\right).$$

Выражение $\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$ можно преобразовать следующим образом:

$$\delta(\varepsilon - \varepsilon_F) = \delta\left(\frac{mv^2}{2} - \frac{mv_F^2}{2}\right) = \frac{2}{m} \delta((v - v_F)(v + v_F)) = \frac{1}{mv_F} \delta(v - v_F).$$

Здесь $v_F = \sqrt{2\varepsilon_F / m}$ – скорость электронов на поверхности Ферми.

Сделаем следующую замену: $t = \cos \theta$. Вычисление по углу φ выполняется тривиально. В результате получаем:

$$j_v = 2e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} \frac{\pi am^2}{v_F^2 z_0 (2\pi\hbar)^3} \int_{v=0}^{v=\infty} dv \int_{-1}^1 dt v^4 (1 - t^2) \delta(v - v_F),$$

$$j^+ = -\frac{2\pi e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} am^2}{v_F^2 z_0 (2\pi\hbar)^3} \int_{v=0}^{v=\infty} dv \int_0^1 dt \times$$

$$\times \delta(v - v_F) v^4 \frac{(1 - t^2)(1 - q(t))}{z_0 v_F \left(1 - q(t) \exp\left(-\frac{z_0 v_F}{v_x \cos \theta}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 v_F x}{avt}\right).$$

$$j^- = -\frac{2\pi e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} a m^2}{v_F^2 z_0 (2\pi\hbar)^3} \int_{v=0}^{v=\infty} dv \int_{-1}^0 dt \times \\ \times \delta(v - v_F) v^4 \frac{(1-t^2)(1-q(t))}{z_0 v_F \left(1 - q(t) \exp\left(\frac{z_0 v_F}{v_x t}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 v_F (x-a)}{avt}\right).$$

Проведём вычисление интеграла по переменной v . В результате получаем:

$$j_v = 2e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} \frac{\pi v_F^2 a m^2}{z_0 (2\pi\hbar)^3} \int_{-1}^1 (1-t^2) dt, \\ j^+ = -\frac{2\pi v_F^2 e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} a m^2}{z_0 (2\pi\hbar)^3} \int_0^1 \frac{(1-t^2)(1-q(t))}{\left(1 - q(t) \exp\left(-\frac{z_0}{t}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 x}{at}\right) dt, \\ j^- = -\frac{2\pi v_F^2 e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} a m^2}{z_0 (2\pi\hbar)^3} \int_{-1}^0 \frac{(1-t^2)(1-q(t))}{\left(1 - q(t) \exp\left(\frac{z_0}{t}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 (x-a)}{at}\right) dt.$$

Величина j_0 вычисляется в явном виде:

$$j_v = e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} \frac{8\pi v_F^2 a m^2}{3z_0 (2\pi\hbar)^3}.$$

Равновесная концентрация электронов n находится по следующей формуле:

$$n = \int f_0 \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Проводя соответствующие вычисления, получаем:

$$n = \frac{8\pi (mv_F)^3}{3z_0 (2\pi\hbar)^3}. \quad (19)$$

С учётом этого соотношения выражение для j_0 принимает следующий вид:

$$j_0 = e_0^2 E_0 e^{-i\omega t} \frac{a}{mv_F z_0}.$$

Проводимость определяется соотношением:

$$\sigma = \frac{j_y}{E_y} = \frac{j_y}{E_0 e^{-i\omega t}}. \quad (20)$$

Поэтому для объёмной проводимости σ_v справедливо следующее равенство:

$$\sigma_v = \frac{8\pi v_F^2 e_0^2 a m^2}{3z_0 (2\pi\hbar)^3}.$$

С учётом соотношения (19) для концентрации электронов n (19) получаем:

$$\sigma_v = \frac{ne_0^2 a}{z_0 m v_F}.$$

Переходя от безразмерной величины z_0 к размерным переменным, получаем:

$$\sigma_v = \frac{ne_0^2}{(\nu - i\omega)m}. \quad (21)$$

Это классическое выражение для объёмной проводимости металла. Рассмотрим случай статической объёмной проводимости σ_0 , когда $\omega = 0$.

$$\sigma_0 = \frac{ne_0^2}{\nu m} = \frac{ne_0^2 \tau}{m}. \quad (22)$$

Здесь $\tau = 1/\nu$ – время релаксации.

Рассмотрим среднее значение тока по сечению плёнки $\bar{j}_y$:

$$\bar{j}_y = \frac{\int_0^a j_y}{a}. \quad (23)$$

Ток, проходящий через слой плёнки шириной L (и толщиной a), равен:

$$I = La\bar{j}_y.$$

Величину $\bar{j}_y$ можно разбить на три составляющих:

$$\bar{j}_y = \bar{j}_y + \bar{j}^+ + \bar{j}^-. \quad (24)$$

Усреднённую проводимость плёнки определим следующим образом:

$$\bar{\sigma} = \frac{I}{La} = \frac{\bar{j}_y}{E_y}. \quad (25)$$

Усреднённую проводимость плёнки $\bar{\sigma}$ можно тоже разбить на три составляющих:

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_v + \bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma}^-. \quad (26)$$

Ясно, что $\bar{\sigma}_v = \sigma_v$.

Представим $\bar{\sigma}$ в виде $\bar{\sigma} = \sigma_0 \Sigma$. При этом с учётом (26) имеем:

$$\Sigma = \Sigma_v + \Sigma^+ + \Sigma^-. \quad (27)$$

Величина Σ_v равна:

$$\Sigma_v = \frac{1}{1 - i\omega / v}. \quad (28)$$

Рассмотрим величины Σ^+ и Σ^- . Они имеют вид:

$$\Sigma^+ = -\frac{3v}{4z_0 v_F} \int_0^a dx \int_0^1 \frac{(1-t^2)(1-q(t))}{\left(1-q(t)\exp\left(-\frac{z_0}{t}\right)\right)} \exp\left(-\frac{z_0 x}{at}\right) dt,$$

$$\Sigma^- = -\frac{3v}{4z_0 v_F} \int_0^a dx \int_{-1}^0 \frac{(1-t^2)(1-q(t))\exp\left(-\frac{z_0(x-a)}{at}\right)}{\left(1-q(t)\exp\left(\frac{z_0}{t}\right)\right)} dt.$$

Произведём интегрирование по переменной x . В результате получаем:

$$\Sigma^+ = -\frac{3va}{4z_0 v_F} \int_0^1 \frac{t(1-t^2)(1-q(t))\left(1-\exp\left(-\frac{z_0}{t}\right)\right)}{1-q(t)\exp\left(-\frac{z_0}{t}\right)} dt,$$

$$\Sigma^- = \frac{3va}{4z_0 v_F} \int_{-1}^0 \frac{t(1-t^2)(1-q(t))\left(1-\exp\left(\frac{z_0}{t}\right)\right)}{1-q(t)\exp\left(\frac{z_0}{t}\right)} dt. \quad (29)$$

Проведём в интеграле Σ^- замену $t' = -t$. В результате получим:

$$\Sigma^- = \Sigma^+.$$

Выражение для Σ приобретает следующий вид:

$$\Sigma = \Sigma_v + 2\Sigma^+.$$

Кроме того, $\frac{av}{v_F} = x_0$. Поэтому выражение для Σ можно переписать в виде:

$$\Sigma = \frac{x_0}{z_0} - \frac{3x_0}{2z_0^2} \int_0^1 \frac{t(1-t^2)(1-q(t))\left(1-\exp\left(-\frac{z_0}{t}\right)\right)}{1-q(t)\exp\left(-\frac{z_0}{t}\right)} dt. \quad (30)$$

Заключение

В настоящей работе рассмотрено влияние зависимости величины коэффициента зеркальности при отражении электронов от поверхности металла от угла

падения электронов на поверхность на проводимость тонких металлических плёнок. Рассмотрено модельное граничное условие, учитывающее зависимость коэффициента зеркальности от угла падения электронов на поверхность металла. Показано, что в предельных случаях это граничное условие переходит в граничное условие Фукса и в граничное условие Соффера. Кроме того, рассмотренное граничное условие, в отличие от граничных условий Фукса и Соффера, удовлетворяет критерию Андреева при почти касательном падении электронов на поверхность металла.

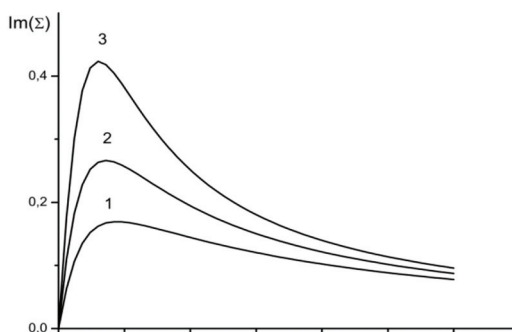


Рис. 3. График зависимости мнимой части безразмерной проводимости от безразмерной объёмной частоты рассеяния электронов при ненулевой частоте электрического поля / Fig. 3. Dependence of the imaginary part of the dimensionless conductivity on the dimensionless volume frequency of electron scattering at a nonzero electric field frequency.

Источник: подготовлено авторами с помощью математического приложения Mathcad.

На графике зависимости мнимой части безразмерной проводимости от безразмерной объёмной частоты рассеяния электронов при ненулевой частоте электрического поля (рис. 3) для всех кривых $q_0 = 0,1$ и безразмерная частота поля $y_0 = 0,3$. Кривая 1 соответствует параметрам $b_1 = b_2 = 0,1$. Кривая 2 соответствует параметрам $b_1 = b_2 = 0,5$. Кривая 3 соответствует параметрам $b_1 = b_2 = 3$.

Полученные результаты могут найти применение при рассмотрении взаимодействия электромагнитного излучения с тонкой металлической плёнкой [5; 13].

Статья поступила в редакцию 09.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Абрикосов А. А. Основы теории металла. М.: Наука, 1977. 520 с.
2. Андреев А. Ф. Взаимодействие проводящих электронов с поверхностью металла // Успехи физических наук. 1971. Т. 105. № 1. С. 114–124. DOI: 10.3367/UFNr.0105.197109d.0113.
3. Кузнецова И. А., Романов Д. Н., Юшканов А. А. Расчёт высокочастотной электропроводности тонкого металлического слоя в случае эллипсоидальной поверхности Ферми // Микроэлектроника. 2018. Т. 47. № 3. С. 226–237. DOI: 10.7868/S0544126918030079.

4. Кузнецова И. А., Савенко О. В. Юшканов А. А. Влияние граничных условий на электропроводность тонкой цилиндрической проволоки // Микроэлектроника. 2016. Т. 45. № 2. С. 126–134. DOI: 10.7868/S0544126916020071.
5. Латышев А.В., Юшканов А.А. Взаимодействие электромагнитной Н-волны с тонкой металлической пленкой // Микроэлектроника. 2012. Т. 41. № 1. С. 30–35.
6. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М.: Физматлит. 2001. 536 с.
7. Уткин А. И., Завитаев Э. В., Юшканов А. А. Расчёт электрической проводимости тонкого металлического слоя в случае различных коэффициентов зеркальности его поверхностей // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2016. № 9. С. 85–91. DOI: 10.7868/S0207352816090158.
8. Уткин А. И., Юшканов А. А. Влияние коэффициентов зеркальности на проводимость тонкого металлического слоя в случае неоднородного, периодического по времени электрического поля // Микроэлектроника. 2016. Т. 45. № 5. С. 386–395. DOI: 10.7868/S0544126916050100.
9. Fuchs K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1938. Vol. 34. Iss. 1. P. 100–108. DOI: 10.1017/S0305004100019952.
10. Sondheimer E. H. The mean free path of electrons in metals // Advances in Physics. 2001. Vol. 50. Iss. 6. P. 499–537. DOI: 10.1080/00018730110102187.
11. Soffer S. B. Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction // Journal of Applied Physics. 1967. Vol. 38. Iss. 4. P. 1710–1715. DOI: 10.1063/1.1709746.
12. Gall D. Electron mean free path in elemental metals // Journal of Applied Physics. 2016. Vol. 119. P. 085101. DOI: 10.1063/1.4942216.
13. Jones W. E., Kliewer K. L., Fuchs R. Nonlocal theory of the optical properties of thin metallic films // Physical Review. 1969. Vol. 178. Iss. 3. P. 1201–1203. DOI: 10.1103/PHYSREV.178.1201.
14. Electron scattering at surfaces and grain boundaries in Cu thin films and wires / Chawla J. S., Gstrein F., O'Brien K. P., Clarke J. S., Gall D. // Physical Review B. 2011. Vol. 84. Iss. 23. P. 235423-1-235423-10. DOI: 10.1103/PHYSREVB.84.235423.

REFERENCES

1. Abrikosov A. A. *Osnovy teorii metalla* [Fundamentals of the theory of metals]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 520 p.
2. Andreev A. F. [Interaction of conducting electrons with a metal surface]. In: *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Soviet Physics Uspekhi], 1971, vol. 105, no. 1, pp. 114–124. DOI: 10.3367/UFNr.0105.197109d.0113.
3. Kuznetsova I. A., Romanov D. N., Yushkanov A. A. [Calculating the high-frequency electrical conductivity of a thin metallic layer for an ellipsoidal Fermi surface]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2018, vol. 47, no. 3, pp. 226–237. DOI: 10.7868/S0544126918030079.
4. Kuznetsova I. A., Savenko O. V., Yushkanov A. A. [The influence of boundary conditions on the electrical conductivity of a thin cylindrical wire]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2016, vol. 45, no. 2, pp. 126–134. DOI: 10.7868/S0544126916020071.
5. Latyshev A. V., Yushkanov A. A. [Interaction of an electromagnetic H-wave with a thin metal film]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2012, vol. 41, no. 1, pp. 30–35.
6. Lifshits E. M., Pitaevskii L. P. *Fizicheskaya kinetika* [Physical kinetics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2001. 536 p.

7. Utkin A. I., Zavitaev E. V., Yushkanov A. A. [Calculation of Electrical Conductivity of Thin Metal Layer with Different Surface Specularity Coefficients]. In: *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neitronnye issledovaniya* [Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques], 2016, no. 9, pp. 85–91. DOI: 10.7868/S0207352816090158.
8. Utkin A. I., Yushkanov A. A. [Effect of the reflection coefficients on the conductivity of a thin metal layer in the case of an inhomogeneous time-periodic electric field]. In: *Mikroelektronika* [Russian Microelectronics], 2016, vol. 45, no. 5, pp. 386–395. DOI: 10.7868/S0544126916050100.
9. Fuchs K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals. In: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1938, vol. 34, iss. 1, pp. 100–108. DOI: 10.1017/S0305004100019952.
10. Sondheimer E. H. The mean free path of electrons in metals. In: *Advances in Physics*, 2001, vol. 50, iss. 6, pp. 499–537. DOI: 10.1080/00018730110102187.
11. Soffer S. B. Statistical model for the size effect in electrical conduction. In: *Journal of Applied Physics*, 1967, vol. 38, iss. 4, pp. 1710–1715. DOI: 10.1063/1.1709746.
12. Gall D. Electron mean free path in elemental metals. In: *Journal of Applied Physics*, 2016, vol. 119, pp. 085101. DOI: 10.1063/1.4942216.
13. Jones W. E., Kliewer K. L., Fuchs R. Nonlocal theory of the optical properties of thin metallic films. In: *Physical Review*, 1969, vol. 178, iss. 3, pp. 1201–1203. DOI: 10.1103/PHYSREV.178.1201.
14. Chawla J. S., Gstrein F., O'Brien K. P., Clarke J. S., Gall D. Electron scattering at surfaces and grain boundaries in Cu thin films and wires. In: *Physical Review B*, 2011, vol. 84, iss. 23, pp. 235423-1-235423-10. DOI: 10.1103/PHYSREVB.84.235423.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Каримов Фахриддин Ахмаджонович – аспирант кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;
e-mail: faha_rtsu_2003@mail.ru;

Юшканов Александр Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;
e-mail: yushkanov@inbox.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Fakhriddin A. Karimov – postgraduate student, Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;
e-mail: faha_rtsu_2003@mail.ru;

Alexander A. Yushkanov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University
e-mail: yushkanov@inbox.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Каримов Ф. А., Юшканов А. А. Проводимость тонкого слоя металла с учётом зависимости коэффициента зеркальности от угла падения электронов на поверхность // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 4. С. 49–65.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-49-65

FOR CITATION

Karimov F. A., Yushkanov A. A. Conductivity of a thin metal layer taking into account the dependence of the mirror coefficient on the angle of the electron's incidence on the surface. In: Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics, 2020, no. 4, pp. 49–65.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-49-65

УДК 524.8

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-66-72

ПЕРВИЧНЫЕ ЧЁРНЫЕ ДЫРЫ, ДИФФУЗНОЕ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЕ ВСЕЛЕННОЙ И ВОЗМОЖНАЯ ПРИРОДА ТЁМНОЙ МАТЕРИИ

Чаругин В. М.*Московский педагогический государственный университет**119991, г. Москва, ул. Малая Пироговская, д. 1, стр. 1, Российская Федерация**Московский государственный областной университет**141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация*

Аннотация

Теория эволюции ранней Вселенной предсказывает образование чёрных дыр различной массы. В зависимости от физических процессов могут образоваться чёрные дыры с массами вплоть до 10^{27} г. Из-за эффекта Хокинга квантового испарения чёрных дыр до нашего времени дожили чёрные дыры с массами свыше 10^{15} г.

Целью данной работы является расчёт интенсивности гамма-излучения от этих первичных чёрных дыр, объяснение спектра диффузного гамма-излучения Вселенной от них в диапазоне 10–100 МэВ и оценка их вклада в тёмную материю Вселенной.

Процедура и методы. Для расчётов интенсивности излучения ансамбля чёрных дыр используется приближение в виде δ -функции для излучения абсолютно чёрного тела.

Результаты. Показано, что если функция масс первичных чёрных дыр $N(M) = K \cdot M^{-\gamma}$, то интенсивность излучения Хокинга $I(\nu) \sim \nu^{\gamma}$. Так как гамма-фон Вселенной в диапазоне энергий квантов 10–100 МэВ имеет вид $I(\nu) \sim \nu^{-1.3}$ МэВ/см² с · МэВ · ср, то $N(M) = K \cdot M^{1.3}$. В этом диапазоне излучают первичные чёрные дыры с массами 10^{15} г и размерами с электрон.

Теоретическая и практическая значимость. Показано, что экстраполяция полученного распределения масс до значений $5 \cdot 10^{21}$ г позволяет объяснить наблюдаемую массу тёмной материи во Вселенной. При этом концентрация этих чёрных дыр с массами, сравнимыми с массами астероидов, такова, что их число в Солнечной системе может измеряться сотнями.

Ключевые слова: космология, первичные чёрные дыры, излучение Хокинга, тёмная материя

PRIMORDIAL BLACK HOLES, DIFFUSE GAMMA RADIATION OF THE UNIVERSE AND POSSIBLE NATURE OF DARK MATTER

V. Charugin*Moscow Pedagogical State University**ul. Malaya Pirogovskaya 1, 119991 Moscow, Russian Federation**Moscow Region State University**ul. Very Voloshinoy 24, 141014 Mytishchi, Moscow region, Russian Federation*

Abstract

The theory of evolution of the early universe predicts the formation of black holes of different mass. Depending on the physical processes, black holes can be formed with masses up to 10^{27} g. Because of the Hawking effect of quantum evaporation of black holes, black holes with masses over 10^{15} g have survived to our time.

The aim of this work is to calculate the intensity of gamma radiation from the primordial black holes, to explain the diffuse gamma spectrum of the Universe's radiation from them in the range of 10–100 MeV, and to estimate their contribution to dark matter of the Universe.

Methodology. The intensity of radiation from an ensemble of black holes is calculated by using an approximation in the form of the δ -function for the radiation of the absolutely black body.

Results. It is shown that if the function of the masses of primordial black holes is $N(M) = K \cdot M^{-\gamma}$, the intensity of Hawking's radiation is $I(\nu) \sim \nu^{\gamma}$. Since the background radiation of the Universe in the range of quantum energies 10–100 MeV has the form of $I(\nu) \sim \nu^{-1.3}$ MeV/cm² MeV · ster, then $N(M) = K \cdot M^{1.3}$. In this range there emit primary black holes with masses of 10^{15} g and sizes of an electron.

Research implications. It is shown that the extrapolation of the resulting distribution of masses to the values of $5 \cdot 10^{21}$ g allows one to explain the observed mass of dark matter in the Universe. At the same time, the concentration of these black holes with masses comparable to the masses of asteroids is such that there may be hundreds of them in the solar system.

Keywords: cosmology, primordial black holes, Hawking radiation, dark matter.

Введение

Согласно общей теории относительности радиус чёрной дыры – радиус Шварцшильда разделяет пространство на две области: внутри чёрной дыры и снаружи. Нашим наблюдениям доступно пространство вне сферы Шварцшильда; всё, что находится внутри, не может выйти оттуда и недоступно нам. Фактически, сфера Шварцшильда представляет классический потенциальный барьер, который не могут преодолеть частицы, находящиеся внутри чёрной дыры. Ситуация очень похожа на поведение частиц внутри атомного ядра, находящихся в потенциальной яме. Волновые свойства частиц позволяют им проникать через непроницаемый потенциальный барьер благодаря туннельному эффекту, чем и объясняется радиоактивный распад некоторых атомных ядер. При этом наиболее вероятен вылет из ядра частиц с энергией, соответствующей длине волны де Бройля, равной ширине потенциального барьера. В этом смысле механизм Хокинга – квантовое испарение чёрной дыры – можно рассматривать как квантовый туннельный эффект. Наиболее эффективно просачиваются частицы с длиной волны де Бройля, сравнимой с радиусом чёрной дыры.

Расчёты показывают, что на ранних этапах эволюции Вселенной, начиная с планковских времён и до одной секунды, могли образовываться чёрные дыры с массами от планковских масс до $10^5 M_{\odot}$ (см. обзор Б. Карра (B. J. Carr) [1]). Причём, чёрные дыры с массами меньше 10^{15} г образовались, когда возраст Вселенной не превышал 10^{-25} с, и к настоящему времени должны испариться из-за эффекта Хокинга. То есть до нашего времени дожили массивные первичные чёрные дыры с массами свыше 10^{15} г, излучение которых приходится на диапазон

энергий гамма-квантов менее 10 МэВ. Так, чёрные дыры с массами $2,5 \cdot 10^{27}$ г (сравнимые с массой Земли) образовались, когда возраст Вселенной был всего $2 \cdot 10^{-15}$ с. Некоторые модели образования первичных чёрных дыр предполагают степенное распределение по массам первичных чёрных дыр, например $N(M) \sim M^{-2,5}$ [1]. Поэтому представляет большой интерес расчёт рентгеновского и гамма-излучения от чёрных дыр, распределённых по массам по степенному закону, и сравнение его с наблюдаемым гамма-фоном Вселенной.

Методика расчёта

Итак, согласно Хокингу, благодаря квантовым эффектам гравитации чёрная дыра будет излучать как абсолютно чёрное тело с максимумом излучения, приходящимся на длину волны, сравнимую с радиусом чёрной дыры:

$$\lambda_{\max} = r_g = \frac{2GM}{c^2} = 1,5 \cdot 10^{-28} \text{ М} \cdot \text{см}. \quad (1)$$

Температура излучения с её поверхности:

$$T = \frac{0,29}{\lambda_{\max}} = \frac{b}{\lambda_{\max}} = \frac{0,29c^2}{2GM} = \frac{1,96 \cdot 10^{27}}{\text{М}} \text{ К}.$$

Максимум излучения приходится на частоту:

$$\nu_{\max} = \frac{c}{\lambda_{\max}} = \frac{c^3}{2GM} = \frac{a}{M} = \frac{2 \cdot 10^{38}}{\text{М}} \text{ Гц}. \quad (2)$$

Полная мощность излучения (светимость) чёрной дыры равна:

$$L = \sigma T^4 \cdot 4\pi r_g^2 = \pi \frac{\sigma b^4 c^4}{G^2 M^2} = \pi (0,29)^4 \frac{\sigma c^4}{G^4} \frac{1}{M^2} = 2,3 \cdot 10^{50} \frac{1}{M^2} \frac{\text{Эрг}}{\text{с}}. \quad (3)$$

Масса чёрной дыры уменьшается со временем по закону:

$$M = \sqrt[3]{M_0^3 - 3\pi \frac{\sigma b^4 c^4}{G^2} t} = \sqrt[3]{M_0^3 - 7,2 \cdot 10^{30} t}.$$

Из этой формулы следует, что время испарения чёрной дыры ($M = 0$) равно:

$$t_{\text{исп}} = \frac{G^2}{3\pi \sigma b^4 c^2} M_0^3 = 1,4 \cdot 10^{-31} \text{ М}^3 \cdot \text{с}. \quad (4)$$

При возрасте Вселенной $t_{\text{Вс}} = 1/H = 13 \cdot 10^9$ лет, все первичные чёрные дыры с массами меньше $1,4 \cdot 10^{16}$ г должны испариться, причём от последних в настоящее время должно наблюдаться гамма-излучение на частотах $1,4 \cdot 10^{22}$ Гц (соответствует энергии гамма-квантов около 40 МэВ.). Если имеется какое-то распределение первичных чёрных по массам, то в окрестностях этой частоты должно наблюдаться излучение от этих чёрных дыр.

Примем для расчётов коэффициента излучения одной чёрной дыры выражение:

$$p(\nu) = \frac{1}{4\pi} L \cdot \delta(\nu - \nu_{\max}) \frac{\text{эрг}}{\text{с} \cdot \text{Гц} \cdot \text{ср}}.$$

Если концентрация чёрных дыр с массой M имеет степенной вид $N(M) = \text{КМ}^{-\gamma} / \text{г} \cdot \text{см}^3$, то коэффициент излучения единицы объёма от этих чёрных дыр имеет вид:

$$\begin{aligned} J(\nu) &= \int p(\nu) N(M) dM = \frac{1}{4} \pi \frac{\sigma b^4 c^4}{G^2} \int \frac{N(M)}{M^2} \delta\left(\nu - \frac{a}{M}\right) dM = \\ &= \frac{1}{4} \pi \frac{\sigma b^4 c^4}{G^2} K a^{-\gamma-1} \nu^\gamma \frac{\text{эрг}}{\text{с} \cdot \text{см}^3 \cdot \text{Гц} \cdot \text{ср}} = \\ &= 1,6 \cdot 1053 K (2 \cdot 1038)^{-\gamma-1} \nu^\gamma. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь, для расчётов, мы экстраполировали функцию Планка δ -функцией с максимумом на частоте (2).

Обсуждение результатов и выводы

Из полученных выражений видно, что спектральный индекс излучения Хокинга от степенного распределения чёрных дыр по массам равен показателю степенного спектра распределения чёрных дыр по массам с обратным знаком.

О природе гамма-фона Вселенной

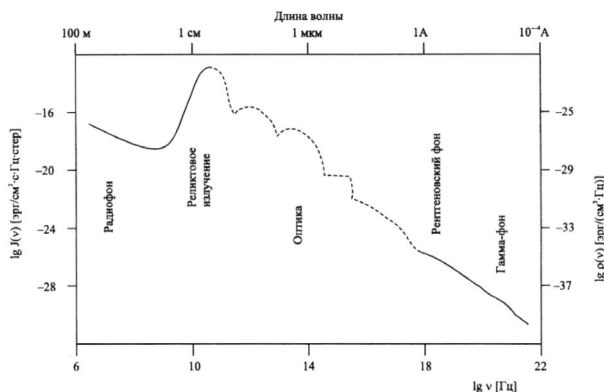


Рис. 1. Спектр фонового излучения Вселенной в различных диапазонах частот /

Fig. 1. Background radiation spectrum of the Universe in different frequency ranges.

Источник: [2; 3].

В диапазоне энергий гамма-квантов 1–100 МэВ интенсивность гамма-квантов фонового излучения $I(E) = 0,011 \cdot E^{-2,3}$ фот/см²с · МэВ · ср, что соответствует спектральной интенсивности гамма-фона в диапазоне частот 10²⁰ – 10²² Гц (см. рис. 1 и более подробный рис. 2):

$$I(\nu) = 6,5 \cdot 10^{-3} \cdot \nu^{-1,3} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \text{с} \cdot \text{Гц} \cdot \text{ср}}. \quad (6)$$

Если предположить, что гамма-излучение в этом диапазоне образуется за счёт излучения первичных чёрных, тогда имеем $N(M) = KM^{1,3}$ в диапазоне масс $1,6 \cdot 10^{16} - 1,6 \cdot 10^{14}$ г.

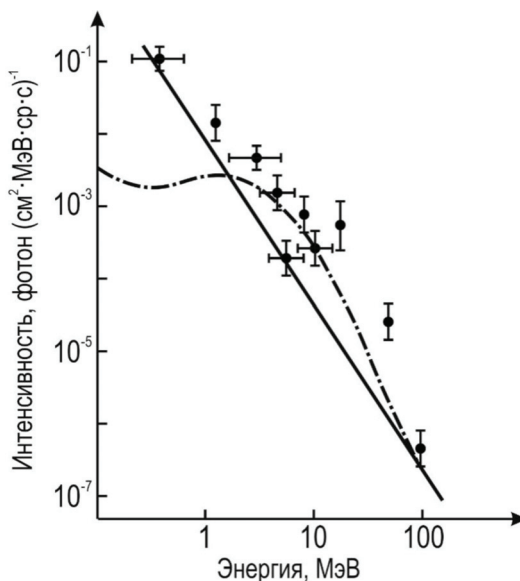


Рис. 2. Спектральное распределение интенсивности диффузного гамма-фона Вселенной в диапазоне 1–100 МэВ / Fig. 2. Spectral distribution of the intensity of the diffuse gamma background of the Universe in the range of 1–100 MeV.

Источник: [2; 3].

Чтобы рассчитать количество первичных чёрных дыр воспользуемся соотношением (5). Так как возраст Вселенной $t_{\text{вс}}$ в настоящее время оценивается в $\approx 13,5$ млрд. лет или в $4,2 \cdot 10^{17}$ с, а расстояние до горизонта событий Вселенной $l_{\text{вс}} \sim ct_{\text{вс}} \approx 1,3 \cdot 10^{28}$ см, то, полагая, что первичные чёрные дыры заполняют Вселенную однородно и изотропно, легко рассчитать интенсивность излучения от всех чёрных дыр по лучу зрения $I(\nu) = j(\nu) \cdot l_{\text{вс}}$. Для нас представляет интерес гамма-фон в диапазоне энергий квантов от нескольких МэВ и выше. Полагая в (5) $\gamma = -1,3$, получаем для теоретического значения интенсивности гамма-фона от первичных чёрных дыр $I(\nu) = K \cdot 5 \cdot 10^{91} \cdot \nu^{-1,3} \text{эрг/см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{Гц} \cdot \text{ср}$. Сравнивая это значение с наблюдаемой интенсивностью (7), определяем $K = 1,3 \cdot 10^{-94}$. Таким образом, распределение первичных чёрных дыр по массам имеет вид:

$$N(M) = 1,3 \cdot 10^{-94} M^{1,3} \text{ 1/г} \cdot \text{см}^3, 1,6 \cdot 10^{14} < M < 1,6 \cdot 10^{16} \text{ г.}$$

Концентрация чёрных дыр и суммарная плотность их массы в рассматриваемом интервале масс, соответственно, равны: $N = 1,410^{-53} \text{ 1/см}^3$ и $\rho = 10^{-35} \text{ г/см}^3$. При такой концентрации среднее расстояние между первичными чёрными ды-

рами составляет около $3 \cdot 10^4$ астрономических единиц. Так что обнаружить их очень трудно.

Если предположить, что полученное из наблюдений гамма-фона распределение первичных чёрных дыр тянется до больших масс, например до масс $5 \cdot 10^{21}$ г, то средняя плотность их массы составит около $0,25 \cdot 10^{-29}$ г/см³, что сравнимо с оценкой плотности массы тёмной материи во Вселенной [4; 5]. При этом основное количество и масса чёрных дыр сосредоточена в больших массах. Интересно, что в этом случае концентрация чёрных дыр составит около $2,2 \cdot 10^{-41}$ 1/см³. То есть среднее расстояние между первичными чёрными дырами с массами около $5 \cdot 10^{21}$ г составляет всего одну астрономическую единицу и в объёме сферы с радиусом орбиты Юпитера их будет около полусотни. Эти чёрные дыры как пылинки с размерами около 10^{-6} см, имеют массы, сравнимые с массами небольших астероидов (например, астероид Немауза имеет массу $9 \cdot 10^{20}$ г и размер 40 км). Они излучают в инфракрасном и оптическом диапазонах мощность около 1 Вт.

Если рассмотреть модель Карра [1] образования чёрных дыр в ранней Вселенной из флуктуаций в среде с радиационным уравнением состояния [4; 5], то их спектр имеет степенной вид $N(M) = K \cdot M^{-2,5}$, и их основное количество и масса приходится на самые малые массы. Если это так, то интенсивность гамма-излучения от них должна иметь вид $I(\nu) \sim \nu^{2,5}$, что противоречит наблюдениям.

Статья поступила в редакцию 14.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Carr B. J. Primordial Black Holes – Recent Developments // Relativistic astrophysics: Proceedings, 22nd Texas Symposium (Stanford, USA, December 13–17, 2004) / ed. by P. Chen, E. D. Bloom, G. Madejski, V. Petrosian. Stanford: Stanford University, 2004. 1 CD.
2. Pohl M. Gamma ray astronomy // Proceedings of International Cosmic Ray Conference. Vol. 1. / ed. R. Schlickeiser. Hamburg: Copernicus Gesellschaft, 2001. P. 147–161.
3. Spectrum of the Isotropic Diffuse Gamma-Ray Emission Derived from First-Year Fermi Large Area Telescope Data / Abdo A. A. et al. (Fermi LAT Collaboration) // Physical Review Letters. 2010. Vol. 104. Iss. 10. P. 101101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.101101.
4. Горбунов Д. С., Рубаков В. А. Введение в теорию ранней Вселенной: Теория горячего большого взрыва. М.: ЛЕНАНД, 2016. 616 с.
5. Bambi C., Dolgov A. D. Introduction to Particle Cosmology: The Standard Model of Cosmology and its Open Problems. Berlin: Springer-Verlag Heidelberg, 2016. 251 p. (Series: UNITEXT for Physics).

REFERENCES

1. Carr B. J. Primordial Black Holes – Recent Developments. In: Chen P., Bloom E. D., Madejski G., Petrosian V., eds. *Relativistic astrophysics: Proceedings, 22nd Texas Symposium (Stanford, USA, December 13–17, 2004)*. Stanford, Stanford University Publ., 2004. 1 CD.
2. Pohl M. Gamma ray astronomy. In: Schlickeiser R., ed. *Proceedings of International Cosmic Ray Conference. Vol. 1*. Hamburg, Copernicus Gesellschaft Publ., 2001, pp. 147–161.
3. Abdo A. A. et al. (Fermi LAT Collaboration). Spectrum of the Isotropic Diffuse Gamma-Ray Emission Derived from First-Year Fermi Large Area Telescope Data. In: *Physical Review Letters*, 2010, vol. 104, iss. 10, pp. 101101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.101101.

4. Gorbunov D. S., Rubakov V. A. *Vvedenie v teoriyu rannei Vselennoi: Teoriya goryachego bol'shogo vzryva* [An Introduction to Theory of the Early Universe: The Hot Big Bang Theory]. Moscow, LENAND Publ., 2016. 616 p.
5. Bambi C., Dolgov A. D. *Introduction to Particle Cosmology: The Standard Model of Cosmology and its Open Problems*. Berlin, Springer-Verlag Heidelberg Publ., 2016. 251 p. (Series: UNITEXT for Physics).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Чаругин Виктор Максимович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного педагогического университета; профессор кафедры общей физики Московского государственного областного университета;
e-mail: charugin2010@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Victor M. Charugin – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Theoretical Physics, Moscow State Pedagogic University; Prof., Department of General Physics, Moscow Region State University;
e-mail: charugin2010@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Чаругин В. М. Первичные чёрные дыры, диффузное гамма-излучение Вселенной и возможная природа тёмной материи // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 4. С. 66–72.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-66-72

FOR CITATION

Charugin V. M. Primordial black holes, diffuse gamma radiation of the Universe and possible nature of dark matter. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 66–72.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-66-72

УДК: 538.911

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-73-85

НОВЫЕ ПРИНЦИПЫ ОРГАНИЗАЦИИ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТНЫХ ПЕРЕНАСТРАИВАЕМЫХ (ПЕРЕЗАПИСЫВАЕМЫХ) СВЕТООРИЕНТИРУЕМЫХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ФАЗОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

**Соломатин А. С.¹, Царева Е. В.¹, Богданов Д. Л.², Барабанова Н. Н.²,
Усачев В. В.³, Данкин Д. Г.⁴, Бугримов А. Л.⁵**

¹ Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9, Российская Федерация

² Московский государственный областной университет
141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская
Федерация

³ Российский университет дружбы народов
117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Российская Федерация

⁴ Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
119049, г. Москва, Ленинский проспект, д. 4, Российская Федерация

⁵ Российский государственный университет им. А. Н. Косыгина (Технологии.
Дизайн. Искусство)
117997, г. Москва, ул. Садовническая, д. 33, Российская Федерация

Аннотация

Цель. Развитие новых принципов управляемых оптических элементов – дифракционных, фокусирующих и дифракционно-фокусирующих – в широком диапазоне их применения, и в том числе как для оптического, так и для инфракрасного излучения.

Процедура и методы. Показана перспективность для решения поставленной задачи ЖК композитов 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) в боросилоксановых (БС) матрицах. Методика фиксации пространственного распределения ЖК-композитов заключается в их предварительной пространственной ориентации по некоторому заранее заданному плану (при температуре выше 55 °С – температуры плавления) и последующем охлаждении. Цикл нагрев-охлаждение технически легко реализуем. ЖК-композит ориентируется различными способами, и в данной работе предложено использовать с этой целью светоориентирование.

Результаты. Предложена светууправляемая ЖК линза с регулируемыми параметрами. Рассмотрена как принципиальная возможность многократной перезаписи centrosymmetric фазовых пластин с анизотропной ориентацией молекул в тонкой пленке, так и обеспечивающая плавное изменение оптической оси техника записи элементов, с цилиндрически-симметричным и планарно-симметричным распределением.

Теоретическая и практическая значимость. При смене режимов неуправляемые элементы приходится заменять, что бывает неудобно. Управляемые оптические элементы обычно

дороги и энергозависимы – требуют постоянного контроля их состояния и регулирования полем. Следовательно, актуальны оптические элементы различной (по назначению и свойствам) классификации, перезаписываемые (перерегулируемые) в дискретные моменты времени и энергонезависимые в остальной (возможно, весьма продолжительный) период эксплуатации.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, 4-циано-4-октилоксидифенил (8ОСВ), оптическая анизотропия, светоориентируемые, боросилоксановые гели, жидкокристаллические композиты, фазовая пластина.

NEW PRINCIPLES FOR THE ORGANIZATION OF LIQUID CRYSTAL COMPOSITE RETURNABLE (REWRITABLE) LIGHT-ORIENTED GEOMETRIC PHASE ELEMENTS

A. Solomatin¹, Ye. Tsareva¹, D. Bogdanov², N. Barabanova², V. Usachev³, D. Dankin⁴, A. Bugrimov⁵

¹ Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia
9 Miusskaya ploshad', Moscow 125047, Russian Federation

² Moscow Region State University
24 ulitsa Very Voloshinoi, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

³ People's Friendship University of Russia
6 Miklukho-Maklaya, Moscow 117198, Russian Federation

⁴ National University of Science and Technology «MISIS»
4 Leninsky Prospekt, Moscow 119049, Russian Federation

⁵ The Kosygin State University of Russia
33 ulitsa Sadovnicheskaya, Moscow 117997, Russian Federation

Abstract

Aim: Development of new principles of controllable optical elements – diffractive, focusing and diffractive-focusing – in a wide range of their application, including both for optical and infrared radiation.

Methodology. It was shown that LC composites of 4-cyano-4-octyloxydiphenyl (8OCB) in borosiloxane (BS) matrices are promising for solving the problem. After distributing the LC (at temperatures above 55 °C – the melting temperature) spatially according to some predetermined rule, then cool and thereby fix the spatial distribution. The heating-cooling cycle is technically easy to implement. The LC composite is oriented in various ways, and in this work, it is proposed to use light orientation for this purpose.

Results. A light-controlled LCD lens with adjustable parameters is proposed. Both the fundamental possibility of multiple rewriting of centrosymmetric phase plates with anisotropic orientation of molecules in a thin film, and the technique of recording elements with a cylindrically symmetric and planar symmetric distribution, which provides a smooth change in the optical axis, are considered.

Research implications. When changing modes, uncontrolled elements have to be replaced, which is inconvenient. Controlled optical elements are usually expensive and volatile – they require constant monitoring of their state and field regulation. Consequently, optical elements of various (according to purpose and properties) classification are relevant, rewritable (re-adjustable) at discrete moments of time and non-volatile in the rest (possibly very long) period of operation.

Keywords: liquid crystals, 4-cyano-4-octyloxydiphenyl (8OSB), borosiloxanegels, liquid crystalcomposites

Введение

Роль жидких кристаллов и ЖК-композитов в оптических устройствах исключительно велика [1]. В настоящее время наблюдается отчётливая тенденция к всё более широкому распространению управляемых оптических элементов – фокусирующих, дифракционных и дифракционно-фокусирующих. Однако их принципиальные недостатки, именно вследствие широкого распространения, стали очевидны. Главной проблемой является довольно высокая стоимость устройств, требующих постоянного контроля их состояния и регулирования их свойств прилагаемым полем, энергозатраты, особенно невыгодные в устройствах с аккумуляторным питанием.

Всё более значимое место год за годом завоёвывают оптические элементы, не требующие постоянного контроля и регулирования полем – энергонезависимые. Однако их необходимо заменять при смене режимов использования, так как они нерегулируемые.

Актуально конструктивное решение, обеспечивающее сочетание преимуществ тех и других без наследования их недостатков. В данной работе, являющейся продолжением [2–10], предложено новое решение этой задачи, заключающееся в том, что оптические элементы регулируются, но не непрерывно, а в отдельные (дискретные) моменты времени, а в периоды времени между перезаписью свойства энергонезависимых оптических элементов не изменяются (стабильны). Также предусмотрено размещение перерегулируемых (перезаписываемых) в дискретные моменты времени оптических элементов мозаично (как шахматная доска – клетки разных типов чередуются) с возможностью при одновременной перезаписи группы элементов переместить их границы, то есть перейти к новой геометрии размещения комплекса оптических элементов с совершенно новыми (перерегулированными в широком диапазоне) характеристиками, что особенно важно для матричных дифракционных или фокусирующих оптических элементов.

Новые принципы управляемых оптических элементов – дифракционных, фокусирующих и дифракционно-фокусирующих – актуальны в широком диапазоне их применения, и в том числе как для оптического, так и для инфракрасного излучения. Показана в [4] перспективность для решения поставленной задачи ЖК композитов 4-циано-4-октилоксидифенил (8ОЦБ) в боросилоксановых (БС) матрицах. Распределив ЖК (при температуре выше 55°C – температуры плавления) пространственно по некоторому заранее заданному правилу, следу-

ет затем охладить и тем самым зафиксировать пространственное распределение. Цикл нагрев-охлаждение технически легко реализуем. ЖК-композит ориентируется различными способами, и в данной работе предложено использовать с этой целью светоориентирование.

Широко известно (например, [11]) ориентирование молекул ЖК в приложенном внешнем электрическом поле и, в том числе, в луче поляризованного света. При повороте плоскости поляризации частицы поворачиваются согласованно с ней. Это позволяет задавать азимутальный угол ориентации молекул ЖК в пределах области, подвергающейся достаточно сильному ориентирующему воздействию. Также известен такой приём, как введение хорошо ориентируемой длинной частицы с заданным спектральным диапазоном её прозрачности (например, управляется в инфракрасном луче), переориентирование которой приводит к изменению пространственного распределения молекул ЖК в окружающей области. Также возможно для перезаписи (перерегулирования) использовать комплексно управление прилагаемым полем и светоориентирование.

Светоориентируемая ячейка ЖК

В [6–8] рассмотрены матричные структуры на ЖК-композитной основе и показана возможность их использования с целью регулирования интенсивности и плоскости поляризации лучей проходящего через них света, образующих, в соответствии с геометрией расположения элементов регулирующей матрицы, упорядоченное распределение интенсивности и поляризации излучения, как ещё можно сказать, подвергнутое пространственно-временной модуляции света (ПВМС), то есть модулированное. Помещённые в прозрачную среду, через которую проходят вышеупомянутые лучи света, светоориентируемые частицы будут ориентированы, перейдут к положению равновесия с упругими силами. В зависимости от спектральных характеристик используемого сорта ЖК может быть удобно ориентировать инфракрасным светом специально добавленные длинные частицы с соответствующими светоориентационными характеристиками, а они будут задавать пространственное распределение директора ЖК. Таким образом, например, можно получать такое пространственное распределение директора ЖК, которое чрезвычайно сложно (или практически невозможно) было бы получить путём ориентирования полем. Это важное обстоятельство следует особо отметить для понимания преимуществ и, следовательно, актуальности предлагаемого подхода – светоориентирования.

Рассмотрим предлагаемый подход более подробно. На рис. 1 изображена ячейка ЖК.

Нижняя (на рис. 1) поверхность имеет ориентирующее покрытие – покрыта ориентантом, задающим приповерхностный угол (в плоскости рисунка, полярный угол) директора ЖК с подложкой, обозначенный θ_0 . Отметим, что азимутальный угол – директор ЖК в плоскости рисунка – также задаётся ориентирующим покрытием (с учётом его поверхностной геометрии). Слева на рис. 1 предполагается упомянутая выше матричная система подсветки. На рис. 1 отображаются горизонтальные (параллельные подложке) лучи света с плоскостью поляризации, совпадающей с пло-

скостью рисунка (поляризация перпендикулярна подложке). Переориентируясь в подсвеченном слое, директор ЖК будет изменять угол от приповерхностного θ_0 и до некоего угла θ_{const} , который будет транслироваться до противоположной стороны ячейки, если покрыть противоположную (верхнюю на рис. 1) сторону ячейки покрытием, не проявляющим ориентирующих свойств.

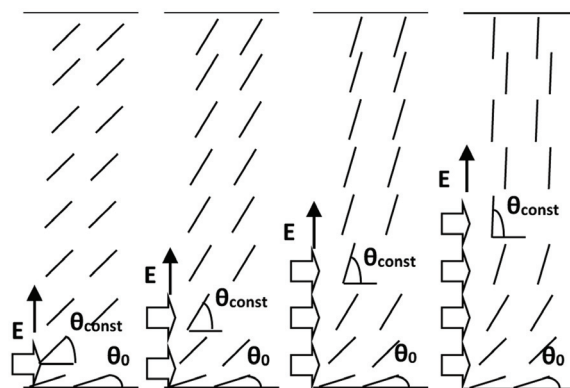


Рис. 1. Ячейка ЖК. Электрическое поле поляризованного луча света обуславливает изменение угла наклона директора ЖК. Чем толще слой ЖК, сквозь который проходит луч поляризованного света, тем больше различие между приповерхностным углом θ_0 и углом θ_{const} на другом крае освещенного слоя ЖК. Этот угол остается постоянным для всего неосвещенного слоя ЖК в ячейке / Fig. 1. LC cell. With an increase in the thickness of the LC layer subjected to orienting radiation (optical or infrared), the difference between the near-surface angle θ_0 and θ_{const} , which translates to the other side of the cell, increases.

Источник: составлено авторами.

В зависимости от толщины подсвеченного слоя (при той же равномерно распределённой плотности светового ориентирующего потока), как показано на рис. 1, угол θ_{const} возрастает вплоть до перпендикуляра к поверхности подложки. Толщина подсвеченного слоя регулируется количеством рядов матричной подсветки. Градиент угла директора ЖК задаётся интенсивностью (плотностью светового потока) подсветки.

Если задавать в смежных слоях ЖК различную интенсивность и поляризацию ориентирующей (например, инфракрасной) подсветки, получим сложное слоистое распределение ориентации директора ЖК, оптически эквивалентное стопке плоскопараллельных ячеек ЖК, ориентированных (каждая индивидуально) электрическим полем пар прозрачных электродов. Очевидно, что светоориентированная конструкция проще и дешевле, а также регулируется в более широких пределах.

55 °С – температура плавления для 4-циано-4-октилосидифенила (8ОЦБ). Для фиксирования (записи) полученного состояния в данной работе предлагается воспользоваться свойствами ЖК-композита 4-циано-4-октилосидифенил (8ОЦБ) на основе боросилоксанового (БС) геля [6–8; 10], которые могут быть переориентированы [12; 13] электрическим полем при нагревании композитов (требуется включения соответствующих элементов в конструкцию) выше 55 °С.

При последующем (достаточно интенсивном) охлаждении ЖК кристаллизуется, и сформировавшиеся микроструктуры долговременно фиксируются, с размерами от долей до десятков микрон. Таким образом, каждый ЖК домен (капля) в боросилоксановой матрице может быть переориентирован и затем зафиксирован на длительное время. Получается перезаписываемая в дискретные моменты времени и энергонезависимая оптическая матричная система – пространственно дисперсно распределённый жидкий кристалл (ПДЖК), или матричная дифракционная (дифракционно-фокусирующая) система, или матрица микролинз с перерегулируемыми характеристиками.

Переориентируемую систему (слой) можно располагать комбинированно (параллельно, послойно) с оптически анизотропным слоем с постоянными свойствами. Быстро переориентируемый тонкий слой позволяет корректировать оптические свойства системы в достаточно широких пределах и такая система перспективна для оптических затворов, а также ёмкостных, светофильтрующих, дифракционных, фокусирующих элементов.

Для светофильтров – как в скрещенных, так и в параллельных поляроидах – такие комбинированные структуры, светоориентируемые в дискретные моменты времени с целью регулировать их спектральные характеристики, перспективны, так как, например, позволяют получить три цветных снимка RGB цветов с одной монохромной матрицы фотоприёмных элементов.

Для фокусирующих – например, позволяют получить серию снимков с разным фокусным расстоянием, содержащих детализированную информацию как о близко расположенных, так и об удалённых объектах, что актуально, в частности, в методах «оптического пинцета» – светового манипулирования мелкодисперсными частицами и средами. Также возможно переключение в оптических системах, например, от линзы собирающей к линзе рассеивающей.

На рис. 2 показана ЖК линза [13] со светорегулируемым (например, инфракрасным светом) фокусным расстоянием. На рисунке снизу вверх направлен ориентирующий свет. Фотоэлемент (заштрихован посередине внизу) принимает собираемый линзой свет. Лучи света падают на рисунок сверху и фокусируются. Лучи ориентирующей подсветки исходят из центрально-симметричной матрицы – её элементы показаны на рис. 2 внизу по кругу, в одной горизонтальной плоскости с фотоэлементом. Ориентирующая подсветка имеет (каждый луч) поляризацию в радиальной (для линзы) плоскости.

На рис. 3 показано радиальное сечение этой же линзы ЖК. Нижняя поверхность покрыта ориентантом, задающим гомеотропную ориентацию в радиальной плоскости (например, рельеф поверхности ориентанта центрально-симметричен). Верхняя поверхность покрыта неориентирующим покрытием. Управляющие (ориентирующие) световые лучи показаны на рис. 3 стрелками, они направлены снизу вверх, плотность светового потока неравномерна, что проиллюстрировано количеством стрелок на рис. 3 – где они более многочисленны, там плотность потока больше. Необходимый для линзы ЖК градиент фазовой задержки обусловлен неравномерной ориентацией директора ЖК, а он, в свою очередь, задан неравномерной плотностью управляющей подсветки.

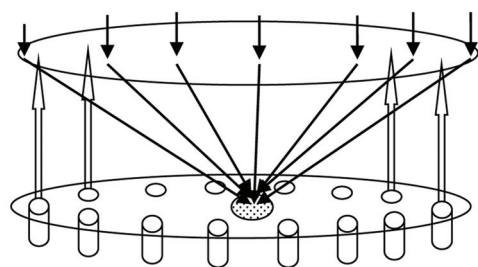


Рис. 2. ЖК линза со светорегулируемым фокусным расстоянием / Fig. 2. Light-Oriented LCD Lens.

Источник: составлено авторами.

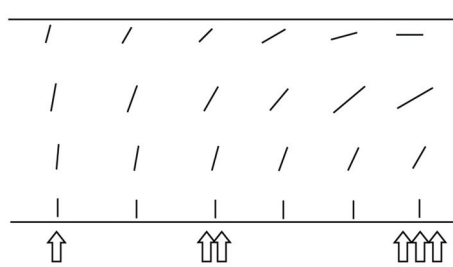


Рис. 3. Радиальное сечение ЖК линзы со светорегулируемым фокусным расстоянием / Fig. 3. Light-oriented LCD lens, its radial plane.

Источник: составлено авторами.

Формирование ориентированных структур

На рис. 4 показано планарно-симметричное ориентирование. Оно получается следующим образом [5]. Поворотом полуволновой пластины ($\lambda/2$) меняется поляризация проходящего через пластину линейно поляризованного лазерного излучения, которое затем фокусируется линзой на слое ЖК-композиата на подложке, вращающейся с некоторой угловой скоростью ω . Управляющая система позиционирует, после каждого полного оборота подложки, на одно деление – ширину записываемой концентрической дорожки по радиусу – весь записывающий комплекс: лазер, полуволновую пластину, линзу. Всё время одного оборота полуволновая пластина неподвижна, то есть плоскость поляризации лазера постоянна для всей записываемой дорожки.

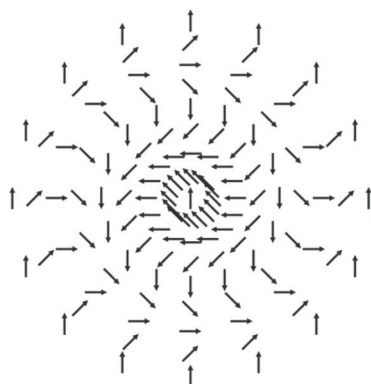


Рис. 4. Планарно-симметричное ориентирование / Fig. 4. Planar-symmetric orientation.

Источник: [5].

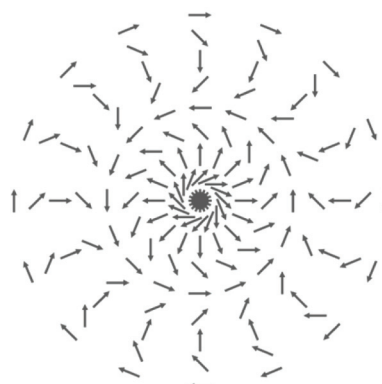


Рис. 5. Цилиндрически-симметричное ориентирование / Fig. 5. Cylindrically symmetric orientation.

Источник: [5].

На рис. 5 показано цилиндрически-симметричное ориентирование. Оно получается аналогичным образом [5], с той разницей, что подложка и плоскость поляризации лазера (то есть полуволновая пластина) согласованно вращаются, и плоскость поляризации лазера образует постоянный угол с радиусом для всей записываемой за один оборот дорожки. Поворот полуволновой пластины на другой угол с радиусом и позиционирование на следующую дорожку происходят после каждого полного оборота.

В обоих случаях директор ЖК ориентируется под действием поляризованного света.

Как уже упоминалось выше, перезапись осуществляется в рамках цикла нагрев-охлаждение. Это означает, что можно прогревать сразу всю подложку со слоем ЖК-композита или локальный участок непосредственно перед местом воздействия луча – получается своего рода головка записи, как у некоторых других средств записи с дорожками различной природы. Принципиально можно перезаписывать не только светоориентированием, но и головкой записи на основе переориентирования директора ЖК магнитным или электрическим полем, причём тоже в рамках цикла нагрев-охлаждение.

Для приведённых на рис. 4 и рис. 5 геометрий на фотоориентированном ЖК-полимере получены в [5]: многопериодные фазовые транспаранты с периодом ~ 200 мкм – планарно-симметричные; дифракционные элементы – цилиндрически-симметричные. Дифракционные элементы, при освещении линейно поляризованным лучом, формируют дифракционную картину в виде двух концентрических окружностей с разной (одна с правой, другая с левой) поляризацией. При освещении лучом с правой круговой поляризацией формируется одна окружность с левой круговой поляризацией, и наоборот, при освещении лучом с левой круговой поляризацией формируется одна окружность с правой круговой поляризацией.

Для цилиндрически-симметричных структур в [5] было показано, что если по квадратичному закону изменяется от центра к краю пространственный период (записывающий узел передвигается по радиусу, то есть от записанной концентрической дорожки к новой дорожке, с соответствующим шагом), то элемент обладает фокусирующими свойствами – формируется показанная на рис. 6 и рис. 7 структура Френеля. Для её формирования процесс записи модифицируется следующим образом: один из интерферирующих пучков формирует сферический волновой фронт (для чего проходит через линзу), а затем перекрывается на определённом расстоянии с лучом с плоским волновым фронтом.

В зависимости от круговой поляризации падающего пучка света, она (по принципу геометрической фазы с непрерывно изменяющейся периодичностью) является либо собирающей, либо (в случае ортогональной круговой поляризации) рассеивающей линзой. Данное свойство отличает её от обычной линзы Френеля.

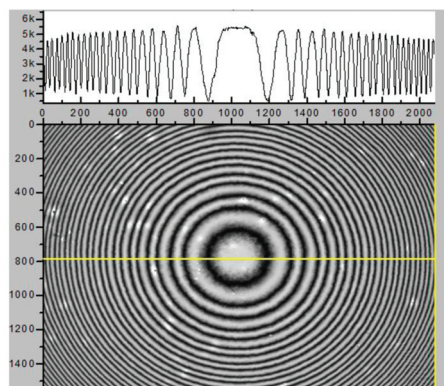


Рис. 6. Фотография, сделанная с помощью поляризационного микроскопа.

Структура Френеля /

Fig. 6. Image of the Fresnel structure obtained under a polarizing microscope.

Источник: [5].

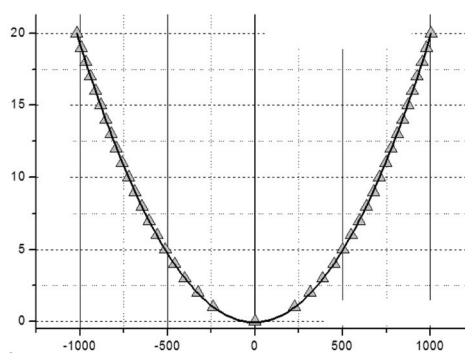


Рис. 7. Для структуры Френеля с рис.5, радиальное распределение колец имеет высокую степень симметрии и хорошо описывается параболой / Fig. 7. The distribution of rings away from the center has a high degree of symmetry and is well described by a parabola.

Источник: [5].

Выводы

Предложены новые принципы организации жидкокристаллических композитных перенастраиваемых (перезаписываемых) светоориентируемых геометрических фазовых элементов. Предложенные элементы перспективны как дифракционные, дифракционно-фокусирующие и фокусирующие дискретно перезаписываемые (перенастраиваемые) энергонезависимые оптические элементы. Также показана возможность использования предложенных принципов перенастройки (перезаписи) в светофильтрах, оптических затворах и широком ряде других оптических элементов.

Статья поступила в редакцию 16.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Чаусов Д. Н., Курилов А. Д., Беляев В. В. Жидкокристаллические нанокомпозиты, легированные наночастицами редкоземельных элементов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2020. Т. 20. № 2. С. 6–22. DOI: 10.18083/LCAppl. 2020.2.6.
2. Соломатин А. С. Светоориентируемые ячейки нематического ЖК с одной стороной, покрытой ориентантом // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2018. № 2. С. 21–33. DOI: 10.18384/2310-7251-2018-2-21-33.
3. Соломатин А. С. Линзы на основе жидких кристаллов с неоднородным радиальным распределением директора // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2016. № 3. С. 37–45. DOI: 10.18384/2310-7251-2016-3-37-45.

4. Формирование упорядоченных кристаллических микроструктур 4-циано-4-октилосидифенила в боросилоксановых гелях / Ермакова М. В., Мащенко В. И., Чаусова О. В., Соломатин А. С., Волосникова Н. И., Чаусов Д. Н. // Жидкие кристаллы и их практическое использование 2019. Т. 19. № 4. С. 61–66. DOI: 10.18083/LCAppl.2019.4.61.
5. Запись геометрических фазовых элементов на основе жидкокристаллических полимеров / Маргарян А. Л., Абрамян В. К., Оганесян Д. Л., Акопян Н. Г., Арутюнян В. М., Беляев В. В., Соломатин А. С. // Известия НАН Армении. Физика. 2017. Т. 52. № 3. С. 353–360.
6. Особенности формирования микроструктуры и оптические свойства жидкокристаллических композитных твист-ячеек / Соломатин А. С., Мащенко В. И., Шашкова Ю. О., Беляев В. В. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2017. № 2. С. 53–63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63.
7. Особенности формирования микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана / Мащенко В. И., Шашкова Ю. О., Соломатин А. С., Беляев В. В. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2017. № 2. С. 34–45 DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-34-45.
8. Микроструктуры жидкокристаллических композитов на основе боросилоксана. Оптические свойства дисперсной жидкокристаллической структуры на их основе / Мащенко В. И., Соломатин А. С., Шашкова Ю. О., Беляев В. В. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2017. № 3. С. 97–107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107.
9. Особенности процесса кристаллизации 4,4'-азоксианизола в виде множественных «кофейных колец» / Васильчикова Е. Н., Константинов М. С., Мащенко В. И., Кучеров Р. Н., Чаусов Д. Н., Дадиванян А. К. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2020. Т. 20. № 1. С. 47–52. DOI: 10.18083/LCAppl.2020.1.47.
10. Патент №0002607454 Способ получения смеси жидкого кристалла с полимером для дисплейной техники и оптоэлектроники / В. В. Беляев, В. И. Мащенко, А. С. Соломатин, Д. Н. Чаусов; Приоритет от 27.04.2015.
11. Соифер В. А. Нанопотоника и дифракционная оптика // Компьютерная оптика. 2008. Т. 32. № 2. С. 110–118.
12. Коншина Е. А. Оптика жидкокристаллических сред. СПб: СПб НИУ ИТМО, 2012. 99 с.
13. Невская Г. Е., Томилин М. Г. Адаптивные линзы на основе жидких кристаллов // Оптический журнал. 2008. Т. 75. №. 9. С. 35–48.

REFERENCES

1. Chausov D. N., Kurilov A. D., Belyaev V. V. [Liquid crystal nanocomposites doped with rare earth elements]. In: *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* [Liquid Crystals and their Application], 2020, vol. 20, no. 2, pp. 6–22. DOI: 10.18083/LCAppl.2020.2.6.
2. Solomatina A. S. [Light-oriented nematic lcd cells covered with orientant on one side]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2018, no. 2, pp. 21–33. DOI: 10.18384/2310-7251-2018-2-21-33.
3. Solomatina A. S. [LC lenses with various radial orientational distribution]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2016, no. 3, pp. 37–45. DOI: 10.18384/2310-7251-2016-3-37-45.

4. Ermakova M. V., Mashchenko V. I., Chausova O. V., Solomatin A. S., Volosnikova N. I., Chausov D. N. [Formation of ordered crystalline microstructures of 4-cyano-4-octyloxydiphenyl in borosiloxane gels]. In: *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* [Liquid Crystals and their Application], 2019, vol. 19, no. 4, pp. 61–66. DOI: 10.18083/LCAppl.2019.4.61.
5. Margaryan A. L., Abramyan V. K., Oganessian D. L., Akopyan N. G., Arutyunyan V. M., Belyaev V. V., Solomatin A. S. [Recording of geometric phase elements based on liquid crystal polymers]. In: *Izvestiya NAN Armenii. Fizika* [Proceedings of National Academy of Sciences of Armenia], 2017, vol. 52, no. 3, pp. 353–360.
6. Solomatin A. S., Mashchenko V. I., Shashkova Yu. O., Belyaev V. V. [Formation and optical properties of twist structures in a nematic liquid crystal composite]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2017, no. 2, pp. 53–63. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-53-63.
7. Mashchenko V. I., Shashkova Yu. O., Solomatin A. S., Belyaev V. V. [Peculiarities of the formation of a microstructure of borosiloxane liquid crystal composites]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2017, no. 2, pp. 34–45. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-2-34-45.
8. Mashchenko V. I., Solomatin A. S., Shashkova Yu. O., Belyaev V. V. [Microstructures of liquid crystalline composites based on borosiloxane. Optical properties of their dispersion liquid crystalline structure]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2017, no. 3, pp. 97–107. DOI: 10.18384/2310-7251-2017-3-97-107.
9. Vasil'chikova E. N., Konstantinov M. S., Mashchenko V. I., Kucherov R. N., Chausov D. N., Dadivanyan A. K. [Specific features of crystallization process of 4,4'-azoxyanisole in the form of multiple «coffee rings»]. In: *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* [Liquid Crystals and their Application], 2020, vol. 20, no. 1, pp. 47–52. DOI: 10.18083/LCAppl.2020.1.47.
10. Belyaev V. V., Mashchenko V. I., Solomatin A. S., Chausov D. N. *Patent №0002607454 Sposob polucheniya smesi zhidkogo kristalla s polimerom dlya displeynoy tekhniki i optoelektroniki; Prioritet ot 27.04.2015.* [Patent No. 0002607454 A method of producing a mixture of a liquid crystal with a polymer for display technology and optoelectronics; Priority from 27.04.2015].
11. Soifer V. A. [Nanophotonics and diffractive optics]. In: *Kompyuternaya optika* [Computer Optics], 2008, vol. 32, no. 2, pp. 110–118.
12. Konshina E. A. *Optika zhidkokristallicheskich sred* [Optics of liquid crystal media]. St. Petersburg, Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics Publ., 2012. 99 p.
13. Nevskaya G. E., Tomilin M. G. [Adaptive lenses based on liquid crystals]. In: *Opticheskii zhurnal* [Journal of Optical Technology], 2008, vol. 75, no. 9, pp. 35–48.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Соломатин Алексей Сергеевич – доктор технических наук, профессор кафедры информатики и компьютерного проектирования Российского химико-технологического университета;

e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru;

Царева Елена Владимировна – кандидат технических наук, доцент кафедры информатики и компьютерного проектирования Российского химико-технологического университета;

e-mail: ellyyy@mail.ru;

Богданов Дмитрий Леонидович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Московского государственного областного университета;

e-mail: kaf-obfiz@mgou.ru;

Барабанова Наталья Николаевна – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой общей физики Московского государственного областного университета;

e-mail: nn.barabanova@mgou.ru;

Усачев Владимир Владимирович – аспирант департамента механики и мехатроники Российского университета дружбы народов;

e-mail: usachev.burevestnik@yandex.ru;

Данкин Денис Геннадьевич – старший преподаватель кафедры физики Национального исследовательского технологического университета «МИСиС»;

e-mail: dankin84@mail.ru;

Бугримов Анатолий Львович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой физики Российского государственного университета имени А. Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

e-mail: bugrimov-al@rguk.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Alexey S. Solomatin – Dr. Sci. (Engineering), Prof., Department of Informatics and computer design, Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia;

e-mail: Sotrudnica_UNC@mail.ru;

Elena V. Tsareva – Cand. Sci. (Engineering), Assoc. Prof., Department of Informatics and Computer Design, Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia;

email: ellyyy@mail.ru;

Dmitry L. Bogdanov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of General Physics, Moscow Region State University;

e-mail: kaf-obfiz@mgou.ru;

Nataya N. Barabanova – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of General Physics, Moscow Region State University;

e-mail: nn.barabanova@mgou.ru;

Vladimir V. Usachev – Postgraduate student, Department of Mechanics and Mechatronics, Peoples' Friendship University of Russia;

e-mail: usachev.burevestnik@yandex.ru;

Denis G. Dankin – Senior Lecturer, Department of physics, National University of Science and Technology «MISIS»;
e-mail: dankin84@mail.ru;

Anatoly L. Bugrimov – Dr. Sci. (Engineering), Prof., Head of the Department of Physics, The Kosygin State University of Russia;
e-mail: bugrimov-al@rguk.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Новые принципы организации жидкокристаллических композитных перенастраиваемых (перезаписываемых) светоориентируемых геометрических фазовых элементов / Соломатин А. С., Царева Е. В., Богданов Д. Л., Барабанова Н. Н., Усачев В. В., Данкин Д. Г., Бугримов А. Л. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 4. С. 73–85.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-73-85

FOR CITATION

Solomatin A. S., Tsareva E. V., Bogdanov D. L., Barabanova N. N., Usachev V. V., Dankin D. G., Bugrimov A. L. New principles for the organization of liquid crystal composite returnable (rewritable) light-oriented geometric phase elements. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 73–85.
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-73-85

УДК 533.6.011

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПАР МОЛЕКУЛ В УДАРНОЙ ВОЛНЕ

Демидов И. В., Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д.

Московский государственный областной университет

141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация

Аннотация

Цель: получение асимптотически строгих выражений для функций распределения пар молекул внутри фронта ударной волны.

Процедура и методы. В работе использовались асимптотические методы теоретической физики, основанные на выделении малых параметров.

Результаты. Получено асимптотически точное выражение для функции распределения пар молекул тяжёлого компонента ударно сжатой бинарной смеси газов в начале его поступательной релаксации.

Теоретическая и практическая значимость. Этот результат чрезвычайно важен для экспериментального моделирования эффекта высокоскоростного перехлёста в ударных трубах.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, неравновесный, смесь газов, ударная волна.

Благодарности. Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-07-00740 А. Исследование выполнено в рамках гранта Президента РФ для молодых учёных – кандидатов наук МК-1330.2020.9.

ASYMPTOTIC APPROXIMATION FOR THE DISTRIBUTION OF PAIRS OF MOLECULES IN A SHOCK WAVE

I. Demidov, M. Kuznetsov, M. Kuzmin, Ju. Kuleshova

Moscow Region State University

24 ulitsa Very Voloshinoi, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

Abstract

The aim of this work is to obtain asymptotically strict expressions for the distribution functions of pairs of molecules inside the front of a shock wave.

Methodology. The work makes use of asymptomatic methods of theoretical physics, based on the selection of small parameters.

Results. An asymptotically accurate expression is obtained for the distribution of pairs of heavy-component molecules of a binary shock of a compressed mixture of gases at the beginning of its progressive relaxation.

Research implications. This result is extremely significant for experimental simulation of a high-speed impact effect in shock tubes.

Keywords: kinetic equation, nonequilibrium, gas mixture, shock wave.

Acknowledgments. This work was supported by the Russian Science Foundation, (Grant No. 20-07-00740A) and the RF President's Grants Council (Support to Young Candidates of Sciences Program, Grant No. MK-1330.2020.9).

Введение

Ранее в предыдущих работах авторов [1–4] по аналитическому исследованию эффекта перехлёста в ударных волнах был получен ряд существенных результатов, основанных на обычно используемых аналитических представлениях одночастичных функций по скоростям молекул в ударной волне. К ним, как известно, относятся аппроксимации Тамма-Мотт-Смита, эллипсоидальное распределение Холвея по скоростям молекул и т. д. Суть же эффектов перехлёста, как известно, заключается в превышении значений какого-либо макроскопического параметра или значений функции распределения пар молекул внутри фронта ударной волны над соответствующими значениями за ним. В последнем случае этот вид перехлёста для функции распределения пар молекул называется также высокоскоростной поступательной неравновесностью [5]. Основное внимание было уделено получению общего вида аналитической зависимости функции распределения пар молекул от определяющих параметров как в простых (однокомпонентных), так и в бинарных смесях [2]. Этот оригинальный результат авторов позволил им выделить четыре основных физических фактора, управляющих механизмом эффектов перехлёста внутри фронта ударной волны:

- эффективное снижение порога химических реакций внутри фронта ударной волны вследствие «пучкового» характера бимодальной функции распределения Тамма-Мотт-Смита;
- снижение скорости равновесных химических реакций в «горячей» зоне за фронтом ударной волны вследствие сильного разбавления «релеевского» газа преобладающим лёгким носителем;
- снижение скорости равновесных высокопороговых химических реакций в «горячей» зоне за фронтом ударной волны вследствие энергетических затрат на диссоциацию (снижение равновесной статистической температуры по сравнению с кинетической внутри фронта ударной волны);
- ускорение скоростей высокопороговых химических реакций вследствие анизотропии поля кинетических температур внутри ударной волны.

Для того, чтобы эффект перехлёста в величинах скоростей физико-химических процессов мог заметно повлиять и на течение за фронтом необходимо, как показали численные экспериментальные исследования, чтобы его величина составляла не менее 10^4 . Такой многопорядковый отрыв в величинах скоростей кинетических поступательно-неравновесных процессов ориентирует прежде всего на точный учёт порядков величин, а не коэффициентов порядка единицы.

Это обосновывает применение ранее использованных в работах авторов соответствующих априорных аналитических аппроксимаций.

Вместе с тем, при таких аналитических аппроксимациях упускается влияние сечения столкновения молекул на вид их функции распределения. В полном виде учёт этого пятого фактора, определяющего эффект перехлёста, требует точного решения кинетического уравнения Больцмана. В настоящее время такое решение для структуры ударной волны удалось получить только численными методами [6]. Получить аналогичное аналитическое решение внутри всего фронта ударной волны представляется намного более сложным. Однако, как показано в данной работе, его можно получить локально, в отдельных сечениях потока. Наряду с этим, в данной работе используется точное распределение продольной кинетической температуры для оценки эффекта перехлёста функции распределения пар молекул в простом газе.

Относительная величина эффекта перехлёста эллипсоидальной функции распределения пар молекул в ударной волне

Эллипсоидальная функция распределения по скоростям отдельных молекул обычно, как известно, используется для расчёта профилей макропараметров. Однако для аналитического расчёта ускорения скоростей активированных физико-химических процессов, то есть эффекта их перехлёста в ударной волне, знания одночастичной функции недостаточно. Для этой цели требуется функция распределения пар сталкивающихся молекул. Такая функция была получена ранее в работе авторов [2].

Эллипсоидальное распределение учитывает анизотропию поля кинетических температур внутри фронта ударной волны. Как правило, кинетическая температура в направлении движения потока выше, чем в направлении, ему перпендикулярном. Более того, эта температура выше не только «перпендикулярной» температуры, но и превышает в некоторой области величину равновесной температуры за фронтом волны. В этом выражается эффект перехлёста продольной температуры. Заметим, что эффект перехлёста продольной температуры является фундаментальным научным фактом. Данный эффект был обнаружен экспериментально [7] и получен строго теоретически на основе законов сохранения потоков массы и импульса в ударной волне [8]. Непосредственным следствием работы [8] является то, что любая новая теория, связанная с исследованием структуры фронта ударной волны, обязательно должна быть проверена на предмет совпадения с эталонной кривой для продольной температуры T_x .

В настоящей работе эталонная зависимость температуры T_x от переменной концентрации частиц (или переменной макроскорости потока газа) использовалась для расчета величины относительного перехлёста пар молекул.

Гиперзвуковое приближение, использованное в настоящей работе, соответствует, как известно, стремлению числа Маха свободного потока в бесконечность [9]. На основе предыдущих результатов авторов [2] можно показать, что

в гиперзвуковом приближении величина относительного эффекта перехлёста для функции распределения пар молекул $\tilde{G}_{neq}$ будет равна:

$$\tilde{G}_{neq} \sim \exp \left\{ (g/u)^2 \left[\left(\frac{1}{2} - \epsilon \right)^2 / \epsilon (1 - \epsilon) \right] \right\}, \quad (1)$$

где $\tilde{G}_{neq} = G_{neq} / G_{eq}$, G_{neq} – поступательно-неравновесная, эллипсоидальная функция распределения пар молекул внутри фронта ударной волны, G_{eq} – равновесная функция распределения пар молекул за фронтом волны, g – модуль относительной скорости $\vec{g}$, u – величина скорости свободного потока перед фронтом волны, ϵ – отношение плотностей потока перед фронтом волны и за ним.

В табл. 1 приведена оценка величины эффекта перехлёста для эллипсоидальной функции распределения пар молекул в простом газе. Параметрами в этой таблице являются параметрически задаваемая абсолютная величина относительной скорости молекул g в величинах скорости потока u , набегающего на ударную волну. Значения величин g , равные $3u$ и $5u$ примерно соответствуют энергиям активации высокопороговых химических реакций, начиная со значений в несколько эВ. Параметр ϵ^{-1} соответствует предельному сжатию в бесконечно сильной ударной волне с числом Маха M , $M \rightarrow \infty$.

Таблица 1 / Table 1

Величина эффекта перехлёста $\tilde{G}_{neq}$ в простом газе / The overshoot effect value $\tilde{G}_{neq}$ in a simple gas.

$\frac{g}{\epsilon}$	u	$3u$	$5u$
$\frac{1}{4}$	$10^{0,1}$	$10^{1,3}$	$10^{3,6}$
$\frac{1}{6}$	$10^{0,3}$	10^3	10^9
$\frac{1}{7}$	$10^{0,4}$	10^4	10^{10}

Источник: составлено авторами.

Из формулы (1) непосредственно видно, что эффект высокоскоростного перехлёста $\tilde{G}_{neq} > 1$ удовлетворяет принципу независимости свободного потока от числа Маха M . Следует подчеркнуть, что величина $\tilde{G}_{neq}$ является микроскопической характеристикой газа, поскольку зависит от модуля относительной скорости молекул g . Таким образом, принцип независимости от числа Маха мо-

жет выполняться не только для макрохарактеристик гиперзвукового потока за фронтом ударной волны.

Из формулы (1) следует также, что эффект перехлёста $\tilde{G}_{neq} > 1$ будет заведомо выполняться для значений параметра $\epsilon > \frac{1}{2}$. В простом газе с минимальным

числом степеней свободы, равным 3, величина ϵ будет равна $\frac{1}{4}$. Для газа с вра-

щательными степенями свободы, когда полное число степеней свободы становится равным 5 (линейная молекула) или 6 (нелинейная молекула) величина ϵ

будет соответственно равна $\frac{1}{6}$ и $\frac{1}{7}$. С дальнейшим увеличением внутренних

степеней свободы параметр ϵ будет ещё меньше. Таким образом, соотношение (1) всегда выполнимо.

Необходимо отметить также очень быстрый (экспоненциальный) рост величины эффекта перехлёста при относительно небольшом изменении параметра ϵ .

Оценка величины высокоскоростного перехлёста $\tilde{G}_{neq} > 1$

при асимптотически точном знании функции распределения пар молекул в сильно диспергированных ударно сжатых газовых смесях

Известно, что в сильно диспергированных газовых смесях газов, когда концентрация лёгкого компонента n_l значительно превосходит концентрацию тяжёлого компонента n_h , $n_l \gg n_h$, эффект высокоскоростного перехлёста значительно усиливается [5]. Если же рассмотреть рэлеевский газ, когда неравенство $n_l \gg n_h$ сопровождается другим неравенством $m_l \ll m_h$, то в задаче возникает сильное разделение по величине характерных времён релаксации (времён прихода к равновесию) лёгкого и тяжёлого компонентов. Ударная волна как бы раздваивается. Сначала приходит к равновесию лёгкий компонент, пройдя через ударную волну в своём газе. Потом же на временах значительно больших (в отношении m_h/m_l [10]) к равновесию приходит тяжёлый компонент.

Такая асимптотическая ситуация даёт дополнительные возможности для точного аналитического решения проблемы высокоскоростного перехлёста.

В связи с этим рассмотрим бинарную рэлеевскую смесь газов и проанализируем основные физические особенности процессов релаксации. Довольно ясно, что в рэлеевской смеси газов первым к состоянию термодинамического равновесия приходит лёгкий компонент. К этому моменту тяжёлый компонент пребывает ещё в замороженном состоянии, асимптотически совпадающем с локально равновесным («холодным») состоянием перед фронтом ударной волны.

Таким образом, появляется возможность аналитически составить функцию распределения пар из лёгких и тяжёлых молекул на основе асимптотически точных одночастичных функций распределений для лёгкого («горячий Максвеллиан») и тяжёлого («холодный Максвеллиан») компонентов рэлеевской смеси.

Подчеркнём радикальное отличие использования «холодных» и «горячих» Максвеллианов при составлении функции распределения пар молекул на основе метода Тамма-Мотт-Смита и рассматриваемом асимптотическом случае рэлеевской смеси газов. В первом случае «холодный» и «горячий» Максвеллианы берутся в совершенно различных, бесконечно удалённых друг от друга сечениях потока перед и за ударной волной. В случае же рэлеевской смеси эти Максвеллианы берутся в одном и том же сечении, характеризующем асимптотически конечный этап прихода лёгкого компонента смеси к термодинамическому равновесию за фронтом ударной волны в лёгком газе. При этом можно показать, что так называемая перекрёстная мода в Тамм–Мотт–Смитовской функции распределения пар молекул будет математически точно совпадать с функцией распределения пар молекул рэлеевской смеси газа в сечении прихода лёгкого компонента к равновесию.

Для ограниченного числа возбужденных внутренних степеней свободы максимум высокоскоростного перехлёста $\tilde{G}_{neq}^{(lh)} > 1$ может быть представлен в табл. 2.

Таблица 2 / Table 2

Величина “перехлёста” $\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$ в начале зоны релаксации тяжёлого компонента / The value of “overshoot” $\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$ at the beginning of the relaxation zone of the heavy component.

Газ	(A)	(A ₂), без учета колебательных степеней свободы молекулы	(A ₂), с учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекулы	(A ₃) с учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекулы
γ	5/3	7/5	9/7	7/6
ε	1/4	1/6	1/8	1/13
$\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$	1,31	2.37	4,84	3628

Источник: составлено авторами.

Здесь символом A обозначен сорт молекул газов с различным количеством атомов. Так, символами (A), (A₂), (A₃) обозначены молекулы, соответственно, одноатомных, двухатомных и трёхатомных газов, $\tilde{G}_{neq}^{(lh)} = G_{neq}^{(lh)} / G_{eq}^{(lh)}$, $G_{neq}^{(lh)}$ – поступательно-неравновесная функция распределения пар молекул внутри фронта ударной волны, $G_{eq}^{(lh)}$ – равновесная функция распределения пар молекул за фронтом волны.

Из данных табл. 2 можно сделать вывод, аналогичный выводу из данных табл. 1, об очень быстром (экспоненциальном) возрастании функции $\tilde{G}_{neq}^{(lh)}$ с относительно небольшим изменением параметра ε.

Заключение

В работе использовано точное выражение для величины продольной кинетической температуры в ударной волне при вычислении эффекта высокоскоростного перехлёста в простом газе.

Асимптотически точные выражения одночастичных функций распределения компонентов рэлеевской смеси использованы для определения эффекта высокоскоростного перехлёста. Асимптотически точная величина этого эффекта получена к моменту завершения процесса релаксации лёгкого компонента.

Статья поступила в редакцию 21.12.2020 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Смотров Л. В. Эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в бимодальной ударной волне // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2012. № 2. С. 108–116.
2. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. Increase in Rates of Kinetic Processes Inside the Bimodal Hypersonic Shock Wave // Heat Transfer Research. 2012. Vol. 43. Iss. 3. P. 228–236. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v43.i3.30.
3. Кузнецов М. М., Смотров Л. В. Аналитические свойства эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2013. № 3. С. 66–73.
4. Kuznetsov M. M., Kuleshova Ju. D., Reshetnikova Yu. G., Smotrova L. V. Analytical properties of nonequilibrium threshold in shock waves // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 996: International Interdisciplinary Conference “Euler Readings MRSU 2017” (22–24 November 2017, Moscow Region State University (MRSU), Russian Federation). P. 012006. DOI: 10.1088/1742-6596/996/1/012006.
5. Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б., Черешнев С. Л. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1990. № 2. С. 144–150.
6. Додулад О. И., Клосс Ю. Ю., Черемисин Ф. Г. Расчёты структуры ударной волны в смеси газов на основе решения уравнения Больцмана // Физико-химическая кинетика в газовой динамике (электронное периодическое издание). 2013. Т. 14. № 1. URL: <http://chemphys.edu.ru/media/published/5.pdf> (дата обращения: 20.09.2020).
7. Muntz C. P., Harnett L. N. Molecular Velocity Distribution Function Measurements in a Normal Shock Wave // The physics of fluids. 1969. Vol. 12. P. 2027–2035. DOI: 10.1063/1.1692308.
8. Yen Sh.-M., Ng W. Shock-wave structure and intermolecular collisions laws // Journal of Fluid Mechanics. 1974. Vol. 65. Iss. 1. P. 127–144. DOI: 10.1017/S0022112074001297.
9. Хейз У. Д., Пробстин Р. Ф. Теория гиперзвуковых течений. М.: Изд-во Иностранной литературы, 1962, 607 с.
10. Осипов А. П. Релаксационные процессы в газах. Неравновесное распределение энергии по поступательным степеням свободы // Физика горения и взрыва. 1966. № 4. С. 42–61.

REFERENCES

1. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Smotrova L. V. [Effect of high-velocity translational nonequilibrium in a bimodal shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2012, no. 2, pp. 108–116.
2. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. Increase in Rates of Kinetic Processes Inside the Bimodal Hypersonic Shock Wave. In: *Heat Transfer Research*, 2012, vol. 43, iss. 3, pp. 228–236. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v43.i3.30.
3. Kuznetsov M. M., Smotrova L. V. [Analytical qualities of high-velocity translational nonequilibrium in a shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2013, no. 3, pp. 66–73.
4. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Reshetnikova Yu. G., Smotrova L. V. Analytical properties of nonequilibrium threshold in shock waves. In: *Journal of Physics: Conference Series*. 2018, vol. 996: International Interdisciplinary Conference “Euler Readings MRSU 2017” (22–24 November 2017, Moscow Region State University (MRSU), Russian Federation), pp. 012006. DOI: 10.1088/1742-6596/996/1/012006.
5. Genich A. P., Kulikov S. V., Manelis G. B., Chereshev S. L. [The distribution of molecular velocities in the shock wave front in gas mixtures]. In: *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 1990, no. 2, pp. 144–150.
6. Dodulad O. I., Kloss Yu. Yu., Tceremissine F. G. [Computations of a shock wave structure in a gas mixture on the base of the Boltzmann equation]. In: *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoi dinamike (elektronnoe periodicheskoe izdanie)* [Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics (electronic periodical)], 2013, vol. 14, no. 1. Available at: <http://chemphys.edu.ru/media/published/5.pdf> (accessed: 20.09.2020).
7. Muntz C. P., Harnett L. N. Molecular Velocity Distribution Function Measurements in a Normal Shock Wave. In: *The physics of fluids*, 1969, vol. 12, pp. 2027–2035. DOI: 10.1063/1.1692308.
8. Yen Sh.-M., Ng W. Shock-wave structure and intermolecular collisions laws. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 1974, vol. 65, iss. 1, pp. 127–144. DOI: 10.1017/S0022112074001297.
9. Hayes W. D., Probstein R. F. Hypersonic Flow Theory. New York, Acad. Press, 1959, 464 p.
10. Osipov A. P. [Relaxation processes in gases. Nonequilibrium translational energy distribution]. In: *Fizika gorennya i vzryva* [Combustion, Explosion and Shock Waves], 1966, no. 4, pp. 42–61.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Демидов Иван Владимирович – аспирант кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;
e-mail: iv.demidov1812@yandex.ru;

Кузнецов Михаил Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета;
e-mail: kuznets-omn@yandex.ru;

Кузьмин Михаил Кузьмич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математического анализа Московского государственного областного университета;
e-mail: mk.kuzmin@mgou.ru;

Кулешова Юлия Дмитриевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей алгебры, элементарной математики и методики преподавания математики Московского государственного областного университета;
e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Ivan V. Demidov – postgraduate student, Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;
e-mail: iv.demidov1812@yandex.ru;

Mihail M. Kuznetsov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Theoretical Physics, Moscow Region State University;
e-mail: kuznets-omn@yandex.ru;

Mihail K. Kuzmin – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Mathematical Analysis, Moscow Region State University;
e-mail: mk.kuzmin@mgou.ru;

Yuliya D. Kuleshova – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Higher Algebra, Elementary Mathematics and Methods of Teaching Mathematics, Moscow Region State University;
e-mail: juliaybogdanova@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Асимптотическое приближение для функции распределения пар молекул в ударной волне / Демидов И. В., Кузнецов М. М., Кузьмин М. К., Кулешова Ю. Д. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. №4. С. 86–94.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94

FOR CITATION

Demidov I. V., Kuznetsov M. M., Kuzmin M. K., Kuleshova Ju. D. Asymptotic approximation for the distribution of pairs of molecules in the shock wave. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 4, pp. 86–94.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-4-86-94

ПАМЯТИ ГЕВОРКЯНА ЭДВАРДА ВИГЕНОВИЧА



21.06.1950 – 12.12.2020

12 декабря 2020 года ушёл из жизни видный учёный, ведущий специалист в области термодинамики и статистической физики жидких кристаллов, доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики МГОУ Гево́ркян Эдвард Ви́генович.

Гево́ркян Э. В. закончил физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова (1973 г.) и аспирантуру по кафедре квантовой статистики и теории поля. В 1976 г. он защитил диссертацию на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, а в 1994 г. – диссертацию на соискание учёной степени доктора физико-математических наук.

В 1976–2000 гг. Гево́ркян Э. В. работал в Московском институте приборостроения, пройдя последовательно все должности: младшего (1976–1984), старшего (1984–1989), ведущего (1989–1995) и главного (1995–2000) научного сотрудника.

С 1998 г. Гево́ркян Э. В. был профессором кафедры общей физики Московского государственного областного университета. Под его руководством проводились исследования термодинамических, акустических и диэлектрических свойств жидких кристаллов в изменяющихся магнитных полях различной конфигурации. Разработаны теоретические основы и методика создания комплекса научной аппаратуры, что нашло отражение в 11 патентах и авторских свидетельствах об изобретениях.

Сфера научных интересов Э. В. Гево́ркяна включала в себя широкий круг проблем современной теоретической и экспериментальной физики конденсированного состояния, исследования реологических свойств жидких кристаллов в изменяющихся полях и статистической термодинамики. Э. В. Гево́ркян является одним из создателей молекулярно-статистической теории жидких и твёрдых кристаллов с многочастичными взаимодействиями.

Э. В. Гево́ркян – автор более 100 научных работ и 8 монографий, имеющих высокий индекс научного цитирования.

Э. В. Гево́ркян активно участвовал в подготовке и аттестации научно-педагогических кадров. Под его руководством защищено 8 кандидатских диссертаций. С 2010 г. он был председателем диссертационного совета по защите докторских и кандидатских диссертаций при МГОУ. Э. В. Гево́ркян активно участвовал в работе редколлегии журнала «Вестник МГОУ. Серия: Физика-математика».

Руководство Университета высоко ценило научную и педагогическую деятельность Э. В. Гево́ркяна. Он был награждён Почётной грамотой Министерства образования и науки Российской Федерации.

Светлая память об Эдварде Ви́геновиче Гево́ркяне навсегда сохранится в сердцах сотрудников физико-математического факультета МГОУ, всего университета, его коллег и учеников.



ВЕСТНИК МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБЛАСТНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Рецензируемый научный журнал «Вестник Московского государственного областного университета» основан в 1998 г.

Сегодня Московским государственным областным университетом выпускается десять научных журналов по разным отраслям науки. Журналы включены в Перечень ВАК (составленный Высшей аттестационной комиссией при Минобрнауки РФ Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук). Журналы включены в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ).

Печатные версии журналов зарегистрированы в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Полнотекстовые версии журналов доступны в интернете на сайте Вестника Московского государственного областного университета (www.vestnik-mgou.ru), а также на платформах Научной электронной библиотеки (www.elibrary.ru) и Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (<https://cyberleninka.ru>).

ВЕСТНИК МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБЛАСТНОГО УНИВЕРСИТЕТА

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА
2020. № 4

Над номером работали:

Литературный редактор М.С. Тарасова
Переводчик И.А. Улиткин
Корректор М.С. Тарасова
Компьютерная верстка Н.Н. Жильцов

Отдел по изданию научного журнала
«Вестник Московского государственного областного университета»
Информационно-издательского управления МГОУ
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, офис 98
тел. (495) 723-56-31; (495) 780-09-42 (доб. 6101)
e-mail: info@vestnik-mgou.ru
сайт: www.vestnik-mgou.ru

Формат 70x108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура «Minion Pro».

Тираж 500 экз. Усл. п. л. 6, уч.-изд. л. 5,75.

Подписано в печать: 30.12.2020. Дата выхода в свет: 26.01.2021. Заказ № 2020/12-16.

Отпечатано в ИИУ МГОУ
105005, г. Москва, ул. Радио, 10А

ISSN 2072-8387



9 772072 838027 >