

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

4(230) 2015

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2015

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ**

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Сулис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр
мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;
Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,
Лозанна, Швейцария;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.
Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,
Канберра, Австралия.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» ISSN 1994-2354.

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**.

Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



**ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL**

Physics
and Mathematics

4(230) 2015

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2015

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
D.A. Varshalovich – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS;
A.Ye. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
R.A. Suris – full member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sc. (Biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia.
N.M. Kozhevnikov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.V. Kozlovsky – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
J.B. Malherbe – Dr. Sc. (Physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solov'yov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU' (ISSN 1994-2354).

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© Scientific Electronic Library (<http://www.elibrary.ru>).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politekhnikeskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

Содержание

Физика конденсированного состояния

- Кудинова Н.Р., Полянский В.А., Полянский А.М., Яковлев Ю.А.** *Определение энергий связи растворенного водорода на основании модели многоканальной диффузии в твердом теле* 9

Математическое моделирование физических процессов

- Абрамов А.Г., Левченя А.М., Смирнов Е.М., Смирнов П.Е.** *Численное моделирование турбулентного теплообмена в коридорном пучке труб, поперечно обтекаемом жидким металлом* 24
- Гатаулин Я.А., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Федорова Е.А., Юхнев А.Д.** *Расчетно-экспериментальное исследование слабозакрученного течения жидкости в модели кровеносного сосуда со стенозом* 36

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

- Митюрева А.А., Смирнов В.В.** *Теоретические основы подхода к представлению совокупной информации по сечениям процессов рассеяния* 48

Математическая физика

- Петриченко М.Р.** *Грубые оценки и биномиальные аппроксимации в предельных задачах для уравнения Крокко* 61

Приборы и техника физического эксперимента

- Октябрьский В.П.** *Критерий оптимального выбора медного термосопротивления для измерений в атмосфере при нормальных условиях* 73
- Паневин В.Ю., Софронов А.Н., Фирсов Д.А., Тер-Мартirosян А.Л.** *Цифровая система визуализации флуоресценции для антибактериальной фотодинамической терапии в стоматологии* 77

Физическая электроника

- Соловьев К.В.** *Алгоритм траекторного анализа электростатических полей, обеспечивающих угловую фокусировку заданного порядка в плоскости симметрии*..... 84

Физическое материаловедение

- Кудинова Н.Р., Полянский В.А., Полянский А.М., Яковлев Ю.А.** *Моделирование пластичности материалов с микро- и наноструктурой*..... 91
- Палан Ч.Б., Баджадж Н.С., Оманвар С.К.** *Основные результаты изучения дозиметрических свойств люминофора $SrSO_4:Eu^{2+}$ (статья на английском языке)* 100
- Такпире С.Р., Уагули С.А.** *Оптические и тепловые свойства статистического сополимерного композита ПТ-со-ПАНИ-Тi, перспективного для применения в фотоэлектрических устройствах (статья на английском языке)*..... 111

Джапте В.В., Мехта П.П. *Обзор современных достижений в исследовании гидротропных растворов (статья на английском языке)* 119

Математика

Чурилова М.А. *Влияние выбора критерия маркировки на работу адаптивного алгоритма с апостериорным контролем точности* 139

Радиофизика

Акинцов Н.С., Копытов Г.Ф., Мартынов А.А. *Спектрально-угловые характеристики излучения заряженной частицы в плоской монохроматической электромагнитной волне* 150

Акинцов Н.С., Исаев В.А., Копытов Г.Ф., Мартынов А.А. *Движение заряженной частицы в поле частотно-модулированной электромагнитной волны и постоянном магнитном поле* 164

Авторский указатель 175

Contents

Condensed Matter Physics

- Kudinova N.R., Polyanskiy V.A., Polyanskiy A.M., Yakovlev Yu.A.** *Determining the bound energies of dissolved hydrogen on a basis of the multichannel diffusion model in a solid* 9

Simulation of Physical Processes

- Abramov A.G., Levchenya A.M., Smirnov E.M., Smirnov P.E.** *Numerical simulation of liquid metal turbulent heat transfer from an inline tube bundle in cross-flow* 24
- Gataulin Ya.A., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Fedorova E.A., Yukhnev A.D.** *Weakly swirling flow in a model of blood vessel with stenosis: Numerical and experimental study* 36

Atom Physics and Physics of Clusters and Nanostructures

- Mityureva A.A., Smirnov V.V.** *Theoretical base of the approach to the representation of aggregate information on the cross sections of the scattering processes* 48

Mathematical Physics

- Petritchenko M.R.** *Rough estimates and binomial approximations for the Crocco equation in the boundary problems* 61

Experimental Technique and Devices

- Oktyabrskiy V.P.** *The criterion for the optimal sampling of copper thermistor to measure in the atmosphere under normal conditions* 73
- Panevin V.Yu., Sofronov A.N., Firsov D.A., Ter-Martirosyan A.L.** *Digital system of fluorescence visualization for antibacterial photodynamic therapy in dentistry* 77

Physical Electronics

- Solovyev K.V.** *The trajectory analysis algorithm for electrostatic fields providing an angle focusing of given order in the plane of symmetry* 84

Physical Materials Technology

- Kudinova N.R., Polyanskiy V.A., Polyanskiy A.M., Yakovlev Yu.A.** *Modeling of the plasticity of microstructured and nanostructured materials* 91
- Palan C.B., Bajaj N.S., Omanwar S.K.** *Elementary results on the dosimetric properties of SrSO₄:Eu²⁺ phosphor* 100
- Takpire S.R., Waghuley S.A.** *Optical and thermal properties of PTh-co-PANI-Ti random copolymer composite for photovoltaic application* 111
- Dhapte V.V., Mehta P.P.** *Advances in hydrotropic solutions: an updated review* 119

Mathematics

Churilova M.A. *The sensitivity of the adaptive algorithm with a posteriori error control to marking criteria* 139

Radiophysics

Akintsov N.S., Kopytov G.F., Martynov A.A. *Spectral and angular radiation characteristics of a charged particle in the plane monochromatic electromagnetic wave* 150

Akintsov N.S., Isaev V.A., Kopytov G.F., Martynov A.A. *The motion of a charged particle in the field of a frequency-modulated electromagnetic wave and in the constant magnetic field* 164

Author index 175

DOI: 10.5862/JPM.230.1

УДК: 531.8

*Н.Р. Кудинова¹, В.А. Полянский²,
А.М. Полянский³, Ю.А. Яковлев¹*

¹ Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого;

³ НПК «Электронные и пучковые технологии», г. Санкт-Петербург

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ РАСТВОРЕННОГО ВОДОРОДА НА ОСНОВАНИИ МОДЕЛИ МНОГОКАНАЛЬНОЙ ДИФфуЗИИ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

В статье обосновывается гипотеза о многоканальном характере диффузии водорода в твердом теле. На основании этой гипотезы построена математическая модель диффузии, которая позволяет определить энергии связи растворенного водорода по экстракционной кривой, полученной в результате применения промышленного метода вакуум-экстракции с масс-спектрометрической регистрацией потоков водорода. Приводятся данные различных экспериментов, которые подтверждают адекватность многоканальной модели, обсуждаются преимущества и недостатки предлагаемого подхода в сравнении с широко известным методом термодесорбционных спектров (ТДС), который является общепризнанным классическим способом экспериментального определения энергии связи водорода в твердом теле.

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ВОДОРОДА, ДИФфуЗИЯ ВОДОРОДА, ТДС, АНАЛИЗАТОР ВОДОРОДА, МЕТОД ВАКУУМ-НАГРЕВА, СТАНДАРТ.

Введение

Исследование диффузии водорода в твердом теле имеет большое практическое значение. Явление водородной хрупкости и растрескивание отливок в процессах остывания и кристаллизации происходят в результате диффузии водорода. В.С. Горский в своих работах [1, 2] доказал, что на диффузию атомов в твердом теле влияют, помимо температуры и градиента концентраций, деформации кристаллической матрицы, возникающие под действием механических напряжений. Это позволило объяснить механизмы постепенного развития водородной хрупкости в металлических деталях и образования холодных трещин в сварных швах. Диффузия водорода играет важную

роль в процессах коррозии, растрескивания и хрупкого разрушения материалов. Велико влияние водорода и на электрические свойства полупроводников [3 – 8].

Концентрацию водорода в металлах и полупроводниках контролируют на промышленных предприятиях [9 – 11]. Каждые сутки в мире проводятся тысячи опытов по измерению концентрации водорода и параметров его взаимодействия с матрицей твердого тела. Чтобы извлечь водород из твердого тела в процессе анализа, используется диффузия водорода при нагревании анализируемых образцов. В таких опытах измеряют поток водорода. Интерпретация зависимостей этих потоков от времени анализа и температуры образца позволяет оценивать энергии взаимодействия водорода

с матрицей твердого тела и ее дефектами. При исследовании диффузионных потоков водорода установлено, что состояние водорода в твердом теле характеризуется определенными уровнями энергий связи с кристаллической решеткой, поверхностью зерен, различными дефектами структуры и включениями. Согласно полученным результатам, водород со значениями энергии связи в диапазоне 0,2 – 0,4 эВ существенно влияет на пластичность и прочность сталей.

Общепринятым способом экспериментальной оценки энергий связи является метод термодесорбционных спектров (ТДС); его обоснование приводится в работе [12]. Извлечение водорода из образца рассматривается как химическая реакция первого порядка с энергией активации, равной энергии связи. Таким образом, диффузия водорода внутри исследуемого образца считается несущественной.

С одной стороны, это противоречит экспериментальным данным, так как даже при относительно небольших размерах образца учет диффузии вносит существенные коррективы в величину энергии связи [13]. С другой стороны, о недостаточной точности такого подхода свидетельствуют попытки математического моделирования ТДС, измеренных экспериментально [14]. Как правило, энергии связи порядка 0,2 эВ дают при таком моделировании заметные потоки водорода при нормальных условиях, чего не наблюдается на опыте.

Существует возможность оценки энергии связи с привлечением других методов, например спектрального [15], но этот метод хорошо работает для тонких образцов в виде пленок и мембран.

В связи с большим влиянием водорода с различными энергиями связи на структуру и прочность материалов необходимы подходы, применимые не только при научных исследованиях, но и в промышленном эксперименте.

Измерение концентрации водорода методом вакуум-нагрева

Одним из способов измерения концентрации водорода в твердой пробе, которым

пользуются как при исследованиях, так и при промышленном контроле, является метод вакуум-нагрева [15 – 18]. В наших экспериментах мы использовали промышленный анализатор водорода АВ-1 с масс-спектрометрической регистрацией временной зависимости величины потока водорода из образца в процессе его нагревания в вакууме.

На рис. 1 представлена система пробоподготовки, состоящая из экстракционной системы 2, 3 (материал – кварцевое стекло) и радиационной печи 4, температура которой поддерживается постоянной в процессе анализа. Цилиндрические образцы 1 помещаются в холодный отросток экстрактора 2 из тонкого кварцевого стекла.

При проведении анализа образец 1 сбрасывается без нарушения вакуума в аналитический отросток 3. Последний находится при постоянной температуре экстракции, которая автоматически поддерживается нагревателем 4, надетым на отросток. Функциональная схема анализатора приведена на рис. 2.

Для большинства сплавов температура экстракции лежит в диапазоне 400 – 800 °С. Объем экстрактора непрерывно откачивается вакуумными насосами анализатора до рабочего давления 100 мкПа. Анализи-

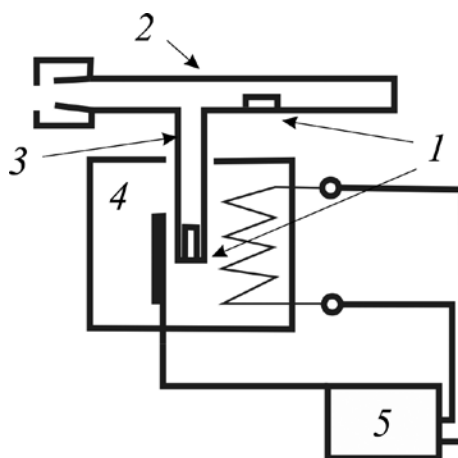


Рис. 1. Экстракционная система анализатора водорода:

1 – цилиндрические образцы, 2 – экстрактор, 3 – аналитический отросток, 4 – радиационная печь с термопарой, 5 – контроллер температуры печи

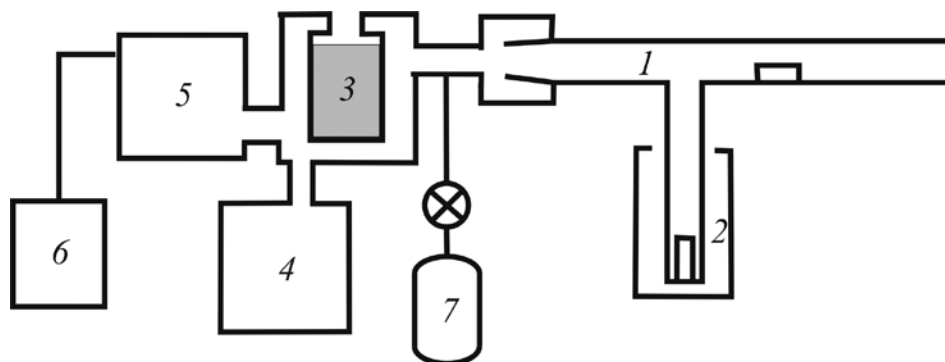


Рис. 2. Функциональная схема анализатора водорода АВ-1:

1 – экстрактор с образцами; 2 – радиационная печь с контроллером температуры, 3 – азотная ловушка; 4 – вакуумный насос; 5 – масс-спектрометр; 6 – система цифровой регистрации с монитором; 7 – система газовой калибровки

руемый образец медленно прогревается до температуры экстракции. Поток водорода, выделяющийся из него, измеряется масс-спектрометрическим анализатором, предварительно прокалиброванным по стандартным образцам содержания водорода. В результате анализа образца получают временную зависимость потока водорода из экстракционной системы (экстракционная кривая). Интеграл от экстракционной кривой пропорционален количеству водорода, экстрагированного из образца. Форма кривой имеет характерные особенности для алюминиевых, магниевых и титановых сплавов, различных марок сталей. При определении параметров диффузии мы сравниваем экспериментальную экстракционную кривую с расчетной экстракционной кривой, которую получаем путем математического моделирования процесса нестационарной диффузии водорода в исследуемом образце.

Моделирование процесса диффузии водорода в образце

Рассмотрим процесс нагревания образца в вакууме на примере образцов титана, с которыми проводились эксперименты. Образец имеет форму, близкую к параллелепипеду, с размерами $a = 2,6$ мм, $l = 4$ мм, $b = 4$ мм.

В процессе анализа температура стенок экстрактора поддерживается на постоянном уровне T_0 . Кварцевое стекло, из кото-

рого сделан экстрактор, обладает практически нулевой теплопроводностью, площадь контакта образца со стенками экстрактора мала, следовательно, теплопередача происходит только за счет излучения.

Кварцевое стекло не пропускает инфракрасное излучение радиационной печи 4 (см. рис. 1), поэтому образец нагревается исключительно за счет теплового излучения стенок экстрактора. Количество тепла dQ , поглощаемого образцом за время dt , составляет:

$$dQ = \varepsilon_n \sigma S (T_0^4 - T^4) dt. \quad (1)$$

Здесь σ – постоянная Стефана – Больцмана ($\sigma = 5,6687 \cdot 10^{-8}$ Вт \cdot м $^{-2}$ \cdot К $^{-4}$); S – площадь поверхности образца; T – температура образца; T_0 – температура стенок аналитического отростка экстрактора; ε_n – коэффициент поглощения исследуемым образцом, который выражается как

$$\varepsilon_n = \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{S}{S_2} \left(\frac{1}{\varepsilon_2} - 1 \right)},$$

где ε_1 – коэффициент поглощения для титана, ε_2 – коэффициент поглощения для стенок кварцевого стекла аналитического отростка экстрактора (в случае инфракрасного излучения он примерно равен 1), S_2 – площадь поверхности стенки аналитического отростка экстрактора, участвующей в теплообмене.

При значениях $\varepsilon_2 = 1$ или гораздо больше, чем величина ε_i , приближенно выполняется равенство $\varepsilon_n \approx \varepsilon_i$. В интересующем нас диапазоне температур 200 – 900 °С можно принять для титана

$$\varepsilon_i = 0,2. \quad (2)$$

Удельная теплоемкость титана при этих условиях слабо зависит от температуры и составляет $c = 0,6$ кДж·кг⁻¹·К⁻¹. Тепло dQ (см. выражение (1)), поглощенное образцом, увеличивает его температуру на величину dT :

$$dQ = c\rho VdT, \quad (3)$$

где ρ , V – плотность и объем образца.

Из формул (1) – (3) следует уравнение нагрева образца:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sigma S}{c\rho V} \cdot 0,2(T_0^4 - T^4). \quad (4)$$

Зависимость концентрации водорода в образце от координат и времени получим, решая уравнение нестационарной диффузии:

$$\begin{aligned} \Delta C &= \frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t}; \\ C|_S &= 0, \\ C|_{t=0} &= C_0, \end{aligned} \quad (5)$$

где C – концентрация водорода в образце, D – коэффициент диффузии водорода в металле;

$$D = D_0 \exp(-u/kT)$$

(u – энергия активации водорода, D_0 – константа диффузии, k – постоянная Больцмана).

При заданных граничных условиях первый член ряда Фурье для концентрации водорода C , являющейся решением уравнения (5), имеет вид

$$\begin{aligned} C(x, y, z, t) &= \frac{C_0 \pi^3}{8} \sin \frac{\pi x}{a} \cdot \sin \frac{\pi y}{b} \times \\ &\times \sin \frac{\pi z}{l} \cdot f_1(t, u, D_0), \end{aligned} \quad (6)$$

где l , a , b – высота и поперечные размеры образца.

Функция $f_1(t, u, D_0)$ является решением уравнения

$$\begin{aligned} \dot{f}_1 + D_0 \exp\left(-\frac{u}{kT}\right) \left(\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{\pi^2}{b^2} + \frac{\pi^2}{l^2}\right) f_1 &= 0; \\ f_1(0, u, D_0) &= 1. \end{aligned} \quad (7)$$

При анализе содержания водорода прибор регистрирует временную зависимость полного потока водорода $q(t)$ через поверхность образца. Согласно закону Фика, он выражается следующей формулой:

$$q(t) = -\int_S D \frac{dC}{dn} dS. \quad (8)$$

(напомним, что S – площадь поверхности образца).

После интегрирования выражения (8), с использованием формулы (6) для концентрации водорода C , получим, что

$$\begin{aligned} q(t) &= \frac{16C_0}{\pi^2} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{l^2}\right) \times \\ &\times D_0 \exp\left(-\frac{u}{kT}\right) f_1(t, u, D_0). \end{aligned} \quad (9)$$

Если предположить, что водород в образце находится в ловушках с различными энергиями связи u_i , которым соответствуют константы диффузии D_{0i} и начальные значения концентрации водорода C_{0i} , то, вследствие линейности уравнения диффузии (5), можно воспользоваться принципом суперпозиции. Тогда временная зависимость полного потока водорода из образца $q(t)$ будет определяться суммой

$$\begin{aligned} q(t) &= \frac{16}{\pi^2} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{l^2}\right) \sum_i C_{0i} \times \\ &\times D_{0i} \exp\left(-\frac{u_i}{kT}\right) f_1(t, u_i, D_{0i}), \end{aligned} \quad (10)$$

где $f_1(t, u_i, D_{0i})$ – решения уравнения (7) при заданных значениях констант u_i , D_{0i} , C_{0i} и размерах образца (l , a , b).

Проведя сопоставление экспериментальной экстракционной кривой с расчетной кривой (10), при выбранных значениях начальных концентраций C_{0i} и констант диффузии u_i , D_{0i} получим величину энергии активации и константы диффузии для водорода, находящегося в металле. На рис. 3 приведены графики двух экстракционных кривых, одна из которых измерена экспе-

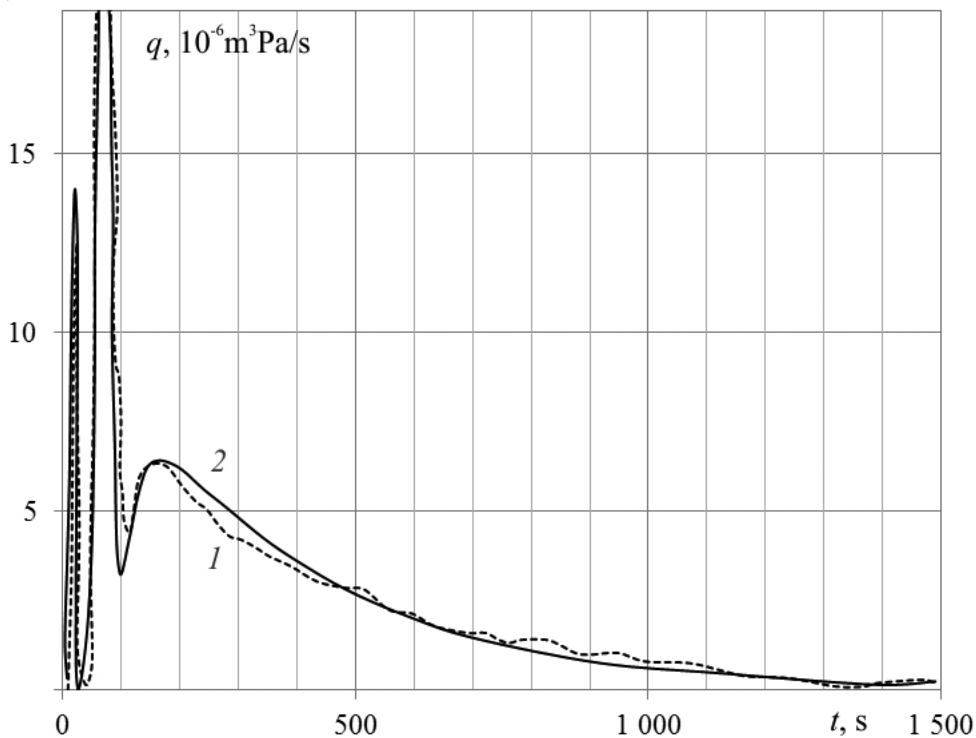


Рис. 3. Экспериментальная (1) и расчетная (2) экстракционные кривые с тремя характерными энергетическими максимумами для сплава титана ПТ7М

риментально, другая вычислена в результате моделирования с использованием формулы (10).

Таким образом, экстракционная кривая, измеренная с использованием метода вакуум-нагрева, реализованного в анализаторе водорода АВ-1, позволяет определить фундаментальные параметры, характеризующие состояние водорода в твердом теле: уровни энергии связи водорода u_i , количество водорода N_i в различных энергетических состояниях (заселенность энергетических уровней), постоянную диффузии D_{0i} для водорода с энергией связи u_i .

Верификация основных приближений метода определения энергий связи

Для экспериментальной проверки адекватности сделанных предположений были изготовлены образцы титанового сплава ПТ7М, имеющие форму параллелепипеда с размерами $2,0 \times 2,0 \times 2,5$ мм. Образцы были вырезаны из трубы внешним диаметром 28 мм.

Шесть образцов одинакового размера были загружены в экстракционную систему анализатора водорода АВ-1. Испытания каждого из образцов производились при определенной температуре экстракции, начиная с 530°C и кончая 800°C . Каждый раз аналитический отросток экстракционной системы прогревался до температуры экстракции без образца, затем образец сбрасывался в прогретый аналитический отросток, и измерялась экстракционная кривая. Каждый образец испытывали однократно. Это означало, что при низких температурах из образца экстрагировалась только часть содержащегося в нем водорода. Результаты опытов приведены на рис. 4, а.

Анализ графиков экстракционных кривых показывает, что диффузия водорода из титанового сплава имеет активационный характер. Водород, имеющий большую энергию связи, практически не экстрагируется вплоть до температуры экстракции 750°C и остается в образцах после проведения анализа.

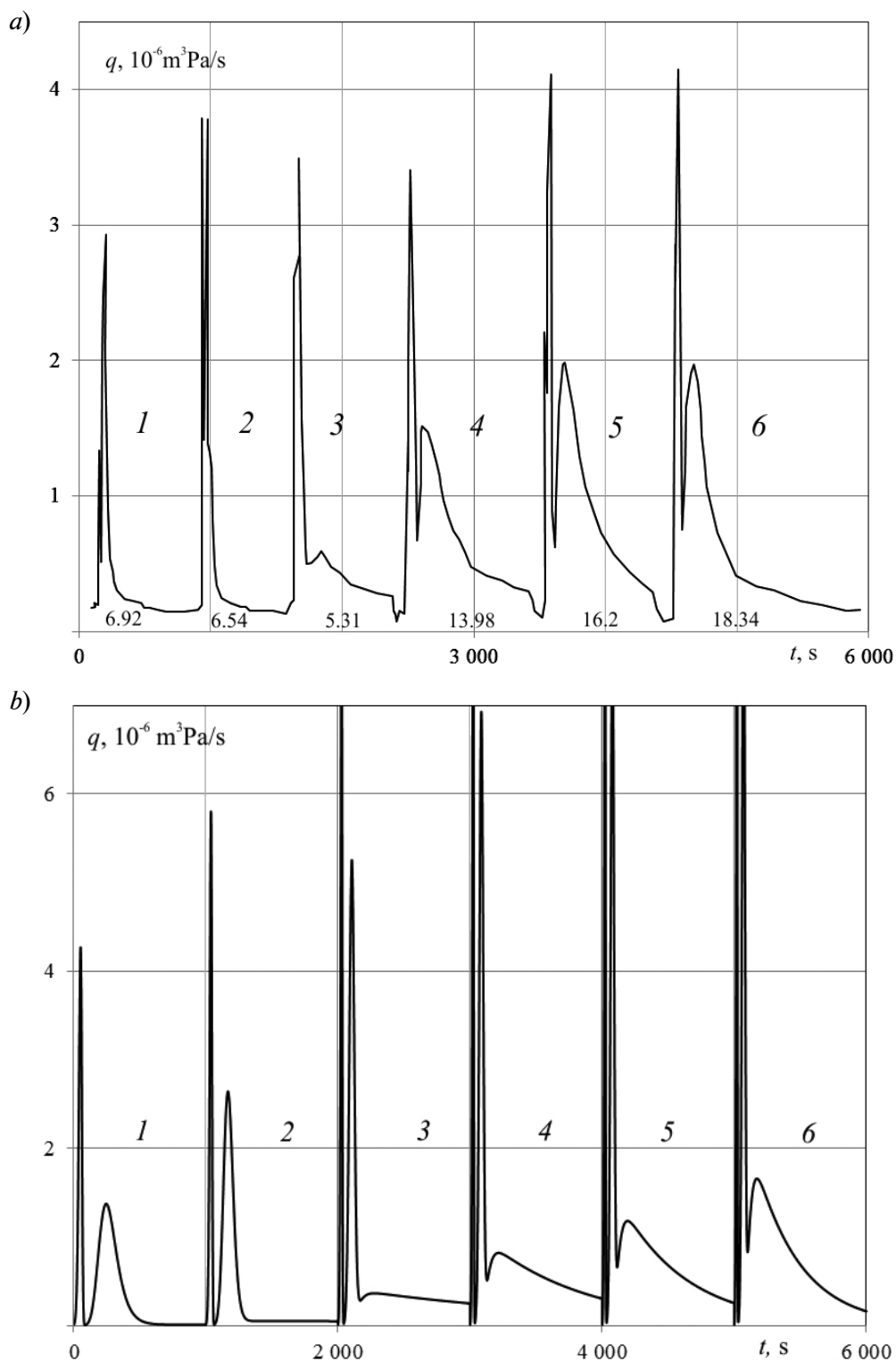


Рис. 4. Экспериментальные (а) и смоделированные (б) экстракционные кривые образцов сплава титана ПТ7М, полученные при различных температурах экстракции T_0 , °С: 530 (1), 600 (2), 700 (3), 750 (4), 775 (5), 800 (6).

Помимо временной оси, над осью абсцисс приведены измеренные значения содержания водорода в образцах. На рис. 4, б представлены значения полного потока водорода, вычисленные по формуле (10)

Если верны предположения о наличии состояний с различными энергиями связи водорода u_i и соответствующих им констант диффузии D_{0i} , то после определения этих параметров по одной из экстракционных кривых, мы сможем адекватно описать измеренные экстракционные кривые для других температур анализа.

Моделирование процесса высокотемпературной вакуум-экстракции было проведено шесть раз для различных температур экстракции, с вычислением потока экстрагированного водорода по формуле (10).

Результаты моделирования приведены на рис. 4, *b*. Все расчетные кривые экстракции при указанных температурах анализа построены на одном графике, аналогично экспериментальным кривым, представленным на рис. 4, *a*.

Полученные результаты моделирования показывают хорошее согласие с экспериментом. При моделировании использованы параметры диффузии, найденные при анализе экспериментальной экстракционной кривой, полученной при температуре анализа 800 °С (см. рис. 3, кривая 1). Без использования подгоночных параметров удалось осуществить экстраполяцию на более низкие температуры, при этом результат моделирования адекватен соответствующему эксперименту.

Таким образом, предложенная модель адекватна реальным физическим процессам, протекающим при реализации метода высокотемпературной вакуум-экстракции водорода из анализируемого образца твердой пробы.

В модели, описывающей процесс нагревания образца, учтена только теплопередача за счет излучения. К возможным источникам погрешности в определении энергии активации диффузии следует отнести отличную от нуля теплопроводность кварцевого стекла, а также недостаточно точное задание коэффициента поглощения теплового излучения.

Для проверки предложенной модели нагрева образца был поставлен следующий эксперимент.

Из одного и того же прутка сплава АМг6 были выточены два цилиндрических

образца диаметром $2r = 8$ мм и высотой $h = 15$ мм. Перед загрузкой в экстрактор на поверхность одного из образцов была нанесена сажа, полученная при неполном сгорании ацетиленового пламени. Прогрев образца был минимальным ввиду малого времени контакта образца с пламенем горелки, которое содержало сажу. Рабочая температура экстракционной системы составляла 530 °С. Зачерненный образец сбрасывался в аналитический отросток магнитным толкателем без нарушения вакуума.

Стенки экстрактора находятся при рабочей температуре анализа. Холодный образец (исходно имеет комнатную температуру) прогревается до температуры экстракции и затем выдерживается при этой температуре до завершения анализа.

Обычный образец имеет естественную для алюминиевого сплава малую поглощающую способность, тогда как образец, покрытый сажой, имеет поглощающую способность, практически равную единице.

Были измерены экстракционные кривые для зачерненного и обычного образцов (рис. 5). Установлено (и видно на рисунке), что покрытый сажой образец нагревался примерно в 20 раз быстрее. Если предположить, что диффузия водорода имеет активационный характер, то по экстракционным кривым можно судить о скорости прогрева образцов.

Первый пик водорода на экстракционной кривой (см. рис. 5) связан с десорбцией «поверхностного» водорода из образца. Положение максимума соответствует температуре образца 100 – 150 °С.

При моделировании динамики нагревания образцов было использовано уравнение (4). Для образца, покрытого сажой, коэффициент поглощения ε_r был принят равным 1.

На рис. 6 приведены результаты моделирования зависимости температуры образцов от времени. Кривая 1 соответствует образцу, покрытому сажой; кривая 3 получена для чистого полированного алюминия. Кривая 2 соответствует образцу алюминиевого сплава АМг6, приготовленному по ГОСТ 21132.1-98; коэффициент поглощения для этого образца соответствует экс-

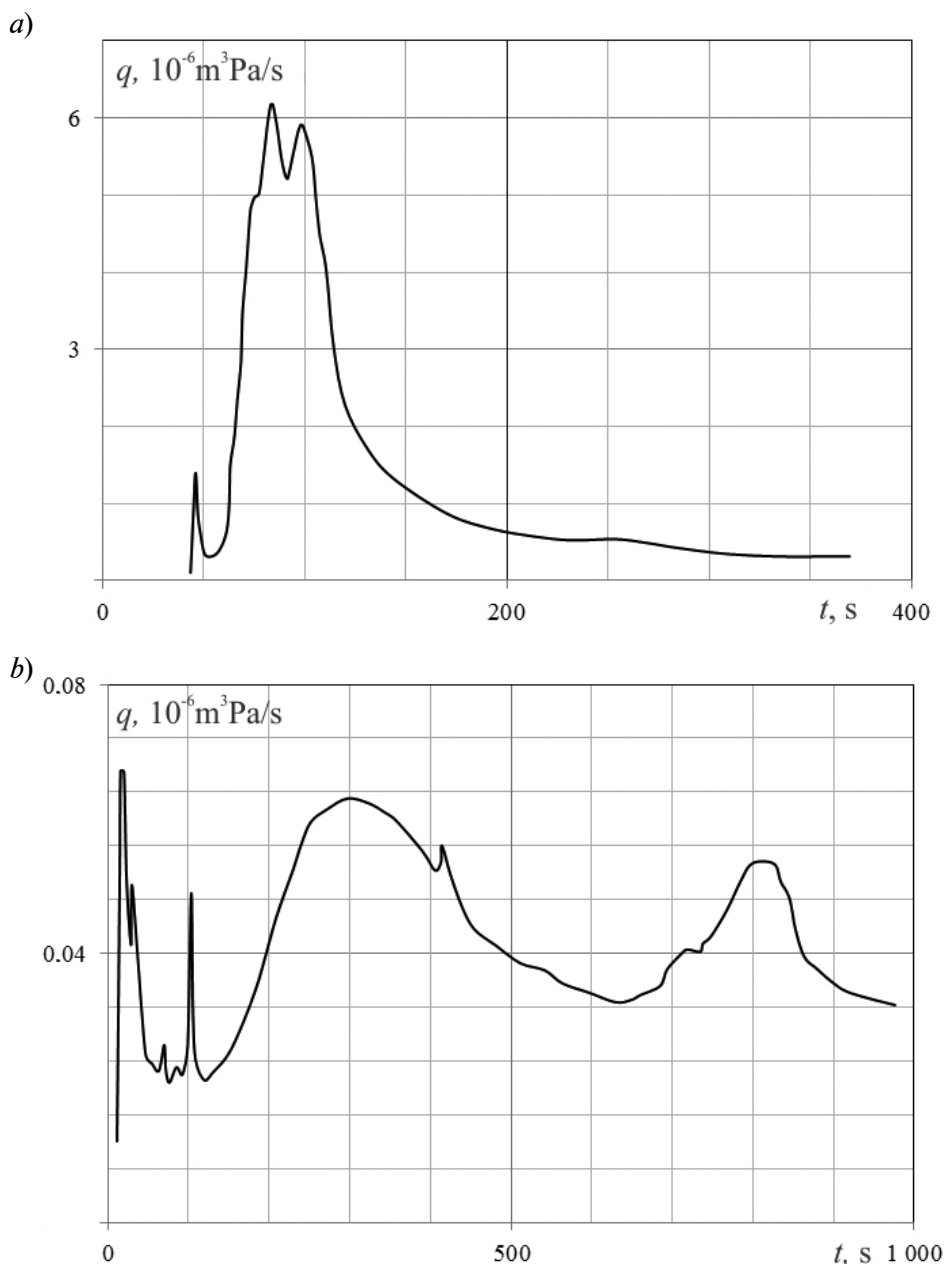


Рис. 5. Начальные участки экстракционных кривых, полученных для образцов алюминиевого сплава АМг6 одинаковой формы, но с разными поверхностями: покрытой слоем сажи (а) и без нее (б)

периментальной кривой 2 на рис. 6.

Анализ приведенных результатов моделирования динамики нагревания образцов позволяет сделать вывод о том, что реальный коэффициент поглощения для алюминиевых сплавов выше, чем соответствующие литературные данные для чистого полированного алюминия. Это связано, ве-

роятно, с наличием легирующих добавок и качеством обработки поверхности образца. Проведенные нами эксперименты показывают, что реальный коэффициент поглощения можно определять экспериментально для каждого типа сплава.

Описанная технология сравнительного анализа содержания водорода в образцах

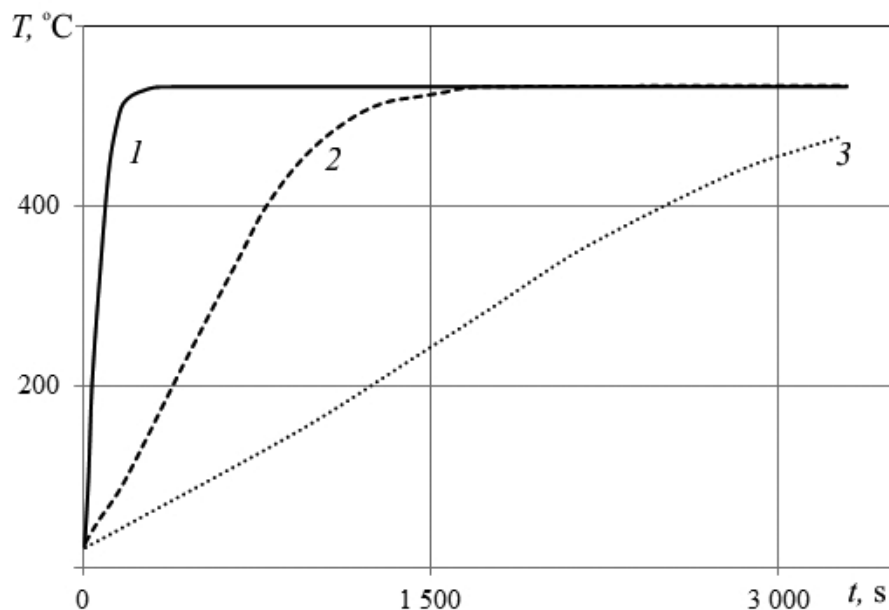


Рис. 6. Результаты моделирования динамики нагревания трех анализируемых образцов (с различными значениями коэффициента ε_i) от времени:

1 – $\varepsilon_i = 1$ (образец покрыт сажей); 2 – $\varepsilon_i = 2 \cdot 10^{-4} \cdot (T + 64,3)$ (образец приготовлен по ГОСТ 21132.1-98, поглощающая способность увеличена); 3 – $\varepsilon_i = 7 \cdot 10^{-5} \cdot (T + 64,3)$ (образец из чистого полированного алюминия)

с регулируемым коэффициентом поглощения позволяет более точно определить временную зависимость температуры образца в процессе анализа.

Другие методы определения температуры образцов в вакууме либо существенно искажают результаты анализа, либо имеют низкую точность. Изложим основные экспериментальные проблемы, возникающие при измерении температуры в вакууме.

Закрепление термопары на образце в вакууме делает эксперимент и экстракционную систему очень громоздкой. При температуре 500 – 600 °C необходимо изолировать проводники термопары специальными материалами, поскольку как сама изоляция, так и материал термопары могут содержать водород, а это приведет к существенному искажению результата анализа (особенно при определении малых концентраций водорода). Укрепить термопару можно только, если запрессовать ее в углублении или в отверстии образца; но это приводит к значительным пластическим деформациям материала, даже при массе образца порядка 2 – 5 г.

Укрепление термопары на специальной

опоре или в тигле может приводить к тому, что материал этих приспособлений будет существенно влиять на результаты анализа, искажая их. Применение же пирометров для определения температуры образца не обеспечивает необходимой точности в условиях значительных помех, создаваемых тепловым излучением радиационной печи. Кроме того, при температурах ниже 500 °C пирометрия имеет погрешность выше, чем ± 50 °C.

Таким образом, предложенная нами экспериментально-расчетная методика определения временной зависимости температуры образца при реализации метода высокотемпературной вакуум-экстракции водорода позволяет получать надежные данные о величине поглощающей способности поверхности образца и давать адекватные результаты при аппроксимации экстракционных кривых для определения энергии связи u_i и констант диффузии D_{0i} водорода в различных материалах.

Обсуждение результатов

При определении энергии связи традиционным методом термодесорбционных

спектров не используются предположения о параметрах образцов. Поэтому алгоритм определения энергий связи кажется независимым и объективным. Однако такая независимость не всегда подтверждается экспериментально. В работе [13] учтены форма и размеры образцов, что заметно изменяет измеренные значения энергии связи. Исследование [19] для сталей одного и того же типа показывает существенный разброс в значениях параметров диффузии и, кроме того, полученные значения энергии активации u_i и постоянной диффузии D_{0i} , как и в работе [13], сильно зависят от размеров исследуемых образцов.

Метод ТДС базируется на гипотезе ловушек, согласно которой существует один канал диффузии водорода в твердом теле и имеются ловушки, равномерно распределенные в образце. В ловушках накапливается водород. При этом физические соображения о том, что диффузия – всего лишь модель процесса статистически равновесного изменения состояния атомов и молекул не принимаются во внимание. Уравнения для диффузии водорода и для изменения содержания водорода в ловушках различны. Рассмотрим противоречия, которые проявляются при таком подходе для образцов малой толщины.

Будем считать, что водород находится в ловушках нескольких типов (с разными энергиями связи или активации). После освобождения из ловушек водород переходит в диффузно-подвижное состояние с энергией связи u_0 . В этом состоянии возможна диффузия водорода в тонком слое толщиной d в направлении оси OX .

Уравнение освобождения водорода из ловушек с энергией связи u_{0i} описывается стандартным кинетическим уравнением

$$\begin{aligned} \frac{dw_i}{dt} &= -D_i w_i, \\ w_i(0) &= w_{i0}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $w_i(t)$ – концентрация водорода в ловушке, приведенная к массе слоя; D_i – коэффициент скорости освобождения ловушки,

$$D_i = D_{0i} e^{-\frac{u_{0i}}{kT(t)}}$$

(D_{0i} – константа скорости освобождения ловушки, аналогичная константе диффузии; $T(t)$ – температура слоя, зависящая от времени).

Будем считать, что ловушки распределены неравномерно по объему слоя, а именно

$$w_i(t, x) = w_i(t) \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right).$$

Из уравнения (11) следует, что

$$w_i(t) = w_{i0} \exp\left(-\int_0^t D_i(\theta) d\theta\right).$$

Уравнение диффузии

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= D \frac{d^2 w}{dx^2} - \sum_i \frac{dw_i}{dt}; \\ w(t, 0) &= w(t, d) = 0, \\ w(0, x) &= w_0 \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $D = D_0 \exp(-u_0/kT(t))$ – коэффициент диффузии; w – массовая концентрация водорода в слое; источниковые члены описывают поток водорода из ловушек внутри слоя.

Используем выражение (11); тогда уравнение диффузии можно переписать следующим образом:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = D \frac{d^2 w}{dx^2} + \sum_i D_i w_i. \quad (13)$$

Подстановка выражения $\tau = \int D(t) dt$ в уравнение (13) дает следующий вид уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial \tau} &= \frac{d^2 w}{dx^2} + \sum_i \frac{D_i}{D} w_i, \\ w(\tau, 0) &= w(\tau, d) = 0, \\ w(0, x) &= w_0 \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right). \end{aligned} \quad (14)$$

Общее решение однородной задачи имеет вид

$$w(\tau, x) = w_0 \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2}{d^2} \tau\right). \quad (15)$$

Решение неоднородной задачи следует выражению

$$w(t, x) = \left\{ w_0 \left(\exp\left(-\frac{\pi^2}{d^2} \tau(t)\right) + \right. \right. \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_0^{\tau(t)} \exp\left(-\frac{\pi^2(\tau(t) - \theta)}{d^2}\right) \times \\
 & \times \sum_j \frac{D_j(\theta)}{D(\theta)} w_j(\theta) d\theta \left\} \sin\left(\frac{\pi x}{d}\right). \quad (16)
 \end{aligned}$$

Первое интересное следствие из полученных решений заключается в том, что в свертке решения (16) участвуют отношения

$$\frac{D_j(\theta)}{D(\theta)} = \frac{D_{0j}}{D_0} \exp\left(-\frac{u_j - u_0}{kT(\theta)}\right).$$

Следовательно, можно рассматривать водород, готовый к диффузии, как молекулы, находящиеся в ловушке с энергией связи u_0 , а освобождение водорода из ловушек — как переход с уровня энергии u_j на уровень энергии u_0 ; такой переход происходит с потерей энергии, равной $u_j - u_0$.

Перепишем временной множитель в равенстве (16) с учетом временной подстановки и решений для массовой концентрации w_j :

$$\begin{aligned}
 w_i(t) = & w_0 \exp\left[-\frac{\pi^2}{d^2} \int_0^t D(\theta) d\theta\right] + \\
 & + \int_0^{\int_0^t D(\theta) d\theta} \exp\left[-\frac{\pi^2\left(\int_0^t D(\theta) d\theta - \theta\right)}{d^2}\right] \times \quad (17) \\
 & \times \sum_j \left[\frac{D_j(\theta)}{D(\theta)} w_{j0} \exp\left(-\int_0^\theta D_i(\sigma) d\sigma\right) \right] d\theta.
 \end{aligned}$$

Рассмотрим случай очень тонкого слоя: $d \ll 1$. Тогда выражение (17) можно приближенно записать как

$$\begin{aligned}
 w_i(t) \approx & w_0 \exp\left[-\frac{\pi^2}{d^2} \int_0^t D(\theta) d\theta\right] + \\
 & + \frac{d^2}{\pi^2} \sum_j \left[\frac{D_j\left(\int_0^t D(\theta) d\theta\right)}{D\left(\int_0^t D(\theta) d\theta\right)} w_{j0} \times \quad (18) \right. \\
 & \left. \times \exp\left(-\int_0^{\int_0^t D(\theta) d\theta} D_i(\sigma) d\sigma\right) \right].
 \end{aligned}$$

Существует принципиальная разница между экспонентами первого и второго слагаемых, так как в случае диффузии показатель экспоненты умножается на масштабный фактор π^2/d^2 , а в случае опустошения ловушек — нет. Следовательно, поступление водорода из ловушек практически не зависит от толщины слоя, что противоречит экспериментальным данным.

В опытах с пленками толщиной 7 — 10 мкм длительность пиков водорода на кривой экстракции составляет десятки секунд.

Попытки моделирования потоков «естественного» водорода из образцов толщиной 10 мкм с использованием модели «одноканальной» диффузии приводят к тому, что энергия активации самого канала диффузии имеет разумные значения 0,2 — 0,4 эВ, а энергии связи в ловушках составляют дополнительно сотые доли электронвольт. Следовательно, энергии теплового движения при комнатной температуре достаточно для эффективного опорожнения ловушек. Многоканальная модель, напротив, дает разницу в 0,4 — 1,0 эВ между энергиями активации различных каналов диффузии.

Таким образом, экспериментальные данные, физические соображения и основанное на них математическое моделирование свидетельствуют о том, что модель многоканальной диффузии водорода более точно описывает экспериментальные результаты.

Имеется еще один источник ошибок метода ТДС. Он заключается в наличии фоновых потоков водорода из экстракционной системы, которые зависят от температуры образца. При прогреве образца возрастает температура окружающих его частей экстракционной системы. В некоторых случаях величина фонового потока водорода возрастает в процессе измерения ТДС в сотни раз [15]. Предварительное насыщение образцов водородом, которое широко применяется в методе ТДС, позволяет уменьшить влияние возрастающих фоновых потоков. Для того, чтобы оценить их влияние при измерениях естественных концентраций водорода, был проведен эксперимент по ступенчатому изменению температуры экстракционной си-

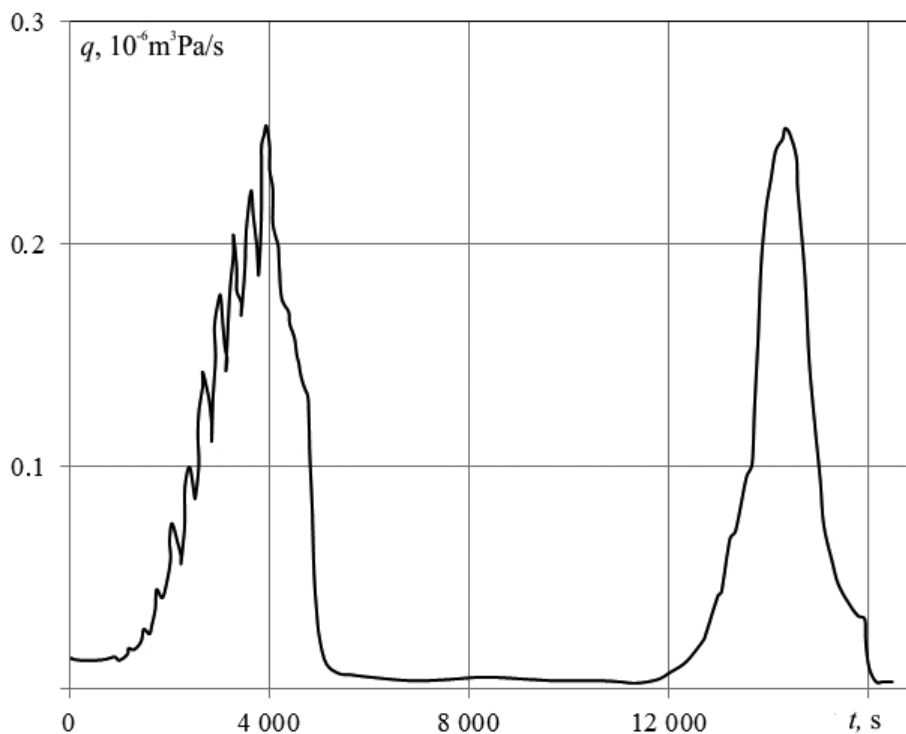


Рис. 7. Экстракционная кривая образца алюминиевого сплава массой 2 г с концентрацией водорода 0,1 ppm (справа) и фоновые потоки (слева), которые возникают при ступенчатом прогреве экстракционной системы до 700 °С

стемы анализатора водорода АВ-1. На рис. 7 представлены экстракционная кривая образца алюминиевого сплава массой 2 г и концентрацией водорода 0,1 ppm, а также фоновые потоки, которые возникают при ступенчатом прогреве экстракционной системы до 700 °С. Поток водорода со стенок экстракционной системы превышает значение потока водорода из исследуемого образца.

Выводы

Проведенное исследование показывает, что модель многоканальной диффузии точнее других подходов описывает реальный процесс диффузии водорода в твердом теле при использовании метода высокотемпературной вакуумной экстракции водорода при нагревании анализируемого образца.

Применение указанного метода с масс-спектрометрическим измерением мгновенного значения потока водорода позволяет измерять малые естественные концентрации водорода и распределение этих концен-

траций по энергиям активации. Высокая чувствительность анализа при использовании промышленного анализатора водорода АВ-1 дает возможность проследить превращения естественного водорода в образце при различных термомеханических и физико-химических воздействиях.

Отпадает необходимость в опытах по предварительному насыщению образцов водородом. При таком подходе мы получаем новую систему, свойства которой отличаются от исходного материала. Наши исследования [20] показали, что увеличение концентрации водорода в 2 – 3 раза приводит к разрушению материала. Отливки алюминиевых сплавов разрушаются в процессе кристаллизации, если содержание водорода в них превышено вдвое. В работе [21] показано, что насыщение материала водородом приводит к снижению предела прочности в 3 – 5 раз.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №15-19-00091).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Gorsky W.S.** Theorie der ordnungsprozesse und der Diffusion in Mischkristallen von CuAu // Sow. Phys. 1935. Bd. 8. Pp. 433–456.
- [2] **Gorsky W.S.** Theorie des elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art) // Phys. Zeitschrift der Sowjetunion. 1935. Bd. 8. Pp. 457–471.
- [3] **Hirth J.P.** Effects of hydrogen on the properties of iron and steel // Metallurgical Transactions. A. 1980. Vol. 11A. Iss. 6. Pp. 861–890.
- [4] **Wang M., Akiyama E., Tsuzaki K.** Determination of the critical hydrogen concentration for delayed fracture of high strength steel by constant load test and numerical calculation // Corrosion Science. 2006. Vol. 48. No. 8. Pp. 2189–2202.
- [5] **Kimura Y., Sakai Y., Hara T., et al.** Hydrogen induced delayed fracture of ultrafine grained 0.6% O steel with dispersed oxide particles // Scripta Mater. 2003. Vol. 49. No. 11. Pp. 1111–1116.
- [6] **Gyu Tae Park, Sung Ung Koh, Hwan Gyo Jung, Kyoo Young Kim.** Effect of microstructure on the hydrogen trapping efficiency and hydrogen induced cracking of linepipe steel // Corrosion Science. 2008. Vol. 50. No. 7. Pp. 1865–1871.
- [7] **Mohtadi-Bonab M.A., Szpunar J.A., Razavi-Tousi S.S.** A comparative study of hydrogen induced cracking behavior in API 5L X60 and X70 pipeline steels // Engineering Failure Analysis. 2013. Vol. 33. Pp. 163–175.
- [8] **Dmytrakh I.M., Smiyan O.D., Syrotyuk A.M., Bilyy O.L.** Relationship between fatigue crack growth behaviour and local hydrogen concentration near crack tip in pipeline steel // International Journal of Fatigue. 2013 (May). Vol. 50. Pp. 26–32.
- [9] ISO 2560:2009 Welding consumables. Covered electrodes for manual metal arc welding of non-alloy and fine grain steels. Classification.
- [10] ASTM E2792-13 Standard Test Method for Determination of Hydrogen in Aluminum and Aluminum Alloys by Inert Gas Fusion.
- [11] ASTM E1447-09 Standard Test Method for Determination of Hydrogen in Titanium and Titanium Alloys by Inert Gas Fusion Thermal Conductivity/Infrared Detection Method.
- [12] **Kissinger H.E.** Reaction kinetics in differential thermal analysis // Analytical Chemistry. 1957. Vol. 29. No. 11. Pp. 1702–1706.
- [13] **Padhy G.K., Ramasubbu V., Murugesan N., et al.** Determination of apparent diffusivity of hydrogen in 9Cr-1MoVNbN steel using hot extraction-PEMHS technique // International Journal of Hydrogen Energy. 2013. Vol. 38. No. 25. Pp. 10683–10693.
- [14] **Song E. J., Suh D.-W., Bhadeshia H.** Theory for hydrogen desorption in ferritic steel // Computational Materials Science. 2013 (December). Vol. 79. Pp. 36–44.
- [15] **Nikel N., Brendei K., Saleh R.** Laser crystallization of hydrogenated amorphous silicon // Phys. Stat. Sol. 2004. Vol. 1. No. 5. Pp. 1154–1268.
- [16] **Petushkov E.E., Tserfas A.A., Makumov T.M.** Determination of hydrogen in molybdenum by a diffusion-manometric method // Secondary Emission and Structural Properties of Solids. 1971. Pp. 107–109.
- [17] **Konar J., Banerjee N.G.** Vacuum heating hydrogen determination in aluminium and aluminium alloys // NML Technical Journal. 1974. Vol. 16. No. 1-2. Pp. 18–19.
- [18] **Sayi Y.S., Ramakumar K.L., Prasad R., et al.** Determination of H₂ and D₂ content in metals and alloys using hot vacuum extraction // Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. 1998. Vol. 230. No. 1-2. Pp. 5–9.
- [19] **Asahi H., Hirakami D., Yamasaki S.** Hydrogen trapping behavior in vanadium-added steel // ISIJ International. 2003. Vol. 43. No. 4. Pp. 527–533.
- [20] **Полянский А.М., Полянский В.А., Яковлев Ю.А.** Исследование процессов усталости и разрушения металлических материалов с привлечением метода определения энергии связи водорода в твердом теле // Деформация и разрушение материалов. 2009. № 3. С. 39–43.
- [21] **Nie Y., Kimura Y., Inoue T., et al.** Hydrogen embrittlement of a 1500-MPa tensile strength level steel with an ultrafine elongated grain // Metallurgical and Materials Trans. A. 2012. Vol. 43. No. 5. Pp. 1670–1687.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУДИНОВА Наталья Романовна – аспирантка Института проблем машиноведения РАН. 199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., 61. natalii@sibmail.com

ПОЛЯНСКИЙ Владимир Анатольевич – доктор технических наук, профессор кафедры систем и технологий управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vapol@mail.ru

ПОЛЯНСКИЙ Анатолий Митрофанович – кандидат физико-математических наук, директор Научно-производственного комплекса «Электронные и пучковые технологии».

198188, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ст. Броневая 6
ampol@electronbeamtech.com

ЯКОВЛЕВ Юрий Алексеевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН.

199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., 61.
yura.yakovlev@gmail.com

Kudinova N.R., Polyanskiy V.A., Polyanskiy A.M., Yakovlev Yu.A. DETERMINING THE BOUND ENERGIES OF DISSOLVED HYDROGEN ON A BASIS OF THE MULTICHANNEL DIFFUSION MODEL IN A SOLID.

The hypothesis for a multichannel character of the hydrogen diffusion in solids has been substantiated in the article. Based on this hypothesis, a mathematical model of hydrogen diffusion in the crystalline lattice was constructed. The model provided determining the dissolved hydrogen binding energies using an extraction curve. The curve was measured by industrial vacuum-extraction procedure with mass-spectrometric detection of hydrogen streams. The article presents various experimental data that support the validity of the multichannel model and discusses the advantages and disadvantages of the proposed approach in comparison with the well-known method of thermal desorption spectra (TDS) that is recognized as the classical way of experimental determination of the dissolved hydrogen binding energy in solids.

HYDROGEN BINDING ENERGY, HYDROGEN DIFFUSION, TDS, HYDROGEN ANALYZER, VACUUM HOT EXTRACTION, STANDARD.

REFERENCES

- [1] **W.S. Gorsky**, Theorie der ordnungsprozesse und der diffusion in mischkristallen von CuAu, Phys. Zeitschrift der Sowjetunion. (8)(1935) 453–456.
- [2] **W.S. Gorsky**, Theorie des elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art), Phys. Zeitschrift der Sowjetunion. (8)(1935) 457–471.
- [3] **J.P. Hirth**, Effects of hydrogen on the properties of iron and steel, Metallurgical Transactions, A. 11(6) (1980) 861–890.
- [4] **M. Wang, E. Akiyama, K. Tsuzaki**, Determination of the critical hydrogen concentration for delayed fracture of high strength steel by constant load test and numerical calculation, Corrosion Science. 48(8) (2006) 2189–2202.
- [5] **Y. Kimura, Y. Sakai, T. Hara, et al.**, Hydrogen induced delayed fracture of ultrafine grained 0.6 % O steel with dispersed oxide particles, Scripta Mater. 49(11) (2003) 1111–1116.
- [6] **G.T. Park, S.U. Koh, H.G. Jung, K.Y. Kim**, Effect of microstructure on the hydrogen trapping efficiency and hydrogen induced cracking of linepipe steel, Corrosion Science. 50(7) (2008) 1865–1871.
- [7] **M.A. Mohtadi-Bonab, J.A. Szpunar, S.S. Razavi-Tousi**, A comparative study of hydrogen induced cracking behavior in API 5L X60 and X70 pipeline steels, Engineering Failure Analysis. 33 (2013) 163–175.
- [8] **I.M. Dmytrakh, O.D. Smiyan, A.M. Syrotyuk, O.L. Bilyu**, Relationship between fatigue crack growth behaviour and local hydrogen concentration near crack tip in pipeline steel, International Journal of Fatigue. 50 (2013) 26–32.
- [9] ISO 2560:2009 Welding consumables. Covered electrodes for manual metal arc welding of non-alloy and fine grain steels. Classification.
- [10] ASTM E2792-13 Standard Test Method for Determination of Hydrogen in Aluminum and Aluminum Alloys by Inert Gas Fusion.
- [11] ASTM E1447-09 Standard Test Method for Determination of Hydrogen in Titanium and Titanium Alloys by Inert Gas Fusion Thermal Conductivity/Infrared Detection Method.
- [12] **H.E. Kissinger**, Reaction kinetics in differential thermal analysis, Analytical Chemistry. 29(11) (1957) 1702–1706.



- [13] **G.K. Padhy, V. Ramasubbu, N. Murugesan, et al.**, Determination of apparent diffusivity of hydrogen in 9Cr-1MoVNbN steel using hot extraction-PEMHS technique // International Journal of Hydrogen Energy. 38(25) (2013) 10683–10693.
- [14] **E.J. Song, D.-W. Suh, H. Bhadeshia**, Theory for hydrogen desorption in ferritic steel, Computational Materials Science. 79 (2013) 36–44.
- [15] **N. Nikel, K. Brendei, R. Saleh**, Laser crystallization of hydrogenated amorphous silicon, Phys. Stat. Sol. 1(5) (2004) 1154–1268.
- [16] **E.E. Petushkov, A.A. Tserfas, T.M. Maksumov**, Determination of hydrogen in molybdenum by a diffusion-manometric method, Secondary Emission and Structural Properties of Solids. (1971) 107–109.
- [17] **J. Konar, N.G. Banerjee**, Vacuum heating hydrogen determination in aluminium and aluminium alloys, NML Technical Journal. 16(1-2) (1974) 18–19.
- [18] **Y.S. Sayi, K.L. Ramakumar, R. Prasad, et al.**, Determination of H₂ and D₂ content in metals and alloys using hot vacuum extraction, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. 230(1-2) (1998) 5–9.
- [19] **H. Asahi, D. Hirakami, Sh. Yamasaki**, Hydrogen trapping behavior in vanadium-added steel, ISIJ International. 43(4) (2003) 527–533.
- [20] **A.M. Polyanskiy, V.A. Polyanskiy, Yu.A. Yakovlev**, Issledovaniye protsessov ustalosti i razrusheniya metallicheskih materialov s privilecheniyem metoda opredeleniya energii svyazi vodoroda v tverdom tele [Investigation of metal fatigue and destruction by method of determination of hydrogen binding energy in solid.], Deformatsiya i razrusheniye materialov. No. 3 (2009) 39–43.
- [21] **Y. Nie, Y. Kimura, T. Inoue, et al.**, Hydrogen embrittlement of a 1500-MPa tensile strength level steel with an ultrafine elongated grain structure, Metallurgical and Materials Transactions. A43 (5) (2012) 1670–1687.

THE AUTHORS

KUDINOVA Natalia R.

Institute of Problems of Mechanical Engineering RAS
61 Bolshoi Pr. V.O., St. Petersburg, 199178, Russian Federation
natalii@sibmail.com

POLYANSKIY Vladimir A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vapol@mail.ru

POLYANSKIY Anatoliy M.

Research & Development Company Electronic & Beam Technologies
6 Bronevaya, St.-Petersburg, 198188, Russian Federation
ampol@electronbeamtech.com

YAKOVLEV Yuriy A.

Institute of Problems of Mechanical Engineering RAS
61 Bolshoi Pr. V.O., St. Petersburg, 199178, Russian Federation
yura.yakovlev@gmail.com



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

DOI: 10.5862/JPM.230.2

УДК 536.25

*А.Г. Абрамов¹, А.М. Левченя¹,
Е.М. Смирнов¹, П.Е. Смирнов²*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Российская Федерация;

² Компания ANSYS Germany GmbH, г. Дармштадт,
Федеративная Республика Германия

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕПЛООБМЕНА В КОРИДОРНОМ ПУЧКЕ ТРУБ, ПОПЕРЕЧНО ОБТЕКАЕМОМ ЖИДКИМ МЕТАЛЛОМ

Представлены результаты численного моделирования турбулентного теплообмена в поперечно обтекаемых жидким металлом коридорных пучках гладких круглых труб. Расчеты выполнены с использованием CFD-пакета ANSYS Fluent в двумерной нестационарной постановке методом URANS с применением SST-модели турбулентности Ментера и в предположении постоянства физических свойств среды, с числом Прандтля, равным 0,023. Число Рейнольдса изменялось в диапазоне от 26200 до 52400. Проведен анализ мгновенных и осредненных во времени полей скорости и температуры, полученных для пучков различной плотности, при варьировании ширины пучка (числа трубных рядов в поперечном направлении). Интегральные характеристики теплоотдачи сравниваются с экспериментальными данными.

ТРУБНЫЙ ПУЧОК, ЖИДКИЙ МЕТАЛЛ, ТУРБУЛЕНТНОСТЬ, ТЕПЛООБМЕН, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, URANS.

Введение

Углубленные и достоверные знания об особенностях турбулентных течений и процессов теплообмена в жидких металлах важны для решения многих актуальных проблем в области ядерной энергетики, среди которых особое место занимают задачи, возникающие на этапе проектирования реакторных блоков на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем. Геометрические конфигурации реакторов содержат конструкционные компоненты цилиндрической формы (трубчатые теплообменники, насосы, элементы системы управления и др.), частично или полностью погруженные в объем циркулирующего жидкого металла.

Задача о течении и теплообмене в поперечно обтекаемых пучках труб входит в число важных для практики «канонических» постановок [1, 2] по проблеме термодинамики жидкометаллических теплоносителей. Интенсивные экспериментальные исследования данной задачи велись в 1950 – 1960-е гг. в лабораториях Центрального котлотурбинного института им. И.И. Ползунова (ЦКТИ) [1, 3] и Физико-энергетического института им. А.И. Лейпунского (ФЭИ) [2, 4]. Изучались интенсивности локальной и средней теплоотдачи при поперечном обтекании коридорных и шахматных пучков труб различной конфигурации, а также при обтекании одиночных цилиндров тяжелыми и щелочными



жидкими металлами в широком диапазоне изменения числа Пекле. Отрабатывались методики измерений, исследовалось влияние на процессы теплообмена различных факторов, в частности режимных параметров, количества рядов труб в поперечном направлении, конфигурации пучков и пр.

В последнее десятилетие интерес к исследованиям в этом направлении возобновился, и прежде всего, в связи с масштабными задачами по созданию атомных электростанций с реакторами нового поколения на быстрых нейтронах, обеспечивающих возможность реализации замкнутого ядерного топливного цикла и обладающих высоким уровнем безопасности. Результаты исследований по проблеме термогидродинамики тяжелых металлов (расплавов свинца и эвтектики свинец-висмут) в поперечно обтекаемых пучках труб, которые были недавно выполнены в ФЭИ, частично отражены в работах [5, 6].

Экспериментальный подход к изучению структуры течения и теплового состояния расплавов жидких металлов сопряжен с большими затратами и преодолением ряда объективных трудностей. В современных условиях численное моделирование на основе нестационарных уравнений движения и теплопереноса рассматривается как наиболее перспективное направление исследований по расширению базы знаний, необходимых для разработки новых проектов. Расчетные методики, которые сегодня используются, можно разделить на «инженерные» (относительно экономичные), базирующиеся на осредненных по Рейнольдсу уравнениях Навье – Стокса (RANS, URANS), и вихре-разрешающие (DNS, LES, DES); последние обладают высокой точностью, но при этом крайне требовательны к вычислительным ресурсам. Примером приложения метода прямого численного моделирования к родственной проблеме являются расчеты турбулентного обтекания одиночного кругового цилиндра жидким натрием при существенном влиянии эффектов плавучести [7].

Отраженный в литературе опыт численного моделирования течения и теплообмена в поперечно обтекаемых пучках

труб накоплен в основном для сред с числом Прандтля порядка единицы. В ранних расчетах использовалось предположение о периодичности поля течения в продольном и поперечном направлениях, отвечающее модели безграничного пучка [8, 9]. Однако при постановке лабораторных экспериментов исследователи стремятся использовать пучки с минимально возможным числом труб, особенно при проведении дорогостоящих опытов с течениями жидких металлов. Соответственно, возникает вопрос о влиянии краевых эффектов на структуру потока и характеристики теплоотдачи. При проведении численного моделирования, результаты которого сопоставляются с опытными данными, неопределенности такого рода желательно исключать (или существенно уменьшать). Это можно сделать, отказавшись от предположения о периодичности течения, т. е. использовать расчетную область, которая охватывает всю совокупность труб, образующих пучок в экспериментальном прототипе (см., например, работы [10, 11]).

В настоящей работе представляются результаты двумерных параметрических расчетов турбулентного течения и теплообмена в поперечно обтекаемых жидким металлом коридорных пучках гладких круглых труб. Расчеты выполнены на основе нестационарных уравнений Рейнольдса (метод URANS) с применением программного пакета вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent. Исследуется влияние на структуру расчетных полей скорости и температуры и на характеристики теплоотдачи различных факторов: режимного числа Пекле (в диапазоне 600 – 1200), плотности упаковки пучка и его ширины, размерности расчетной сетки. На основе сопоставления с известными экспериментальными данными для чистых щелочных металлов оцениваются возможности метода URANS по предсказанию средней теплоотдачи для рассматриваемых условий.

Постановка задачи и вычислительные аспекты

В двумерном приближении рассматривается нестационарное турбулентное тече-

ние жидкости при малом числе Прандтля ($Pr = 0,023$) применительно к задаче поперечного обтекания коридорных пучков, состоящих из круглых труб. Используется модель несжимаемой ньютоновской жидкости с постоянными физическими свойствами, без учета эффектов плавучести. Численное моделирование основывается на решении нестационарных, осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса (URANS) в совокупности с уравнением энергии. Для замыкания системы уравнений Рейнольдса привлекается SST-модель турбулентности [12].

Расчеты выполнены для экспериментальных условий работы [3], где объектом исследования являлись коридорные пучки труб с различными расстояниями (шагами) между ними, поперечно обтекаемые расплавами жидких щелочных металлов. Рабочий участок экспериментальной установки представлял собой прямоугольный короб, снабженный входным диффузором и выходным конфузуром. Центральные трубы первого и шестого рядов пучка обогревались в экспериментах работы [3] поочередно, путем пропускания через них электрического тока. Остальные трубы не подвергались обогреву и служили лишь для создания гидродинамического подобия.

При проведении настоящих расчетов рассматривался только случай обогрева труб шестого ряда. Численное моделирование проводилось для двух трубных пучков: тесного, с шагом по фронту $S_1 = 1,23d$ и

по глубине $S_2 = 1,18d$;

широкого, с одинаковыми шагами по фронту и глубине $S_1 = S_2 = 1,69d$. Здесь и далее диаметр трубок d используется в качестве масштаба длины.

В качестве масштаба скорости принимается скорость V^* в минимальном сечении поперек хода потока, определяемая соотношением:

$$V^* = \frac{V_{in}}{(1 - d / S_1)}, \quad (1)$$

где V_{in} – скорость на входе в расчетную область.

Расчетные области содержали некоторое число рядов труб в направлении, поперечном по отношению к потоку, и два ряда «вытеснителей», выполненных из половинок труб и расположенных на боковых границах (как и в экспериментах работы [3]).

В расчетах для тесного пучка задавалось разное количество рядов труб в поперечном направлении: один, три или пять. Расчеты для широкого пучка выполнялись для одной конфигурации, содержащей три полных ряда труб. По глубине обоих пучков были помещены 10 рядов труб. Принятые при моделировании значения геометрических параметров сведены в табл. 1.

На рис. 1 в качестве примера показана расчетная область для тесного пучка с одним полным рядом труб. На входе в расчетную область задавались постоянные значения нормированной скорости: $V_{in} = 0,185$ для

Таблица 1

Значения параметров, принятых при моделировании

Параметр	Значение параметра	
	Тесный пучок	Широкий пучок
Шаг по фронту по глубине	$S_1 = 1,23d$ $S_2 = 1,18d$	$S_1 = S_2 = 1,69d$
Количество рядов труб в поперечном направлении	1, 3, 5	3 полных
Количество рядов труб по глубине	10	10

Обозначение: d – масштаб длины.

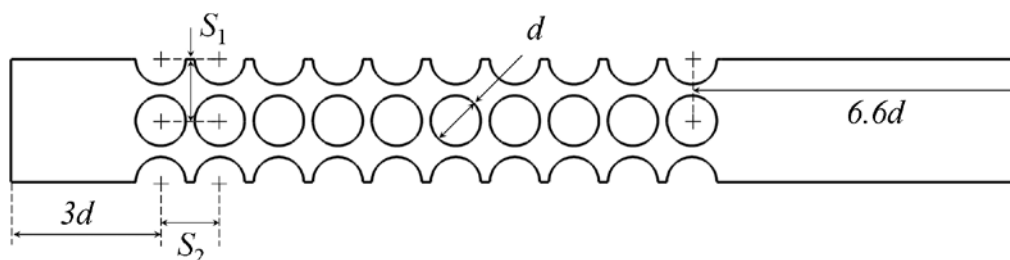


Рис. 1. Расчетная область для тесного пучка с одним полным рядом труб; S_1 , S_2 – шаги по фронту и по глубине, соответственно; d – масштаб длины

тесного пучка и 0,408 для широкого; приведенная температура на входе полагалась равной нулю, $T_m = 0$. На выходной границе полагалось равным нулю приведенное давление. На стенках труб ставились условия прилипания. Стенки труб считались адиабатическими, за исключением труб шестого ряда, на которых задавался постоянный тепловой поток. Стенки с полукруглыми вытеснителями, ограничивающие поток в поперечном направлении, рассматривались как адиабатические, на них также задавалось условие прилипания.

Для каждой конкретной геометрии основные серии расчетов были выполнены для следующего набора значений числа Пекле, $Pe = V^*d/a$: 600, 800, 1000 и 1200 (a – коэффициент температуропроводности). Значения числа Рейнольдса при этом изменялись в пределах от 26200 до 52400.

Неструктурированные расчетные сетки включали, в зависимости от конфигурации пучка, от 160 до 500 тыс. узлов. Дополнительная серия расчетов проводилась для тесного пучка с тремя рядами труб поперек потока на огрубленной расчетной сетке, по сравнению с базовой (общая размерность сетки была уменьшена примерно в 3 раза). Сгущение сеток к цилиндрическим стенкам обеспечивало во всех рассчитанных вариантах значение нормированного размера пристенной ячейки y^+ , не превышающее единицу.

Расчеты проводились с помощью CFD-пакета ANSYS Fluent 14.0. Турбулентное число Прандтля задавалось равным 0,85. Входные значения характеристик турбулентности рассчитывались, исходя из задания интенсивности турбулентности в 5 % и

отношения турбулентной вязкости к молекулярной, равного 10.

Результаты расчетов и обсуждение

Переходя к представлению и обсуждению результатов, следует, прежде всего, отметить, что в расчетах для тесного пучка с одним рядом труб при всех рассмотренных значениях числа Пекле, а также при его наименьшем значении ($Pe = 600$) для вариантов с тремя и пятью рядами численное решение в ходе вычислительного процесса сводилось к стационарному. В остальных случаях расчетное поле течения было нестационарным и непериодическим, что требовало получения достаточно длительной выборки для последующего осреднения.

На рис. 2 – 4 приведены общие картины и увеличенные фрагменты (в окрестности труб шестого ряда) мгновенных распределений модуля полной безразмерной скорости и нормированной температуры, полученные для тесного пучка с разным количеством поперечных рядов труб при наибольшем из рассмотренных значений числа Пекле ($Pe = 1200$). Температура нормировалась на разность между выходной среднемассовой и входной температурами.

Как видно, для однорядного пучка две узкие струи, выходящие из межтрубного пространства, отклоняются к одной или к другой стенке, ограничивающей поток в поперечном направлении, причем в ходе установления численного решения направленность этого отклонения носит случайный характер (в силу симметрии расчетной области и граничных условий). Тепловой след распространяется в направлении развития основного течения, охватывая несколько цилиндров,

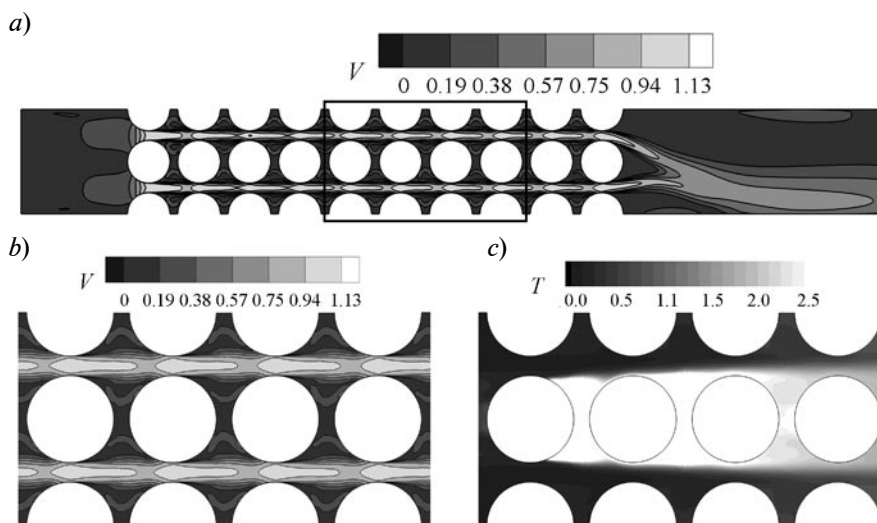


Рис. 2. Мгновенные поля, рассчитанные при $Re = 1200$ для тесного пучка с одним полным рядом труб: модуль скорости (a), увеличенные фрагменты модуля скорости (b) и температуры (c). Приведены нормализованные значения величин

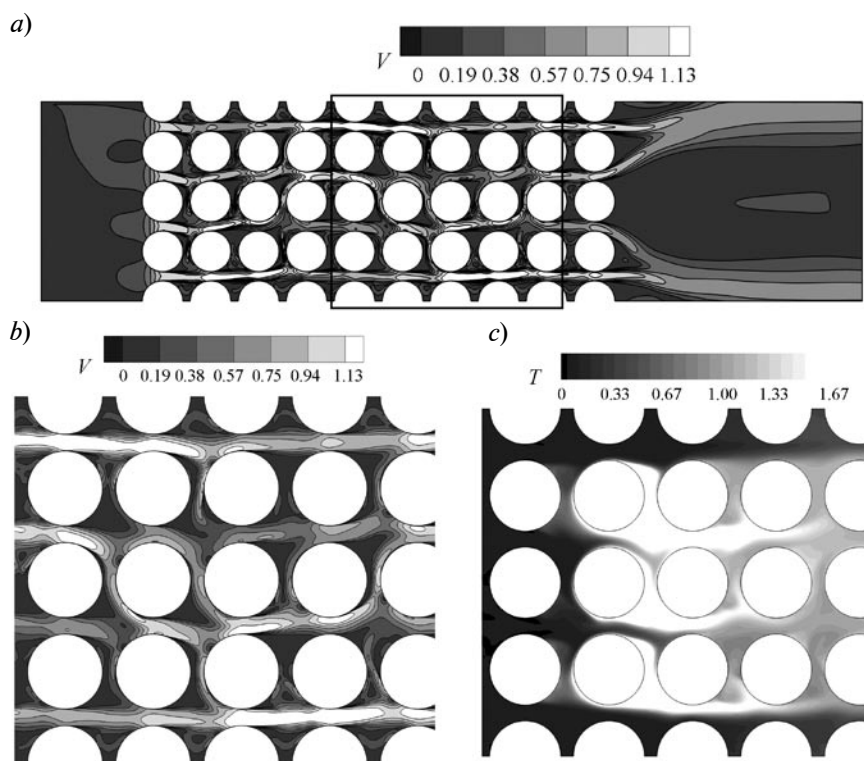


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но для пучка с тремя рядами труб

расположенных за нагреваемой трубой.

В случае трехрядного пучка рассчитанное течение носит выраженный нестационарный характер с заметным поперечным перетеканием теплоносителя в межтрубном

пространстве. В отличие от случая однорядной конфигурации, на выходе из трехрядного пучка картина течения обладает симметрией. Здесь струи, омывающие центральный ряд цилиндров, при выходе из

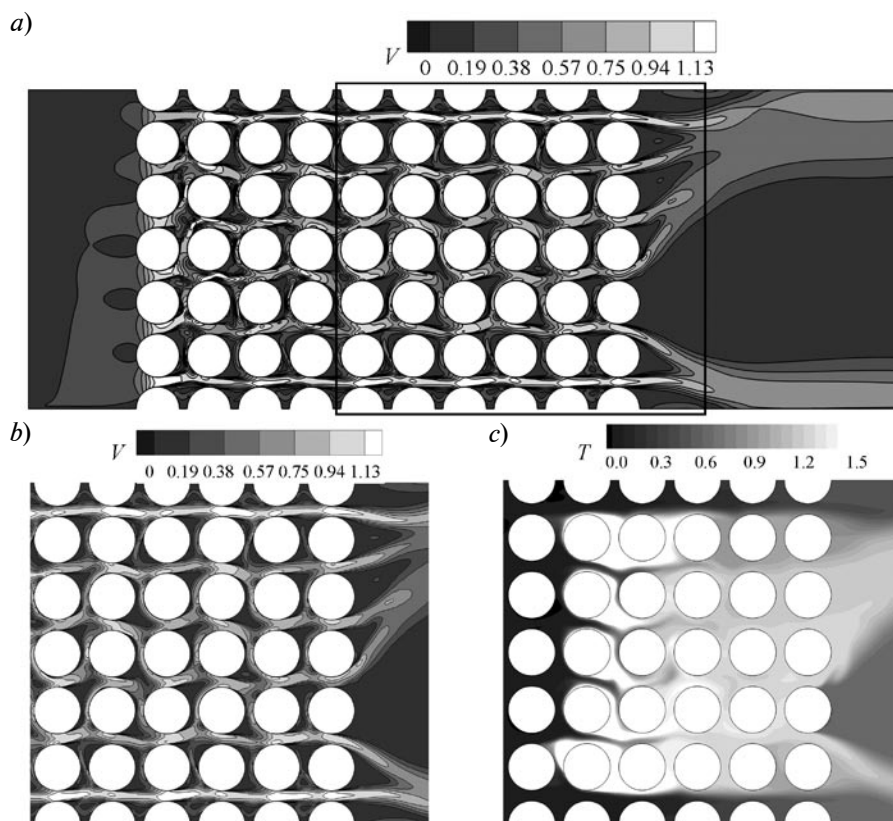


Рис. 4. То же, что на рис. 2 и 3, но для пучка с пятью рядами труб

пучка объединяются (каждая с соседней струей, формирующейся между крайним рядом труб и вытеснителем) и отклоняются в направлении ближайшей горизонтальной стенки. При этом скорость продольного протекания теплоносителя по коридорам различна: течение является более интенсивным в пространстве между крайними рядами трубок и вытеснителями.

Картины полей течения внутри пучка, состоящего из пяти рядов труб в поперечном направлении, качественно подобны таковым, полученным для трехрядного пучка. Здесь, однако, как и для конфигурации с одинарным рядом, в результатах расчетов наблюдается несимметричность решения в области за пучком – с объединением струй и их последующим отклонением к горизонтальным стенкам. Отметим, что эта асимметрия сохраняется и в осредненных по времени полях.

Влияние числа Пекле на результаты расчетов иллюстрируется на рис. 5, где показаны осредненные во времени поля мо-

дуля скорости для трехрядного пучка при $Re = 600$ и 1200 . Видно, что предсказываемая методом URANS структура течения для этих режимов различается как внутри трубного пучка, так и в следе за пучком. В случае режима с $Re = 600$ обращает на себя внимание изменение направления струйного течения по мере протекания по коридорам. Течение в следе несимметрично, объединение струй, в отличие от режима с наибольшим числом Пекле, происходит непарно: формируется как одна широкая струя (путем слияния трех выходящих из пучка струй), так и вторая («одинокая»).

Мгновенные поля модуля скорости и температуры, рассчитанные для широкого пучка при $Re = 1200$, показаны на рис. 6. Течение, по сравнению с полученным для трехрядного тесного пучка, существенно более хаотично; заметно выше здесь и степень перемешивания потока за счет более интенсивного перетекания в поперечном направлении в широких межтрубных зонах. Тепловой след от нагреваемых труб доста-

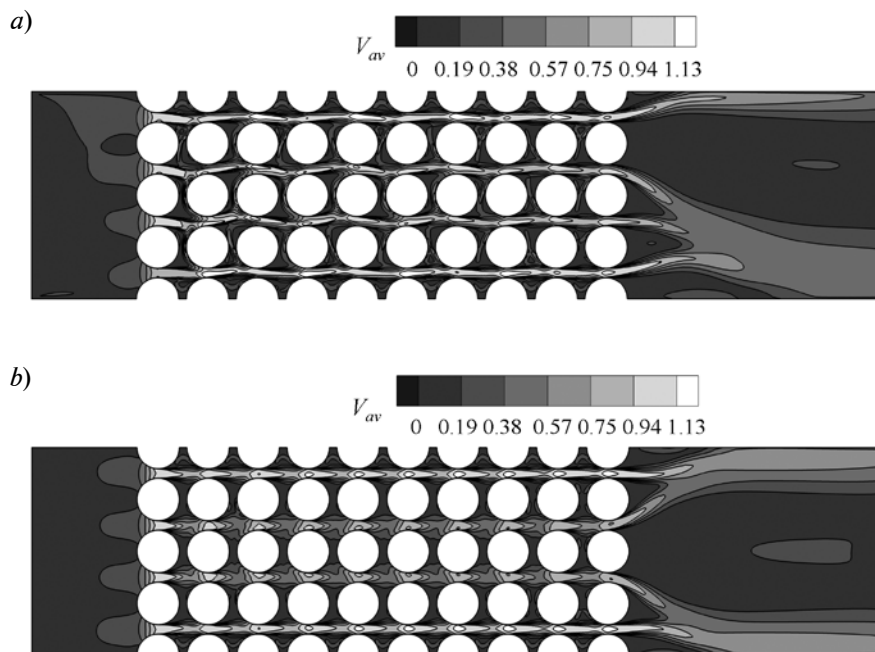


Рис. 5. Осредненные во времени распределения модуля скорости для случая тесного пучка с тремя рядами труб: $Re = 600$ (a) и 1200 (b). Приведены нормализованные значения величин

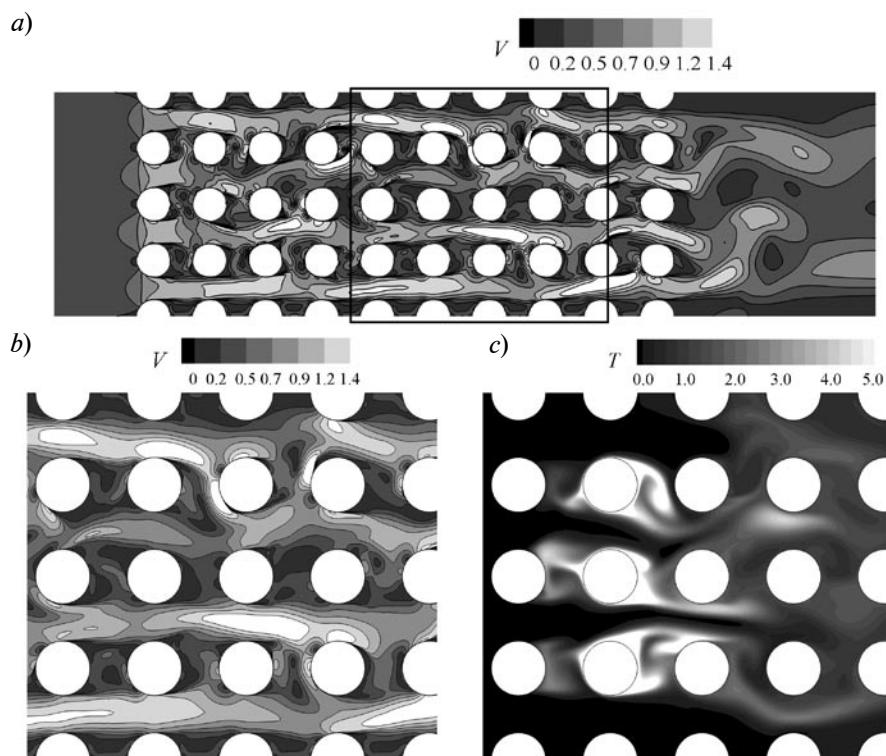


Рис. 6. Мгновенные поля, рассчитанные при $Re = 1200$ для широкого пучка с тремя рядами труб: модуль скорости (a), увеличенные фрагменты модуля скорости (b) и температуры (c). Приведены нормализованные значения величин

точно быстро размывается, становясь более коротким. Такие изменения в структуре течения, как показано далее, оказывают сильное влияние на средние характеристики теплоотдачи.

Расчетные значения среднего числа Нуссельта Nu для отдельной трубы вычислялись следующим образом:

$$Nu = \frac{q_w d}{\lambda(T_w - T_{in})}, \quad (2)$$

где T_w – средняя температура поверхности обогреваемой трубы, q_w – плотность теплового потока на ее поверхности, λ – коэффициент теплопроводности.

При обработке численных данных, полученных для пучков, содержащих более одного ряда трубок в поперечном направлении, применялось два способа расчета среднего числа Нуссельта: в первом случае использовались данные только для центрального цилиндра (число обозначено Nu , как и в экспериментах [3]), а во втором вычислялось среднее арифметическое чисел Нуссельта, полученных для всех обогреваемых цилиндров, расположенных в шестом ряду (среднее обозначено как Nu_Σ).

Значения числа Нуссельта, рассчитанные для пучков различной конфигурации,

представлены на рис. 7 в сопоставлении с экспериментальными данными, полученными для течения чистых щелочных металлов в коридорных пучках с рассмотренными параметрами упаковки [1].

Для тесного пучка в конфигурациях из трех и пяти поперечных рядов труб на рис. 7, а показаны значения числа Нуссельта, рассчитанные двумя разными способами. Дополнительно на графики нанесена обобщающая зависимость $Nu = Re^{0.5}$, рекомендованная авторами работ [3, 4] к использованию для оценочных расчетов теплообмена в коридорных и шахматных пучках труб при их обтекании чистыми жидкими металлами. Заметим здесь, что в экспериментах с течением расплава свинца и эвтектики свинец-висмут (описаны в работах [5, 6]), а также и в других недавних опытах со свинцом [13], получены значения коэффициента теплоотдачи в несколько раз меньшие, чем оцениваемые зависимостью $Nu = Re^{0.5}$. Основная причина этого расхождения заключается в том, что оксидная пленка на поверхности конструкционного материала, в совокупности с приповерхностным слоем свинца, насыщенным примесями и оксидом теплоносителя, образует слой с низкой теплопроводностью,

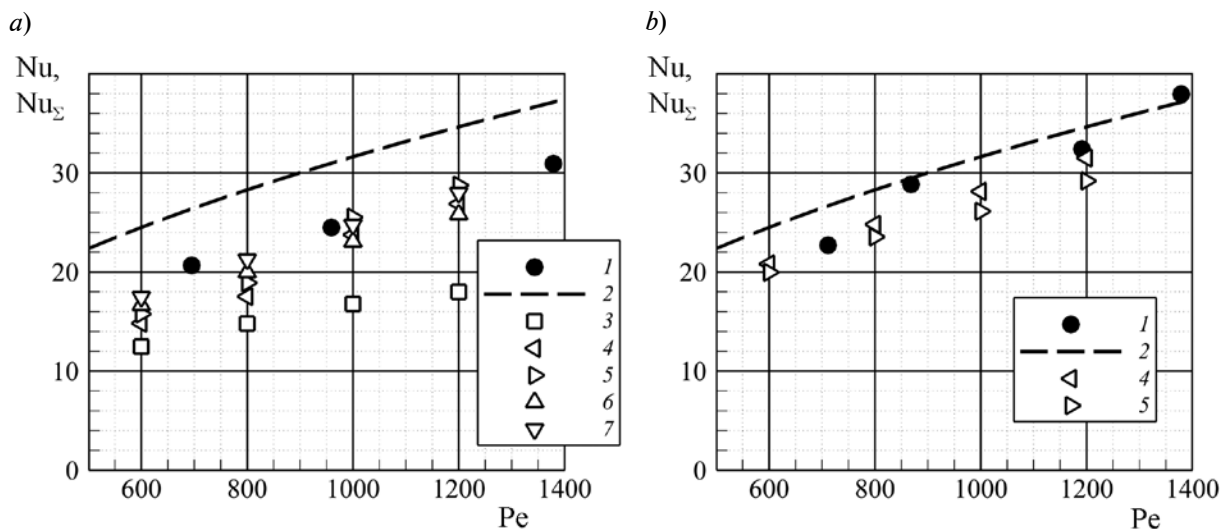


Рис. 7. Экспериментальные (1) и расчетные (3 – 7) значения чисел Нуссельта Nu (1 – 3, 5, 7) и Nu_Σ (4, 6) в зависимости от значения числа Пекле, а также аппроксимация экспериментальных данных (2) для тесного (а) и широкого (б) пучков. Расчеты выполнены для одного (3), трех (4, 5) и пяти (6, 7) рядов труб

Таблица 2

Влияние размерности сетки, числа Пекле и способа расчета на значения числа Нуссельта

Число Пекле	Nu		Nu _г	
	Грубая сетка	Мелкая сетка	Грубая сетка	Мелкая сетка
600	16,64	15,77	16,13	14,83
800	20,45	18,90	19,49	17,53
1000	23,70	25,53	22,17	23,75
1200	25,13	26,88	26,41	28,74

который препятствует интенсивной теплоотдаче (возникает так называемое термическое контактное сопротивление (ТКС)). В случае чистых щелочных металлов эффекты ТКС относительно малы.

Анализ расчетных данных, представленных на рис. 7, а, показывает, что в случае однорядного тесного пучка метод URANS (а по факту – стационарное RANS-решение) для всех рассчитанных режимов предсказывает интенсивность теплоотдачи, которая существенно ниже по сравнению с экспериментальными данными [1]. При увеличении же числа рядов расчетные значения становятся ближе к экспериментальным. Наилучшее согласие при этом достигается при высоких значениях числа Пекле. Кроме того, здесь менее выражено как влияние рядности, так и способа вычисления среднего теплового потока.

В табл. 2 приведены значения числа Нуссельта, рассчитанные двумя разными способами по результатам вычислений для трехрядного тесного пучка на расчетных сетках разной степени измельченности. Различия в результатах, полученных на разных сетках, не превышают 5 – 7 %, причем для двух меньших значений числа Пекле на более грубой сетке предсказываются большие значения числа Нуссельта, а для $Pe = 1000$ и 1200 – наоборот, расчеты на мелкой сетке предсказывают большую интенсивность средней теплоотдачи.

Расчетные значения числа Нуссельта, полученные для широкого пучка (рис. 7, б), при всех режимах хорошо согласуются с данными экспериментов [1].

Не вызывает сомнения, что профессио-

нальное применение вихре-разрешающих подходов может обеспечить более адекватное описание структуры турбулентных полей, пространственно-временного развития течения, локальной и средней теплоотдачи от поверхности нагреваемых труб пучка. Вместе с тем, использование режимов вычислительно-эффективного подхода URANS оказалось в настоящих расчетах вполне продуктивным. На расчетных сетках весьма умеренной размерности удалось получить приемлемую степень согласия с экспериментами по интересующей практиков средней теплоотдаче.

Заключение

Экономичный вычислительный подход, основанный на решении нестационарных, осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса (метод URANS) использован для двумерного численного моделирования турбулентного течения и теплообмена в поперечно обтекаемых жидким металлом коридорных трубных пучках. При учете краевых эффектов изучено влияние на поле течения и среднюю теплоотдачу варьирования числа Пекле в диапазоне от 600 до 1200, плотности упаковки труб в пучке и его ширины. Из сравнения рассчитанных интегральных характеристик теплоотдачи с данными экспериментов следует, что приемлемая степень согласия достигается в том случае, если расчетная область включает в себя три и более рядов труб в поперечном к потоку направлении.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №14-08-00936).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Боришанский В.М., Кутателадзе С.С., Новиков И.И., Федьинский О.С.** Жидкометаллические теплоносители. 2-е изд., перераб. и дополн. М.: Атомиздат, 1967. 299 с.
- [2] **Субботин В.И.** Гидродинамика и теплообмен в атомных энергетических установках. М.: Атомиздат, 1975. 408 с.
- [3] **Боришанский В.М., Андреевский А.А., Жилкина В.Б., Шнейдерман Л.Л.** Теплоотдача при поперечном обтекании пучков труб жидким металлом // Жидкие металлы. Под ред. В.М. Боришанского и др. М.: Госатомиздат, 1963. С. 183–205.
- [4] **Субботин В.И., Минашин В.Е., Денискин У.И.** Теплообмен при поперечном обтекании пучков труб // Теплофизика высоких температур. 1963. Т. 1. № 2. С. 238–246.
- [5] **Калякин С.Г., Грабежная В.А.** Экспериментальное исследование теплообмена в жидком металле при поперечном обтекании пучка труб в обоснование парогенератора РУ БРЕСТ-ОД-300 // Труды IV Российской национальной конференции по теплообмену (РНКТ-4). М.: ИД МЭИ, 2006. Т. 2. С. 128–131.
- [6] **Parphenov A.C., Mikheev A.C., Grabezhnaya V.A., Shcherbakov S.I.** Experimental study of heat transfer at the cross flow of lead over the bundle of steam generating tubes // Collection of conference papers “Thermophysics of fast reactors (Thermophysics-2013)”, Obninsk, October 23 – November 1, 2013. Obninsk, SSC of RF-IPPE, 2014.
- [7] **Абрамов А.Г., Смирнов Е.М.** Прямое численное моделирование турбулентного обтекания кругового цилиндра жидким натрием при существенном влиянии эффектов плавучести // Труды VI Российской национальной конференции по теплообмену (РНКТ-6). М.: ИД МЭИ, 2014.
- [8] **Белов И.А., Кудрявцев Н.А.** Теплоотдача и сопротивление пакетов труб. Л.: Энергоатомиздат, 1987. 223 с.
- [9] **Benhamadouche S., Laurence D.** LES, coarse LES, and transient RANS comparisons on the flow across a tube bundle // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2003. Vol. 24. No. 4. Pp. 470–479.
- [10] **Liang C., Papadakis G.** Large eddy simulation of flow over a staggered tube bundle at subcritical Reynolds number // Journal of Fluids and Structures. 2007. Vol. 23. No. 8. Pp. 1215–1230.
- [11] **Li X., Wu X., He S.** Numerical investigation of the turbulent cross flow and heat transfer in a wall bounded tube bundle // International Journal of Thermal Sciences. 2014. Vol. 75. Pp. 127–139.
- [12] **Menter F.R., Langtry R., Kuntz M.** Ten 2015s of industrial experience with the SST turbulence model // In: Turbulence, Heat and Mass Transfer 4 (CD-ROM Proceedings). Redding, CT: Begell House Inc. 2003. Pp. 625–632.
- [13] **Beznosov A.V., Yarmonov M.V., Zudin A.D., et al.** Experimental studies of heat transfer characteristics and properties of the cross-flow pipe flow melt lead // Open Journal of Microphysics. 2014. Vol. 4. No. 4. Pp. 54–65.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АБРАМОВ Алексей Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
 abramov@gunnet.ru

ЛЕВЧЕНЯ Александр Михайлович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
 levchenya@yandex.ru

СМИРНОВ Евгений Михайлович – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого,

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
 aero@phmf.spbstu.ru

СМИРНОВ Павел Евгеньевич – кандидат физико-математических наук, старший разработчик программного обеспечения ANSYS Germany GmbH, г. Дармштадт, Федеративная Республика Германия.

Birkenweg 14A, 64295 Darmstadt, Germany
 psmirn2000@mail.ru

Abramov A.G., Levchenya A.M., Smirnov E.M., Smirnov P.E. NUMERICAL SIMULATION OF LIQUID METAL TURBULENT HEAT TRANSFER FROM AN INLINE TUBE BUNDLE IN CROSS-FLOW.

Results of numerical simulation of turbulent flow field and heat transfer of liquid metal in cross-flow over inline tube bundles consisting of smooth round tubes are presented. Computations have been performed with the CFD-code ANSYS Fluent on the base of two-dimensional unsteady RANS formulation using the SST turbulence model by Menter and assuming constant physical properties of a fluid with the Prandtl number equal to 0.023. The Reynolds number was ranged from 26200 to 52400. Instantaneous and time-averaged velocity and temperature fields obtained for bundles of different intertube spacing at variation of the bundle width (number of tube rows in the spanwise direction) were analyzed. Integral characteristics of heat transfer were compared with experimental data.

TUBE BUNDLE, LIQUID METAL, TURBULENCE, HEAT TRANSFER, NUMERICAL SIMULATION, URANS.

REFERENCES

- [1] V.M. Borishanskiy, S.S. Kutateladze, I.I. Novikov, O.S. Fedynskiy, Zhidkometallicheskiye teplonositeli [Liquid-metal heat-transport media]: 2-ye izd., pererab. i dopoln, Atomizdat, Moscow, 1967.
- [2] V.I. Subbotin, Gidrodinamika i teploobmen v atomnykh energeticheskikh ustanovkakh [Hydrodynamics and heat transfer in nuclear energy facilities], Atomizdat, Moscow, 1975.
- [3] V.M. Borishanskiy, A.A. Andreyevskiy, V.B. Zhilkina, L.L. Shneyderman, Teplootdacha pri poperechnom obtekanii puchkov trub zhidkim metallom [Heat transfer of tube bundles in cross-flow of liquid metal], Zhidkiye metally. Pod red. V.M. Borishanskogo i dr. Gosatomizdat, Moscow (1963). 183–205.
- [4] V.I. Subbotin, V.E. Minashin, U.I. Deniskin, Teploobmen pri poperechnom obtekanii puchkov trub [Heat transfer of tube bundles in cross-flow], Teplofizika vysokikh temperatur. 1 (2) (1963) 238–246.
- [5] S.G. Kalyakin, V.A. Grabezhnaya, Eksperimentalnoye issledovaniye teploobmena v zhidkom metalle pri poperechnom obtekanii puchka trub v obosnovaniye parogeneratora RU BREST-OD-300 [Experimental study of heat transfer at cross-flow of liquid metal in justification of the steam generator RU BREST-OD-300], Trudy IV Rossiyskoy natsionalnoy konferentsii po teploobmenu (RNKT-4). ID MEI, Moscow. 2 (2006) 128–131.
- [6] A.C. Parphenov, A.C. Mikheev, V.A. Grabezhnaya, C.I. Shcherbakov, Experimental study of heat transfer at the cross flow of lead over the bundle of steam generating tubes, Collection of conference papers Thermophysics – 2013, Obninsk, October 23 – November 1 2013. Obninsk, SSC of RF – IPPE, 2014.
- [7] A.G. Abramov, E.M. Smirnov, Pryamoye chislennoye modelirovaniye turbulentnogo obtekaniya krugovogo tsilindra zhidkim natriyem pri sushchestvennom vliyaniy effektiv plavuchesti [Direct numerical simulation of liquid sodium turbulent flow past a circular cylinder under the essential buoyancy effects], Trudy VI Rossiyskoy natsionalnoy konferentsii po teploobmenu (RNKT-6). ID MEI, Moscow (2014) ID C2-01.
- [8] I.A. Belov, N.A. Kudryavtsev, Teplootdacha i soprotivleniye paketov trub [Heat transfer and resistance of tube bundles], Energoatomizdat, Leningrad, 1987.
- [9] S. Benhamadouche, D. Laurence, LES, coarse LES, and transient RANS comparisons on the flow across a tube bundle, International Journal of Heat and Fluid Flow, 24(4) (2003) 470–479.
- [10] C. Liang, G. Papadakis, Large eddy simulation of flow over a staggered tube bundle at subcritical Reynolds number, Journal of Fluids and Structures, 23(8) (2007) 1215–1230.
- [11] X. Li, X. Wu, S. He, Numerical investigation of the turbulent cross flow and heat transfer in a wall bounded tube bundle, International Journal of Thermal Sciences, 75 (2014) 127–139.
- [12] F.R. Menter, R. Langtry, M. Kuntz, Ten years of industrial experience with the SST turbulence model, In: Turbulence, Heat and Mass Transfer 4 (CD-ROM Proceedings). Redding, CT: Begell House Inc. (2003) 625–632.
- [13] A.V. Beznosov, M.V. Yarmonov, A.D. Zudin, et al., Experimental studies of heat transfer characteristics and properties of the cross-flow pipe flow melt lead, Open Journal of Microphysics, 4(4) (2014) 54–65.

THE AUTHORS

ABRAMOV Alexey G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
 abramov@runnet.ru

LEVCHENYA Alexander M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
levchenya@yandex.ru

SMIRNOV Evgueni M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
aero@phmf.spbstu.ru

SMIRNOV Pavel E.

ANSYS Germany GmbH
Birkenweg 14A, 64295 Darmstadt, Germany
psmirn2000@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.230.3

УДК: 532.5 + 612.13 + 534.7

Я.А. Гатаулин, Д.К. Зайцев,
Е.М. Смирнов, Е.А. Федорова, А.Д. Юхнев

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЛАБОЗАКРУЧЕННОГО ТЕЧЕНИЯ ЖИДКОСТИ В МОДЕЛИ КРОВЕНОСНОГО СОСУДА СО СТЕНОЗОМ

Проведено исследование слабокрученного течения жидкости в модели кровеносного сосуда с несимметричным стенозом. При этом использованы ультразвуковой доплеровский метод и средства вычислительной гидродинамики. Изучено влияние закрутки потока на размер зоны обратных токов в области за стенозом. Показано, что модель стационарного ламинарного течения пригодна для численного анализа течения за стенозом выбранной геометрии при значении числа Рейнольдса $Re < 300$. Для более высоких его значений предпочтительным оказывается применение полуэмпирической модели турбулентности $k-\omega$ SST.

КРОВЕНОСНЫЙ СОСУД, ЗАКРУЧЕННОЕ ТЕЧЕНИЕ, НЕСИММЕТРИЧНЫЙ СТЕНОЗ, ТУРБУЛЕНТНОСТЬ, УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ДОПЛЕР.

Введение

Результаты многих исследований указывают на существование закрученного (вращательно-поступательного) течения крови на отдельных участках сердечно-сосудистой системы человека. Среди механизмов, приводящих к формированию закрутки кровотока, чаще всего отмечают следующие: ротационное движение сердца, пространственная кривизна кровеносных сосудов, винтовая структура эндотелиального слоя внутренней поверхности артерий. Экспериментально феномен закрученного движения крови впервые был зарегистрирован при изучении течения крови в аорте [1], а впоследствии – в бедренной артерии [2, 3] и общей сонной артерии [4]. С тех пор закрученные течения крови привлекают к себе все более пристальный интерес исследователей [5].

Несмотря на большое число свидетельств существования закрученного движения крови в организме, до сих пор остается невыясненной роль закрутки кровотока на развитие сердечнососудистых заболеваний, среди которых чаще всего встречается атеросклероз. Артериальный стеноз (локаль-

ное сужение) представляет собой одно из наиболее частых заболеваний кровеносных сосудов. Стенозы возникают вследствие различных отложений на стенках сосуда и/или разрастания соединительных биологических тканей. Из-за сужения проходного сечения и ускорения потока крови в центральной части стеноза возникают повышенные сдвиговые напряжения, что увеличивает вероятность разрыва атеросклеротической бляшки. В зоне обратных токов, образующейся за стенозом, напротив, имеют место относительно небольшие значения сдвиговых напряжений. В условиях действия малых сдвиговых напряжений тромбоциты и другие тромбогенные белки легче присоединяются к стенке артерии, приводя к дальнейшему росту бляшки [5].

Исследования закрученных течений в моделях стенозированных сосудов начались относительно недавно: первая работа в этом направлении опубликована в 2004 году [3]. Ее автор изучал влияние слабой закрутки потока на течение за стенозом с использованием методов фазоконтрастного магнитного резонанса и математического моделирования с применением программного пакета вычислительной ги-

дродинамики Star-CD. Закрученный поток с максимальной окружной скоростью, составляющей 0,17 от осевой, подавался на вход модели. Автором [3] сделан общий вывод о стабилизирующем влиянии закрутки на турбулентное течение за стенозом. Данные последующих численных исследований [6, 7], в которых рассматривалась модель сосуда с осесимметричным 75%-м стенозом, также свидетельствуют, что закрутка потока (соотношение входных скоростей 0–0,3) подавляет турбулентность в области за стенозом и уменьшает зону обратных токов. Авторы работ [8, 9] провели экспериментальное исследование слабозакрученного течения (параметр закрутки $S = 0,25$) в стенозе той же конфигурации, используя метод цифровой трассерной визуализации (метод PIV). Измерения показали, что закрутка уменьшает длину зоны обратных токов примерно на 20 % и сокращает протяженность участка ламинарно-турбулентного перехода.

Во всех известных авторам работах, посвященных исследованию закрученного течения в моделях стенозированных сосудов, сужение проходного сечения имело осесимметричную форму. Однако для большинства реальных стенозов характерна несимметричная форма. В настоящей работе с применением средств вычислительной гидродинамики и ультразвукового доплеровского метода проведено расчетно-экспериментальное исследование закрученного течения жидкости в модели кро-

веносного сосуда с неосесимметричным стенозом.

Цели и задачи работы:

получить экспериментальные данные о поле скорости для незакрученного и слабозакрученного стационарного течения в модели несимметричного 75%-го стеноза при варьировании числа Рейнольдса;

провести численное моделирование данного течения в трехмерной постановке и установить границу применимости модели ламинарного течения;

разработать методику измерения длины зоны обратных токов за стенозом и изучить влияние закрутки потока на протяженность этой зоны.

Экспериментальная установка и методика измерений

Для проведения экспериментального исследования течения в модели сосуда со стенозом создана установка, которая представляет собой замкнутый контур с циркулирующей в нем жидкостью (водой). Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

Поток жидкости с постоянным расходом Q от 90 до 270 мл/мин создавался центробежным насосом 2, регулировался многооборотным регулятором расхода 3 и контролировался электромагнитным расходомером. Жидкость протекала по длинной трубке диаметром 6 мм до достижения развитого профиля скорости перед входом в рабочий участок. При максимальном рас-

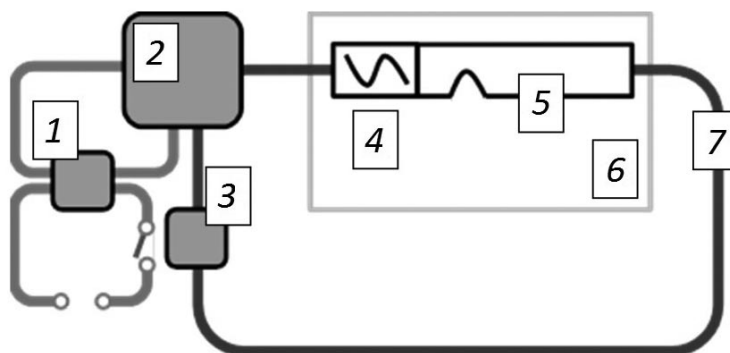


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 – устройство управления насосом, 2 – насос, 3 – регулятор расхода, 4 – скрученная лента, 5 – модель сосуда со стенозом, 6 – акустическая ванночка с помещенной в нее моделью сосуда, 7 – замкнутый гидравлический контур

ходе число Рейнольда Re , построенное по внутреннему диаметру трубки и среднерасходной скорости, составляло 960.

Модель 5 сосуда со стенозом изготовлена из силикона путем отливки по разработанной авторами технологии [10] и представляет собой трубку диаметром $D = 6$ мм и толщиной стенки 1,5 мм. На расстоянии 25 мм от входного сечения трубки находится начало локального сужения, моделирующего стеноз сосуда (рис. 2, а). Длина стеноза составляет $L_s = 12$ мм, проходной диаметр в самом узком месте («горлышко» стеноза) — $D_s = 3$ мм. В любом поперечном сечении на участке сужения просвет сосуда представляет собой круг. Степень стеноза

$$STI = (1 - D_s^2/D^2)100\%,$$

рассчитанная по площади, составляет 75 %. Форма стеноза — неосесимметричная и описывается следующими формулами для «верхней» $y_{up}(x)$ и «нижней» $y_{down}(x)$ границ стеноза в среднем продольном сечении:

$$y_{up} = D,$$

$$y_{down} = A(1 + \cos(2\pi x/L_s)), -L_s/2 \leq x \leq L_s/2,$$

где $A = D(1 - \sqrt{1 - STI/100})$.

Для создания закрученного течения в контур вставлена скрученная лента (рис. 2, б). Вставка изготовлена по технологии быстрого прототипирования и имеет следующие размеры:

ширина — 6 мм;

длина — 20 мм;

толщина — 0,4 мм;

относительный коэффициент закрутки — 3,33.

Последний определяется как отношение расстояния, на котором происходит поворот ленты на 180° , к ее ширине.

Для характеристики закрутки потока часто используют параметр закрутки S , который определяется как безразмерный поток момента количества движения [13]:

$$S = \frac{2\pi \int_0^R r^2 V_z V_\varphi dr}{\pi R^3 V_b^2},$$

где R — радиус трубки; V_b , V_z , V_φ — среднерасходная, осевая и окружная скорости, соответственно.

Для использованной в экспериментах вставки параметр закрутки (рассчитанный для сечения перед стенозом) равен 0,10 и слабо зависит от числа Рейнольдса. При этом отношение максимальной окружной скорости к максимальной осевой скорости закрученного течения в сечении перед стенозом составляет 0,21, что близко к физиологическому значению закрутки кровотока, измеренной ультразвуковым доплеровским методом в клинике [3].

Для получения экспериментальных данных о поле скорости в модели сосуда со стенозом использовался ультразвуковой сканер LogicScan 64, снабженный линейным датчиком с рабочей частотой 5 МГц. При работе с данным прибором доплеровский спектр скоростей выводится в реальном времени на экран компьютера через интерфейс программы EchoWave II, обрабатывающей сигналы сканера.

Измерение длины области обратных токов проводилось в режиме цветового доплеровского картирования по следующей

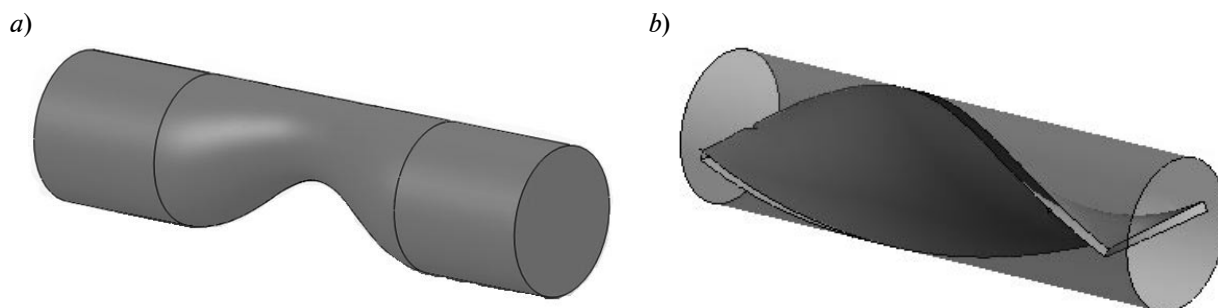


Рис. 2. 3D-модели сосуда со стенозом (а) и скрученной ленты (б)

методике. Датчик закреплялся на державке над моделью сосуда так, чтобы плоскость сканирования составляла с осью сосуда угол $\theta = 60^\circ$ и при этом оси сосуда и датчика лежали в плоскости, перпендикулярной плоскости симметрии стеноза (рис. 3). Вначале плоскость сканирования располагалась в таком сечении за стенозом, для которого в окне графического интерфейса программы EchoWave II была отчетливо видна окрашенная в синий цвет зона со скоростями, направленными от датчика (область серого цвета на рис. 3). Затем датчик сдвигался вниз по течению до достижения сечения, в котором синяя зона пропадает. Расстояние между этим сечением и минимальным сечением стеноза трактовалось как длина зоны обратных токов (в предположении, что поток отрывается от стенки в центре стеноза).

Следует отметить, что действительная длина L зоны обратных токов больше, чем измеренная по описанной методике L_{US} (см. рис. 3). Причина этого заключается в том, что ультразвуковой сканер не способен измерять скорости потока, меньшие некоторого предела (по абсолютной величине) и, как следствие, исчезает возможность визуализации зоны малых отрицательных скоростей в окрестности точки (линии) присоединения потока к стенке.

Один из представляемых ниже результатов настоящей работы заключается в определении уточняющей расчетной поправки ΔL к измеряемой длине зоны обратных токов.

Измерения максимальной величины осевой скорости осуществлялись в импульсно-волновом доплеровском режиме следующим образом. В программе EchoWave II устанавливался доплеровский угол, равный 60° , а измерительный объем – максимальным, с характерным размером 5 мм. Центр измерительного объема совмещался с осью сосуда, и с экрана считывалось значение максимальной величины осевой скорости $V_{z \max}^*$ в измерительном объеме. Далее величина $V_{z \max}^*$ именуется максимальной осевой доплеровской скоростью. Следует подчеркнуть, что ее значение адекватно отражает значение реальной максимальной осевой скорости $V_{z \max}^*$ в данном сечении только в случае относительной малости поперечных скоростей V_n (рис. 4). В общем случае связь между максимальной осевой доплеровской скоростью $V_{z \max}^*$, измеряемой ультразвуковым сканером, и действительной максимальной осевой скоростью $V_{z \max}$ в данном сечении определяется соотношением

$$V_{z \max}^* = ((V_z \cos \theta + V_n \sin \theta) / \cos \theta)_{\max} = (V_z + V_n \operatorname{tg} \theta)_{\max}, \quad (1)$$

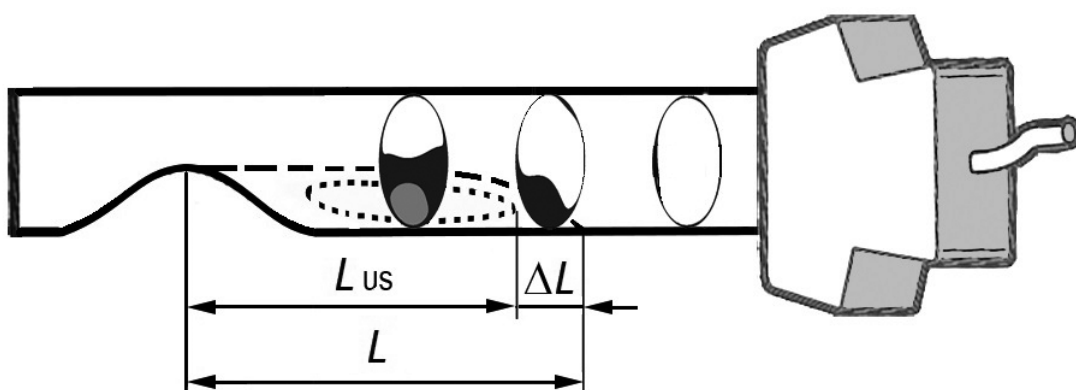


Рис. 3. Схема течения за стенозом, визуализируемого методом цветового доплеровского картирования:

штриховая линия – граница области обратных токов, пунктирная – граница зоны обратных токов, регистрируемых при измерениях, овалы – изображения поля скорости в косых сечениях сосуда на разном удалении от стеноза (белый цвет – скорости, направленные к датчику, серый – от датчика, черный – малые скорости, не регистрируемые при измерениях). L , L_{US} – действительная и измеряемая значения длины зоны обратных токов. Справа изображен ультразвуковой датчик

где θ — угол между ультразвуковым датчиком и осью сосуда.

Здесь следует отметить, что выбранная ориентация датчика относительно плоскости симметрии стеноза (см. рис. 4) позволила для случая незакрученного течения практически исключить влияние компоненты скорости V_n на результаты измерения максимальной осевой скорости. Действительно, при отсутствии закрутки течение обладает симметрией относительно средней плоскости стеноза, максимальное значение осевой скорости находится в этой плоскости или близко к ней, и там же поперечная скорость V_n пренебрежимо мала. Для случая закрученного течения, когда величина V_n в значительной мере (если не в основном) определяется окружной компонентой скорости, для оценки расхождения между реальной осевой скоростью и измеряемой ультразвуковым сканером использовались данные численного моделирования (полученные по описанной ниже методике). Согласно этим данным, в области за стенозом указанное расхождение не превышало 15 %.

Постановка расчетного исследования и вычислительные аспекты

Численное моделирование течения в рассматриваемой жесткой модели сосуда со стенозом вначале проводилось в пред-

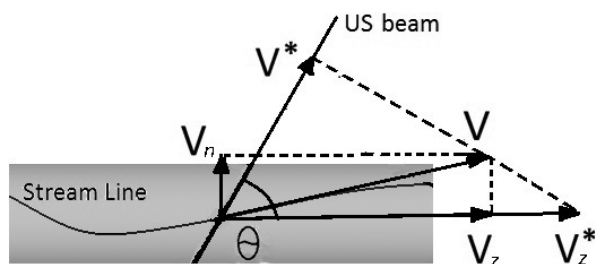


Рис. 4. Схема, поясняющая отличие реальной осевой скорости V_z от измеряемой ультразвуковым сканером (доплеровской) осевой скорости V_z^* в не однонаправленном потоке. V , V^* — скорости потока и доплеровская; V_n — поперечная скорость; θ — угол между направлением ультразвука (US beam) и осью сосуда (Stream Line — линия тока крови)

положении стационарности и ламинарного характера движения жидкости. Решалась полная система уравнений Навье — Стокса для несжимаемой жидкости с постоянной вязкостью. Затем, с учетом результатов проведенных экспериментов, свидетельствовавших о наличии интенсивных пульсаций скорости за стенозом, были проведены расчеты и на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье — Стокса. При этом для замыкания задачи была выбрана широко используемая сегодня модель турбулентности $k-\omega$ SST [12].

Расчеты проводились с использованием программного пакета ANSYS CFX 14, со вторым порядком точности пространственной дискретизации. Были приняты следующие параметры жидкости: динамический коэффициент вязкости $\mu = 0,001$ Па·с; плотность $\rho = 1000$ кг/м³.

Расчетная область включала в себя модель сосуда длиной 160 мм со стенозом, и, в случае задачи о закрученном течении, — завихритель в виде участка трубки со вставленной скрученной лентой (показана на рис. 2, б).

На входе в расчетную область задавалось распределение скорости, согласно решению Пуазейля для развитого ламинарного течения [13], на выходе — постоянное давление. На стенках ставилось условие прилипания.

Расчеты проводились при разных значениях среднерасходной (за пределами стеноза) скорости V_b в диапазоне от 6 до 16 см/с. Соответствующие значения числа Рейнольдса $Re = \rho V_b D / \mu$ лежат в интервале 360 — 960. При расчетах по модели турбулентного течения входной уровень кинетической энергии турбулентности определялся заданием интенсивности турбулентных пульсаций в 1 %, отношение турбулентной вязкости к молекулярной полагалось равным 0,01.

Расчетная область в основном покрывалась квазиструктурированной сеткой с гексаэдральными элементами. Для более сложной по геометрии области скрученной ленты была построена неструктурированная сетка, также из гексаэдральных элементов. В обоих случаях проводилось сгущение узлов сетки к твердым стенкам. Сгущение

было произведено также в области стеноза. Общее число ячеек расчетной сетки составляло около 1,5 млн.

Сопоставление расчетных и экспериментальных результатов для поля скорости незакрученного течения

Как отмечалось выше, для проведения расчетов использовались две вычислительные модели: стационарного ламинарного течения и стационарного турбулентного течения, с замыканием по $k-\omega$ SST модели турбулентности. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных, полученных для незакрученного течения в рассматриваемой модели сосуда со стенозом, позволяет оценить границы применимости данных вычислительных моделей по числу Рейнольдса.

Расчетные распределения максимальной осевой скорости по длине сосуда, полученные по двум моделям, сопоставлялись с экспериментальными результатами. При этом для обеспечения корректности сравнения, по полученным численным данным для трехмерного поля скорости и с использованием соотношения (1) находился расчетный аналог максимальной величины

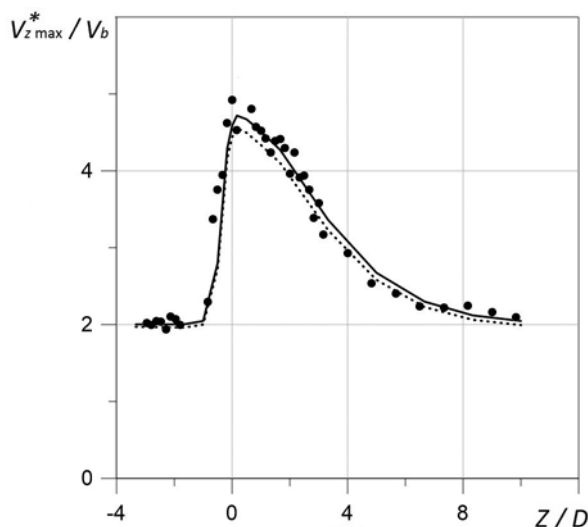
доплеровской осевой скорости в каждом сечении сосуда.

На рис. 5, *a* для случая $Re = 100$ показаны измеренное и рассчитанное продольные распределения максимальной величины осевой (доплеровской) скорости $V_{z \max}^*$ в области за стенозом. В этом случае расчет по модели ламинарного течения хорошо согласуется с экспериментом. Небольшое отличие в центре стеноза, скорее всего, обусловлено погрешностью измерений. Отметим также, что при данном числе Рейнольдса $k-\omega$ SST модель турбулентности генерирует малую по величине вихревую вязкость, и, как следствие, расчеты по двум моделям дают близкие результаты.

На рис. 5, *b* приведены аналогичные данные, но для случая $Re = 660$. Видно, что модель стационарного ламинарного течения предсказывает сильно завышенные значения осевой скорости в области за стенозом. Напротив, модель стационарного турбулентного течения дает количественно близкие к эксперименту результаты.

Расхождение результатов расчетов по модели стационарного ламинарного течения с экспериментальными данными для больших чисел Рейнольдса связано с тем,

a)



b)

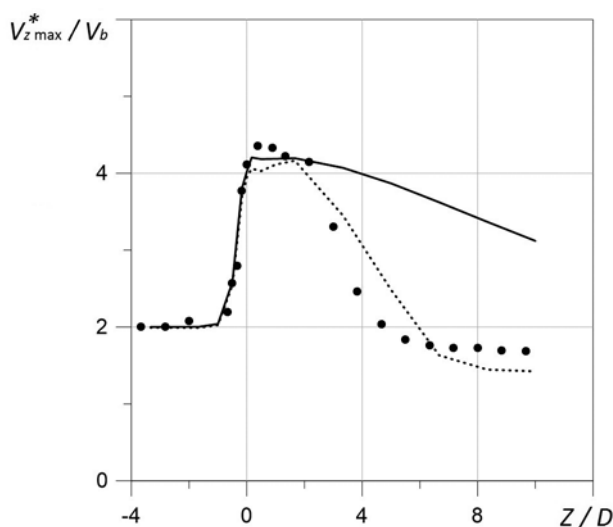


Рис. 5. Измеренные (точки) и рассчитанные (линии) распределения максимальной величины осевой (доплеровской) скорости по оси в области за стенозом, вдоль модели сосуда для значений $Re = 100$ (*a*) и 660 (*b*). Расчеты выполнены по моделям ламинарного (сплошная линия) и турбулентного (пунктир) течения

что в действительности течение за стенозом при числах Рейнольдса, превышающих некоторое критическое, является переходным от ламинарного к турбулентному. Приводимые ниже результаты позволяют заключить, что для стеноза данной геометрии это критическое число близко к 300. Для аккуратного расчета переходных режимов течения требуется решать полные нестационарные уравнения Навье – Стокса, задавая на входной границе, помимо профиля осредненной скорости, еще и данные, определяющие спектр входных возмущений. Очевидно, что расчеты такого рода являются весьма затратными по времени, при этом на результаты могут сильно влиять неопределенности в задании входных возмущений. В связи с этим, обращение к приближенному подходу, основанному на использовании осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса, замкнутых по одной из широко апробированных полуэмпирических моделей турбулентности, представляется целесообразным и, как показывает опыт настоящих расчетов, достаточно продуктивным.

Влияние закрутки потока

Влияние входной закрутки потока на картину течения в сосуде со стенозом при $Re = 660$ иллюстрируется на рис. 6, где показаны представительные линии тока и зоны обратных токов, построенные по результатам расчетов закрученного и незакрученного течений.

В обоих случаях поток, испытав сначала

ускорение в области сужения, отрывается от стенки (почти сразу же за сечением минимальной площади), приводя к образованию весьма протяженной зоны обратных токов, течение в которой носит сложный вихревой характер. На противоположной от стеноза стенке образуется вторая, небольшая по размеру зона обратных токов. Под действием наложенной закрутки обе зоны обратных токов смещаются в сторону от центральной плоскости, в соответствии с направленностью линий тока. Видно также, что в случае закрученного течения основная зона обратных токов становится более сплюснутой и вытянутой, а вторая существенно уменьшается в размере.

На рис. 7 представлены экспериментальные и расчетные данные для длины основной зоны обратных токов в зависимости от числа Рейнольдса. Как в случае незакрученного течения, так и при наложении закрутки наблюдается систематическое расхождение результатов: измеренная с помощью ультразвукового доплеровского метода длина зоны обратных токов занижена по сравнению с расчетной. Причина этого систематического расхождения, подробно обсуждавшаяся выше, лежит в ограниченности возможностей ультразвукового доплеровского метода по измерению малых скоростей потока.

Накопленный авторами опыт методических расчетов течений данного вида позволяет заключить, что численные решения, полученные для стационарного ламинарного течения, обладают высокой точностью.

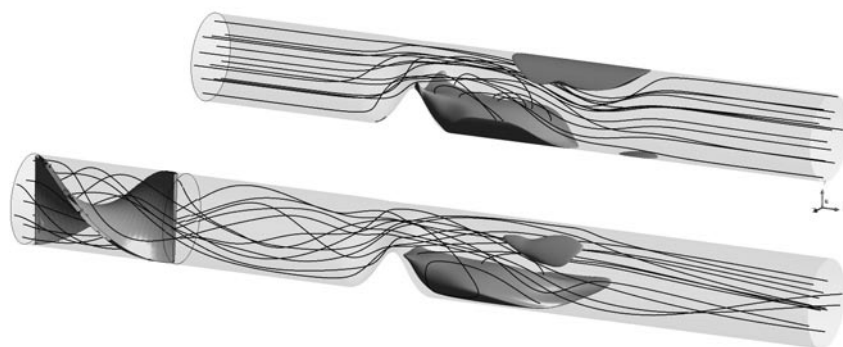


Рис. 6. Рассчитанные линии тока и зоны обратных токов за стенозом в незакрученном (сверху) и закрученном (снизу) течении при $Re = 660$ (для наглядности трубка сжата вдвое по длине)

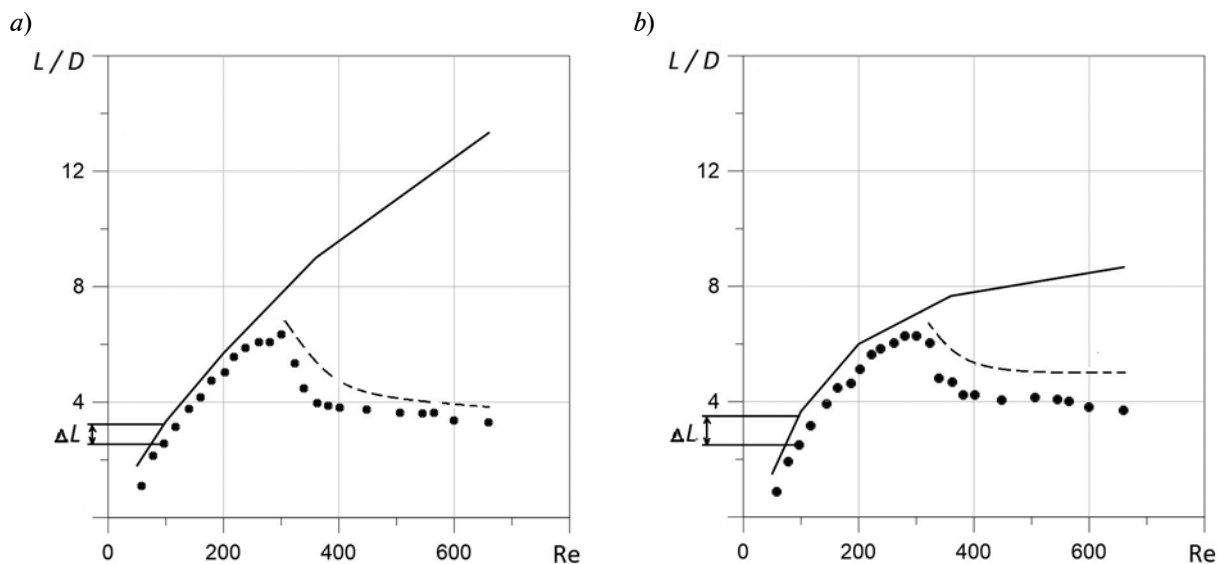


Рис. 7. Измеренные (точки) и рассчитанные (линии) зависимости длины зоны обратных токов незакрученного (а) и закрученного (б) течений от числа Рейнольдса. Расчеты выполнены по моделям ламинарного (сплошная линия) и турбулентного (пунктир) течения

Здесь следует упомянуть и факт отсутствия «проблемы малых скоростей» при анализе численных решений. Имея это в виду, можно обоснованно предположить, что в тех случаях, когда в действительности поток является стационарным и ламинарным, расчетные данные по длине зоны обратных токов лучше отражают ее реальную величину, чем данные измерений. Диапазон существования стационарного ламинарного режима по числу Рейнольдса для стеноза данной геометрии в случае незакрученного течения можно приблизительно определить условием $Re < 250$, а в случае закрученного течения — $Re < 300$. Соответственно, разница между расчетным и измеренным значениями длины зоны обратных токов на участке ламинарного течения — это та поправка, которую нужно прибавить к измеренной длине для ее уточнения. Данная поправка, почти одинаковая для всего участка ламинарного течения, в случае незакрученного течения составляет $0,7D$, что в условиях эксперимента соответствует $4,2$ мм, для закрученного течения — это $0,9D$ ($5,4$ мм). За неимением другого варианта, найденные поправки применяются для уточнения результатов измерений длины зоны обратных токов и в случае больших значений числа

Рейнольдса, когда режим течения за стенозом является переходным/турбулентным.

На рис. 8 показана зависимость от числа Рейнольдса измеренной (с учетом введенных поправок) и рассчитанной по «ламинарной» ($Re < 300$) и «турбулентной» ($Re > 300$) моделям длины зоны обратных токов в закрученном и незакрученном течениях. Экспериментальные данные осреднены по пяти измерениям.

При числах Рейнольдса, меньших 300, длина зоны обратных токов монотонно растет по мере увеличения данного определяющего параметра, достигая своего максимального значения, составляющего около $7D$ при $Re = 300$. При дальнейшем увеличении числа Рейнольдса длина зоны обратных токов резко снижается, составляя $5D$ при $Re = 400$. При $Re > 400$ длина этой зоны практически не меняется.

Резкое уменьшение длины зоны обратных токов при $Re > 300$ вызвано, очевидно, развитием неустойчивостей течения и процессов турбулентного перемешивания в этой области. При доплеровских измерениях эти процессы проявляются в том, что в выводной информации сканера наблюдаются значительные пульсации скорости в области за стенозом, а границы зоны об-

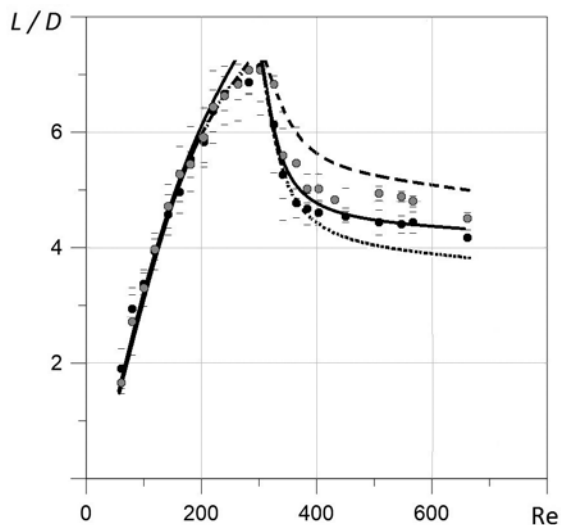


Рис. 8. Измеренные с учетом вводимых поправок (кружки) и рассчитанные (линии) значения длины зоны обратных токов за стенозом в зависимости от числа Рейнольдса. Эксперименты проведены для незакрученного (черные кружки) и закрученного (серые кружки) течения, показаны доверительные интервалы. Расчеты выполнены для незакрученного (сплошная линия) и закрученного (остальные линии) течения. Штриховой линией показаны расчетные результаты, когда указанную длину зоны определяли по срезу поля скорости центральным продольным сечением

ратных токов становятся менее четкими.

Рис. 8 демонстрирует, что при $Re > 300$ длина зоны обратных токов в закрученном течении больше, чем в незакрученном. Согласно экспериментальным данным, увеличение длины зоны обратных токов в закрученном течении составляет примерно 5 – 10 %, тогда как расчет предсказывает около 15 %. Установленный факт увеличения длины зоны обратных токов под действием слабой закрутки, на первый взгляд, находится в противоречии с результатами работы [8], где отмечается обратный эффект. Кажущееся противоречие снимается, если учесть, что большинство авторов (в том числе и авторы работы [8]) измеряют длину зоны обратных токов в центральном сечении модели, обладающей геометриче-

ской симметрией. Данный подход применим для незакрученных течений, но может существенно исказить результаты в случае закрутки потока, поскольку в этом случае зона обратных токов отклоняется от плоскости центрального сечения. Штрихпунктирная кривая на рис. 8, построенная по результатам расчетов закрученного течения, представляет зависимость длины зоны обратных токов от числа Рейнольдса при ее определении по срезу поля скорости центральным продольным сечением. Видно, что определенная таким образом протяженность зоны обратных токов уменьшается при наложении закрутки.

Заключение

Разработана методика измерения длины зоны обратных токов за стенозом с помощью ультразвукового доплеровского метода, и при этом предложена расчетная поправка, уточняющая результаты измерений.

Сопоставление расчетных данных с экспериментальными позволяет заключить, что модель стационарного ламинарного течения пригодна для численного анализа течения за стенозом данной геометрии при значении числа Рейнольдса $Re < 300$. Для более высоких его значений предпочтительным оказывается применение полуэмпирической модели турбулентности $k-\omega$ SST, которая дает близкие к эксперименту результаты как для незакрученного, так и закрученного течений. По результатам измерений и расчетов при $Re > 300$ отчетливо проявляется факт увеличения длины зоны обратных токов за стенозом под влиянием слабой входной закрутки (на 5 – 10%). При этом длина зоны обратных токов в плоскости симметрии стеноза (наиболее привлекательной для экспериментальных наблюдений) уменьшается под действием закрутки (на те же 5 – 10 %).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-01-07923).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Morbiducci U., Ponzini R., Rizzo G., et al. Quantification of helical blood flow in human aorta by time-resolved three-dimensional cine phase

contrast magnetic resonance imaging // Annals of Biomedical Engineering. 2009. Vol. 37. No. 3. Pp. 516–531.



[2] Stonebridge P.A., Brophy C.M. Spiral laminar flow in arteries? // The Lancet. 1991. Vol. 338. No. 8779. Pp. 1360–1361.

[3] Stonebridge P., Buckley C., Thompson A., et al. Nonspiral and spiral (helical) flow patterns in stenoses: in vitro observations using spin and gradient echo magnetic resonance imaging (MRI) and computational fluid dynamic modeling // International Angiology. 2004. Vol. 23. No. 3. Pp. 276–283.

[4] Кирсанов Р.И., Куликов В.П. Винтовое (вращательно-поступательное) движение крови в сердечнососудистой системе // Успехи физиологических наук. 2013. Т. 44. № 2. С. 62–78.

[5] Liu X., Sun A., Fan Y., Deng X. Physiological significance of helical flow in the arterial system and its potential clinical application // Annals of Biomedical Engineering. 2015. Vol. 43. No. 1. Pp. 3–15.

[6] Paul M.C., Larman A. Investigation of spiral blood flow in a model of arterial stenosis // Medical Engineering & Physics. 2009. Vol. 31. No. 9. Pp. 1195–1203.

[7] Linge F., Hye M.A., Paul M.C. Pulsatile spiral blood flow through arterial stenosis // Comput. Methods Biomech Biomed. Engin. 2014. Vol. 17. No. 15. Pp. 1727–1737.

[8] Ha H., Lee S.J. Effect of swirling inlet condition on the flow field in a stenosed arterial vessel model // Medical Engineering & Physics. 2014. Vol. 36. No. 1. Pp. 1119–1128.

[9] Ha H., Lee S.J. Effect of pulsatile swirling flow on stenosed arterial blood flow // Medical Engineering & Physics. 2014. Vol. 36. No. 9. Pp. 1106–1114.

[10] Юхнев А.Д., Сеницына Д.Э. Разработка технологии изготовления и исследование моделей кровеносных сосудов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. № 3 (153). С. 75–79.

[11] Kitoh O. Experimental study of turbulent swirling flow in a straight pipe // Journal of Fluid Mechanics. 1991. Vol. 225. Pp. 445–479.

[12] Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering application // AIAA Journal. 1994. Vol. 32. No. 8. Pp. 1598–1605.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГАТАУЛИН Яков Александрович – научный сотрудник кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yakov_gataulin@mail.ru

ЗАЙЦЕВ Дмитрий Кириллович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zaitsev-aero@yandex.ru

СМИРНОВ Евгений Михайлович – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirnov@physicist.net

ФЕДОРОВА Екатерина Андреевна – студентка ИППМ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ekf5va@gmail.com

ЮХНЕВ Андрей Данилович – научный сотрудник кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
a.yukhnev@mail.ru

Gataulin Ya.A., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Fedorova E.A., Yukhnev A.D. WEAKLY SWIRLING FLOW IN A MODEL OF BLOOD VESSEL WITH STENOSIS: NUMERICAL AND EXPERIMENTAL STUDY

Investigation of weakly swirling flow in a model of blood vessel with asymmetrical stenosis has been

performed using both experimental flow measurement techniques (ultrasound Doppler) and computational fluid dynamics methods. A special attention was paid to getting data for the length of reverse-flow zone occurring past the stenosis. It was established that the laminar steady-state flow model was acceptable for numerical analysis of flow past the given geometry stenosis at the Reynolds number values less than 300. At higher values of this parameter, application of the semi-empirical $k-\omega$ SST turbulence model was preferable. It was shown that flow swirl was able to lead to an increase of the reverse-flow zone.

BLOOD VESSEL, SWIRLING FLOW, NONSYMMETRIC STENOSIS, $k-\omega$ SST TURBULENCE MODEL, ULTRASOUND DOPPLER.

REFERENCES

- [1] **U. Morbiducci, R. Ponzini, G. Rizzo, et al.**, In vivo quantification of helical blood flow in human aorta by time-resolved three-dimensional cine phase contrast magnetic resonance imaging, *Annals of Biomedical Engineering*. 37(3) (2009) 516–531.
- [2] **P.A. Stonebridge, C.M. Brophy**, Spiral laminar flow in arteries? *The Lancet*. 338(8779) (1991) 1360–1361.
- [3] **P.A. Stonebridge, C. Buckley, A. Thompson, et al.** Nonspiral and spiral (helical) flow patterns in stenoses: in vitro observations using spin and gradient echo magnetic resonance imaging (MRI) and computational fluid dynamic modeling, *International Angiology*. 23(3) (2004) 276–283.
- [4] **R.I. Kirsanov, V.P. Kulikov**, Vintovoye (vrashchatelno-postupatelnoye) dvizheniye krovi v serdchnosudistoy sisteme [Helicoidal (rotational-translational) blood movement in the cardiovascular system], *Uspekhi fiziologicheskikh nauk*. 44(2) (2013) 62–78.
- [5] **X. Liu, A. Sun, Y. Fan, X. Deng**, Physiological significance of helical flow in the arterial system and its potential clinical application, *Annals of Biomedical Engineering*. 43(1) (2015) 3–15.
- [6] **M.C. Paul, A. Larman**, Investigation of spiral blood flow in a model of arterial stenosis, *Medical Engineering & Physics*. 31(9) (2009) 1195–1203.
- [7] **F. Linge, M.A. Hye, M.C. Paul**, Pulsatile spiral blood flow through arterial stenosis, *Comput. Methods Biomech Biomed. Engin.* 17(15) (2014) 1727 – 1737.
- [8] **H. Ha, S.J. Lee**, Effect of swirling inlet condition on the flow field in a stenosed arterial vessel model, *Medical Engineering & Physics*. 36(1) (2014) 1119–1128.
- [9] **H. Ha, S.J. Lee**, Effect of pulsatile swirling flow on stenosed arterial blood flow, *Medical Engineering & Physics*. 36 (9) (2014) 1106–1114.
- [10] **A.D. Yuhnev, D.E. Sinitsyna**, The blood vessel models: the technology development for making and following investigation, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. No. 3(153) (2012) 75–79.
- [11] **O. Kitoh**, Experimental study of turbulent swirling flow in a straight pipe, *Journal of Fluid Mechanics*. 225 (1991) 445–479.
- [12] **F.R. Menter**, Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering application, *AIAA Journal*. 32(8) (1994) 1598–1605.

THE AUTHORS

GATAULIN Yakov A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
yakov_gataulin@mail.ru

ZAITSEV Dmitriy K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zaitsev-aero@yandex.ru

SMIRNOV Evgeniy M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
smirnov@physicist.net

FEDOROVA Ekaterina A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
ekf5va@gmail.com

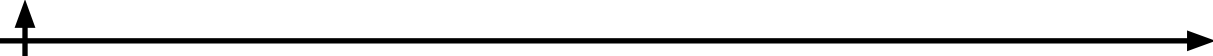


YUKHNEV Andrey D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

a.yukhnev@mail.ru



АТОМНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА КЛАСТЕРОВ И НАНОСТРУКТУР

DOI: 10.5862/JPM.230.4

УДК 539.18

А.А. Митюрева, В.В. Смирнов

Санкт-Петербургский государственный университет

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОДХОДА К ПРЕДСТАВЛЕНИЮ СОВОКУПНОЙ ИНФОРМАЦИИ ПО СЕЧЕНИЯМ ПРОЦЕССОВ РАССЕЯНИЯ

В настоящей работе описан подход к представлению совокупной информации по сечениям элементарных процессов и дается его обоснование в рамках математической статистики. Это вызвано необходимостью совместного учета результатов разных работ, полученных в разное время, в разных группах, на основе экспериментальных и теоретических исследований, в разных энергетических диапазонах. Основное внимание уделяется процессу электронно-атомного рассеяния. В качестве примера применения представлен полученный таким способом совокупный результат по интегральным сечениям возбуждения электронным ударом переходов в атоме водорода.

СЕЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ, ЭЛЕКТРОННОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ, ИНФОРМАЦИОННЫЙ ИСТОЧНИК, РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ.

Введение

Изучение процессов рассеяния заряженных и нейтральных частиц разной природы является одной из важных задач атомной физики. Это относится, в частности, к процессу рассеяния электронов на атомах и определению соответствующих сечений рассеяния [1 – 3].

Известно, что в области физики столкновений многие процессы и объекты исследованы в разной мере, разными методами, с разной степенью достоверности. Вместе с тем, известно также, что нет метода, который давал бы заведомо лучшие результаты по сравнению со всеми остальными, мог бы быть использован для разных переходов и для широкой области энергий взаимодействия. Каждый из методов имеет свои достоинства, свою область применимости и свои особенности; но только в совокупности они могут и должны приводить к повышению надежности и качества получаемого результата.

Среди возникающих здесь проблем целесообразно выделить следующие:

вопросы выбора, т. е. каким результатам и какой именно работы следует отдать предпочтение;

экспертной оценки качества всех полученных результатов (да и не всегда ясно, как ее можно осуществить). Хотя сам факт публикации работы в реферируемом журнале уже является гарантом ее высокого качества, но результаты, приведенные в разных статьях, могут существенно различаться;

вопросы согласования («стыковки») результатов, полученных разными авторами.

В рассматриваемом нами случае часто возникает необходимость в «стыковке» данных, полученных в разных ограниченных энергетических диапазонах. Например, при расчете констант скоростей процессов, протекающих в плазме различных объектов, нужно знать сечение в широкой области энергий возбуждающих электронов.

Таким образом, возникает необходимость совместно учесть достижения по определению сечений электронного рассеяния всеми способами, развитыми в разное время, в разных группах (экспериментальных и теоретических) и в разных энергетических диапазонах.

Рассмотрению указанной проблемы были посвящены наши работы [4 – 10], где был предложен способ представления совокупной информации по исследуемому вопросу. Подход был апробирован на представлении сечений электронного возбуждения таких объектов, как атомы гелия [4 – 7] и аргона [8] из нормального и метастабильных состояний, а также водорода [9] и криптона [10] – из нормального состояния.

Целесообразно остановиться подробнее на обосновании упомянутого подхода.

Теоретические основы представления

Все излагаемое ниже, вообще говоря, относится к представлению совокупной информации в широком диапазоне проблем физики. Однако мы ограничимся рассмотрением процесса рассеяния электронов на атомах.

Хотя решение задачи представления совокупной информации по исследуемому вопросу допускает множество подходов, но мы применяем подход, основанный на математической статистике.

Совокупность всех работ, из которых мы можем извлечь пары величин $\nu = (S, E)$, где $S = Q$ есть сечение (или некоторая функция сечения, например $S = \ln Q$, что не имеет значения с точки зрения рассматриваемого ниже, но полезно при анализе величин, меняющихся в широком диапазоне), а E есть энергия, мы рассматриваем как некий совокупный источник информации W . Отметим, что такой источник является абстракцией и содержит данные всех возможных работ, причем как уже опубликованных, так и будущих. Здесь имеется в виду, что предлагаемый метод обобщения позволяет легко вводить в рассмотрение и все вновь появляющиеся в литературе данные.

Имеющиеся на настоящий момент и доступные нам данные публикаций рассма-

триваются как некоторая выборка из совокупного источника. Нашей задачей является установление зависимости

$$S = \sigma(E) \quad (1)$$

на основе извлекаемой информации.

Поскольку для реальных систем расчет и измерения имеют некоторую погрешность, то при статистическом подходе имеет смысл рассматривать ν как случайную величину, связанную с некоторой функцией распределения $dF(\nu) = f(\nu)d\nu$, описывающей совокупный источник информации по рассматриваемой проблеме.

Естественно предположить, что в совокупности все информационные источники должны воспроизводить истинную связь (1). Это приводит нас к тому, что связь случайных величин (1), т. е. так называемая регрессия S на E , должна соответствовать математическому ожиданию S при условии E :

$$\sigma(E) = M(S | E) = \int S f(S | E) dS, \quad (2)$$

где

$$f(S | E) = \frac{f(S, E)}{f(E)}$$

– плотность условного распределения вероятности.

Этот вывод и составляет теоретическую основу статистического подхода.

Рассмотрим отклонение (невязку) δ для регрессии (1) при произвольной функции σ :

$$\delta(\nu, \sigma) = S - \sigma(E). \quad (3)$$

Условное математическое ожидание отклонения (3) при регрессии вида (2) при каждом значении E для совокупного источника информации равно нулю:

$$M(\delta | E) = \int \delta(S, E, \sigma) f(S | E) dS = 0.$$

Следовательно, полное математическое ожидание отклонения при регрессии вида (2) для совокупного источника информации также равно нулю:

$$M(\delta) = \int \delta(\nu, \sigma) f(\nu) d\nu = 0. \quad (4)$$

Равенство нулю условного (и полного) математического ожидания отклонения соответствует физическому смыслу задачи, а

его отрицание соответствовало бы утверждению о недостижимости истинного (точного) результата.

Величина математического ожидания квадрата отклонения (3), а именно

$$M(\delta^2) = \int \delta(v, \sigma)^2 f(v) dv, \quad (5)$$

при регрессии вида (2) в силу (4) равна квадрату дисперсии отклонения (3):

$$M(\delta^2) = D(\delta)^2. \quad (6)$$

Как известно, регрессия вида (2) характеризуется тем, что минимум величины математического ожидания квадрата отклонения (5) среди всевозможных функций σ достигается на функции (2) [11, 12], т. е.

$$\begin{aligned} \min_{\sigma} M(\delta^2) &\Rightarrow \sigma(E) = M(S | E) = \\ &= \int S f(S | E) dS. \end{aligned} \quad (7)$$

В результате мы приходим к вариационному принципу, который позволяет находить наилучшее приближение к искомой зависимости (1) в выбранном классе функций.

Рассмотрим теперь совокупный информационный источник как составной. Допустим, что каждый отдельный информационный источник $w \in W$ описывается своей функцией распределения величин v , и обозначим их совместное распределение как

$$dF(v, w) = f(v, w) dv dw.$$

Совокупный источник информации описывается маргинальным распределением

$$f(v) = \int_W f(v, w) dw.$$

При этом с каждым информационным источником связано соответствующее условное распределение величины v :

$$f(v | w) = \frac{f(v, w)}{f(w)}, \quad (8)$$

где $f(w) = \int f(v, w) dv$ – маргинальная плотность распределения источников информации с распределением

$$dF(w) = f(w) dw.$$

Если считать (как мы и будем делать в

дальнейшем), что информационные источники $w \in W$ образуют дискретный (счетный или конечный) набор, то под интегралом следует иметь в виду сумму

$$\int_W \bullet dF(w) \rightarrow \sum_{w \in W} \bullet dF(w).$$

Величину условного математического ожидания отклонения для регрессии (2) при заданных энергии и источнике, а именно

$$M(\delta | E, w) = \int \delta(S, E, \sigma) f(S | E, w) dS, \quad (9)$$

естественно связать с систематической ошибкой источника, например методической ошибкой способа получения сечения при каждой энергии. При этом величина условного математического ожидания отклонения для регрессии (2) по всем энергиям при заданном источнике, которая имеет вид

$$M(\delta | w) = \int \delta(v, \sigma) f(v | w) dv,$$

может оказаться равной нулю и при наличии ненулевых систематических ошибок (9), поскольку ошибки для разных энергий могут иметь разные знаки. Поэтому для характеристики полной методической ошибки лучше использовать величину условного математического ожидания квадрата отклонения регрессии для заданного источника информации:

$$M(\delta^2 | w) = \int \delta(v, \sigma)^2 f(v | w) dv. \quad (10)$$

Для явного представления вкладов отдельных информационных источников запишем, пользуясь распределением (8), величину математического ожидания (5) квадрата отклонения в форме

$$\begin{aligned} M(\delta^2) &= \int \delta(v, \sigma)^2 f(v, w) dv dw = \\ &= \int \delta(v, \sigma)^2 f(v | w) dv f(w) dw, \end{aligned}$$

и через условное математическое ожидание (10) – в форме

$$M(\delta^2) = \int M(\delta^2 | w) dF(w). \quad (11)$$

Это выражение имеет вид взвешенного среднего условных математических ожиданий (10) с весами, которые приписываются информационным источникам $dF(w)$. Отме-

тим, что выполняется условие нормировки

$$\int_w dF(w) = 1.$$

В наших работах выбрано наиболее часто используемое параметрическое задание варьируемого класса функций:

$$S = \sigma(E, p),$$

где p – набор параметров.

О выборе конкретной параметризации будет сказано ниже. Имея в виду параметризацию, далее будем писать в формулах в качестве варьируемой величины параметры p функции σ вместо символа самой функции. Таким образом, задача сводится к поиску минимума (7) величины (5) в зависимости от параметров p , где $\delta(v, p) = S - \sigma(E, p)$.

Выше нами изложена общая схема применения статистического подхода к широкому классу проблем, включая ту, что мы рассматриваем. При этом не имеет значения кем, каким методом, теоретически или экспериментально был получен результат. С точки зрения статистики важно только, каково распределение случайной величины $v = (S, E)$. О ней мы судим только на основе выборок.

Для нахождения величины (5) следует воспользоваться выборкой величин $\{v_i\}$, построенной на основе имеющихся данных по рассматриваемой проблеме:

$$M(\delta^2) = \int \delta(v, p)^2 f(v) dv \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta(v_i, p)^2. \quad (12)$$

Как известно, выборочное среднее, стоящее в правой части равенства (12), сходится по вероятности к математическому ожиданию при увеличении объема выборки, что выражает одну из форм закона больших чисел [11, 12]. Последнее имеет место при условии, что выборка генерируется с плотностью распределения $f(v)$. В качестве простейшей модели следует предположить, что это условие обеспечивается природой совокупного источника информации. В пользу этого может служить то соображение, что на самом деле выборка не зависит от потребителей, а есть результат коллективного действия всех производителей информации. При выполнении указанного

условия замечательно то, что для оценки (12) нет необходимости знать вид неизвестной нам функции распределения f . Отметим попутно, что такую оценку можно рассматривать как оценку интеграла методом Монте-Карло. Ее точность, как следует из центральной предельной теоремы [11, 12], имеет порядок D / \sqrt{n} , где D – дисперсия величины δ^2 , n – объем выборки.

Более строгой моделью может служить предположение, что выборка величин $\{v_i\}$ генерируется с плотностью условного распределения (8) для каждого информационного источника в отдельности. В этом случае формула (12) требует дополнительного обоснования. Для этого воспользуемся представлением дисперсии отклонения в форме (11). С учетом структуры выражения (11) можно разбить выборку на группы по источникам информации.

Пусть $\{w_i\}$ есть выборка объема I из информационных источников. Для каждого выбранного источника с индексом i обозначим случайную величину пар сечений и энергий с плотностью условного распределения (8) как v_i , а соответствующую выборку как

$$\{v_{ij}\}, j = 1, 2, \dots, n_i.$$

Полный объем совокупной выборки равен $n = \sum_{i=1}^I n_i$. Для величины (11) имеем следующую оценку:

$$\begin{aligned} M(\delta^2) &= \int M(\delta^2 | w) dF(w) \approx \\ &\approx \sum_{i=1}^I \frac{dF(w_i)}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \delta(v_{ij}, p)^2. \end{aligned}$$

Предполагается, что каждая выборка $\{v_{ij}\}, j = 1, 2, \dots, n_i$ генерируется источником w_i с неизвестной нам явно плотностью условного распределения (8). Величину $dF(w)$ представим в следующем виде:

$$dF(w) = g(w) \frac{N(w)}{N},$$

где $N(w)$ – емкость источника информации w ; $N = \sum_{w \in W} N(w)$ – суммарная емкость всех источников информации; $g(w)$ – вес, учитывающий остальные факторы (выбор веса будет описан ниже).

Если учесть, что относительную информационную емкость источника можно оценить как $\frac{N(w_i)}{N} \cong \frac{n_i}{n}$, то получим следующую оценку для величины (11):

$$M(\delta^2) = \int M(\delta^2 | w) dF(w) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^I g_i \sum_{j=1}^{n_j} \delta(v_{ij}, p)^2. \quad (13)$$

Если выбрать единичные веса $g(w) = 1$, то формула (13) сводится к средней величине квадрата отклонения регрессии по всей объединенной выборке $\{v_{ij}\}$, и мы приходим к выражению, совпадающему с (12).

Рассмотренная здесь схема с разбиением совокупной выборки на группы характерна для так называемого дисперсионного анализа, разработанного Фишером [13] для учета влияния «систематической» ошибки группы и «случайной» ошибки внутри группы. Эта схема удобна для описания ситуации с разнородными источниками информации, основанными на разных методах получения сечений как теоретических, так и экспериментальных. В рамках этой схемы удобны формулировка и проверка статистических гипотез, учитывающих разбиение на группы.

Для приложений, в частности для рассматриваемого нами случая электронно-атомного возбуждения, определенный интерес представляет, например, проверка условия выхода систематической ошибки парциального источника из определенных границ. Предположим, что параметры аппроксимации сечения определены из условия минимизации математического ожидания квадрата отклонения (13). Сформулируем для выбранного источника информации w_i следующую гипотезу относительно величины условного математического ожидания (10) квадрата отклонения регрессии:

$$M(\delta^2 | w_i) \geq M(\delta^2). \quad (14)$$

Известно [11 – 13], что для проверки этой гипотезы можно воспользоваться статистикой

$$y = \frac{\langle \delta_i^2 \rangle - M(\delta^2)}{S_i \sqrt{n_i}}, \quad (15)$$

где

$$\langle \delta_i^2 \rangle = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_j} \delta_{ij}^2$$

– выборочное среднее случайной величины квадрата отклонения регрессии $\delta_i = \delta(v_i, p)$ информационного источника w_i ;

$$S_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_j} (\delta_{ij}^2 - \langle \delta_i^2 \rangle)^2$$

– квадрат соответствующей выборочной дисперсии.

В модели Неймана – Пирсона критерий отбрасывания гипотезы (14) на уровне значимости α основан на критической области

$$\Omega = \{y | y \leq Y\}$$

для статистики (15).

При попадании этой статистики в критическую область гипотеза отбрасывается. При этом вероятность ошибки отбрасывания верной гипотезы (ошибки первого рода) не превосходит величину

$$\alpha = \int_{\Omega} \varphi(y) dy, \quad (16)$$

где $\varphi(y)$ – распределение статистики (15).

Остановимся на вопросе о распределении статистики (15).

Ее можно в принципе получить из распределений условных отклонений

$$F(\delta | w) = \int_{\{v | \delta(v, p) < \delta\}} \delta(v, p) f(v | w) dv, \quad (17)$$

которые, как утверждалось выше, нам не известны.

Иногда полагают, что отклонения имеют нормальные распределения с неизвестными параметрами. Справедливость предположения о нормальности распределения может быть обоснована с помощью центральной предельной теоремы математической статистики в том случае, если отклонения являются суммой вкладов большого числа составляющих с неизвестным распределением. Однако, даже если такое предположение верно для сечения, то оно может оказаться несправедливым для функции от сечения. Так например, отклонения логарифма сечения могут не иметь нормального распределения.

Задачу можно существенно упростить, если рассмотреть случай, когда объем выборки достаточно велик. Тогда, согласно центральной предельной теореме, распределение числителя выражения (15) можно аппроксимировать нормальным распределением независимо от распределения (17). Квадрат выборочной дисперсии в знаменателе выражения (15) стремится к дисперсии. Таким образом, распределение (15) можно аппроксимировать стандартным нормальным распределением с плотностью

$$\varphi(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right).$$

Заметим, что в случае нормального распределения величин квадратов отклонений δ_i^2 статистика (15) имеет t -распределение Стьюдента с $m = n_i - 1$ степенями свободы t_m , которое при большом значении m стремится к нормальному распределению. Однако, как и для отклонений логарифмов, предположение о нормальности распределения величин квадратов отклонений может оказаться неоправданным.

В связи с рассмотренным выше статистическим подходом, следует сделать следующее важное замечание. Как известно, любые утверждения об истинности или ложности гипотез в рамках статистического подхода носят не абсолютный, а вероятностный характер и зависят от выбора уровня значимости, что вносит большую степень субъективизма. К проблеме субъективизма примыкает также вопрос выбора весов парциальных информационных источников, к обсуждению которого мы и переходим.

В наших работах указанный выбор делается по следующему принципу. Данные, взятые из реферируемых журналов, берутся с единичным весом $g_i = 1$. Остальные источники берутся с нулевым весом $g_i = 0$, т. е. не учитываются. Такая модель оправдана тем, что соответствующие результаты прошли экспертную проверку. Попытка проведения более дифференцированного различения неизбежно вносит большой элемент субъективизма. По указанным выше соображениям применение статистических методов не устраняет этот субъективизм.

В этой связи можно указать также на опыт использования подобного подхода в работе [14]. В этой статье представлен совокупный результат по одной проблеме из области физики столкновений, полученный на основе совокупности различных работ; рассмотрены разные варианты оценки использованных публикаций. В результате авторы приходят к выводу, что любые оценки вносят слишком большую степень субъективизма. С другой стороны, оценка на уровне экспертизы в реферируемых изданиях представляется вполне надежной. Образно говоря, при взвешивании информационных источников получается результат, верный (с учетом погрешности его получения) по мнению автора, проводившего взвешивание; тогда как при нашем подходе получается результат, учитывающий мнение большого коллектива экспертов.

Теперь рассмотрим вопрос о выборе аппроксимации для сечения.

Проблема здесь состоит в следующем. С одной стороны, чем полнее набор варьируемых функций, тем точнее он может передать искомую зависимость. Для этого он должен содержать большой набор параметров (например, констант разложения по полному функциональному базису). С другой стороны, при большом числе параметров задача их восстановления становится неустойчивой.

Для оптимального выбора числа параметров следует учесть информацию об особенностях предполагаемой зависимости. Из общих соображений известно, что функция возбуждения (т. е. зависимость величины сечения возбуждения от энергии возбуждающих электронов $Q(E)$, взятая в относительной мере) имеет порог, проходит через максимум при некоторой энергии (в некоторых случаях со структурой) и спадает при больших энергиях. Пороговая зависимость сечения в ряде моделей имеет вид $Q \sim v$, где $v \sim \sqrt{E}$ — скорость сталкивающихся частиц [3, 15].

Известно [3, 15, 16], что при больших энергиях для переходов, идущих при обмене налетающего электрона на валентный, сечение спадает по закону E^{-3} , а для без-

обменных переходов — по закону E^{-1} (или $\ln E / E$).

Мы ставим задачу представления сглаженного сечения, обладающего четырьмя характерными признаками:

- характером пороговой зависимости;
- величиной в максимуме;
- положением максимума;

характером спада при больших энергиях. Соответственно, для передачи этих особенностей рассматриваем четырехпараметрическую аппроксимацию сечения возбуждения $\sigma(E, p) = Q(E)$ электронным ударом в виде

$$Q(E) = p_0 \left(\frac{u}{u+1} \right)^{p_1} (u + p_2)^{-p_3}, u = \frac{E}{\Delta E} - 1, \quad (18)$$

где E — энергия электронов, ΔE — порог возбуждения, $p = (p_0, p_1, p_2, p_3)$ — искомые параметры.

Очень приближенно можно считать, что p_0 задает величину сечения, параметр p_2 влияет на форму кривой $Q(E)$ вблизи максимума и на его местоположение, параметр p_1 отвечает за ход сечения у порога возбуждения, а параметр p_3 учитывает разную асимптотику поведения сечения при больших энергиях налетающего электрона E . Следует, однако, иметь в виду, что параметры сильно взаимосвязаны.

Заметим также, что процедура регрессионного анализа гарантирует качество результата только в том диапазоне энергий, в котором имеются исходные данные. Экстраполяция на больший диапазон энергий может быть необоснованной. В частности, определяемый параметр p_3 может не соответствовать реальной асимптотике сечения (например, $p_3 = 1, 3$) при $E \rightarrow \infty$.

Наш опыт показывает, что конкретный вид самой аппроксимационной формулы не имеет особого значения. В связи с этим перечислим коротко некоторые фигурирующие в литературе аппроксимации. Следует сказать, что они используются авторами для других задач. Одна группа задач связана с представлением своих результатов для передачи особенностей поведения сечений, другая — с построением эмпирических формул для сечений, содержащих в качестве параметров атомные параметры. Функция

$g(x)$, $x = E / \Delta E$ (в записи по Грину) имеет в различных приближениях разный вид, что представлено ниже.

Заметим, что в области электронно-атомного рассеяния некоторые формулы для аппроксимации иногда принято называть по фамилии автора (авторов), т. е. приводимые в статье фамилии авторов скорее относятся именно к формуле, а не к ссылке на работу, в которой она была использована. Таким образом, в литературе используются следующие формулы (приведены далее).

Бете [3, 15]:

$$g(x) = f \frac{\lg x}{x};$$

Томсона [3]:

$$g(x) = \frac{1}{x} \left(1 - \frac{1}{x} \right);$$

Грижинского [17]:

$$g(x) = \frac{1}{x} \left[\frac{x-1}{x+1} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2x} \right) \times \right. \\ \left. \times \ln[2,7 + (x-1)^{\frac{1}{2}}] \right\};$$

Дравина [18]:

$$g(x) = 0,66 \cdot f_1 \frac{1}{x} \left[\frac{x-1}{x^2} \right] \cdot \ln(1,25 \cdot f_2 \cdot x), \\ f_1 = f_2 = 1.$$

Формула Стаблера [19] зависимости сечения возбуждения k -го уровня атома от энергии электронов для безобменных переходов имеет вид

$$Q_{mk} = \pi e^4 \frac{1}{E_1 + E_2 + U_m} \left[\frac{1}{E_k} - \frac{1}{E_{k+1}} + \right. \\ \left. + \frac{2}{3} E_2 \left(\frac{1}{E_k^2} - \frac{1}{E_{k+1}^2} \right) \right], E_1 \geq E_{k+1},$$

а при обмене электронами —

$$Q_{mk} = \pi e^4 \frac{1}{E_1 + E_2 + U_m} \times \\ \times \left\{ \frac{1}{E_1 + U_{k+1}} - \frac{1}{E_1 + U_k} + \frac{2}{3} E_2 \times \right.$$

$$\times \left[\frac{1}{(E_1 + U_{k+1})^2} - \frac{1}{(E_1 + U_k)^2} \right] \Bigg\},$$

$$E_1 \geq U_m - U_{k+1},$$

где E_1, E_2 – соответственно кинетические энергии налетающего и атомного электронов до столкновения, U_m – потенциал ионизации атома в состоянии m .

Формула Берка и Кингстона [20] представлена в виде

$$Q(E) = \frac{A \log E}{E} + \frac{B}{E} + \frac{C}{E^2} + \dots$$

с таблицами параметров A, B, C, \dots для разных уровней и серий. При этом зависимость в серии Q от n имеет вид

$$A \approx \frac{1096}{n^3} + \frac{616,1}{n^4} + \dots,$$

$$B \approx -\frac{1424}{n^3} - \frac{851,0}{n^4} + \dots.$$

Для полных сечений рассеяния электронов на атомах всех инертных газов для энергий выше 100 эВ предложена обобщенная эмпирическая «жесткая» формула:

$$Q(E) = 100(\sqrt{\alpha} - \sqrt{\alpha_0}) \left(\frac{1}{\sqrt{E}} - \frac{1}{\sqrt{E_0}} \right),$$

где $\alpha_0 = 0,11$, $E_0 = 20$ кэВ, α – статическая поляризуемость мишени.

Зависимость сечения возбуждения возбуждения от энергии электронов у Вайнштейна, Собельмана, Юкова [15] представлена как

$$Q(E) = \pi a_0^2 \left(\frac{1}{\Delta E} \right)^2 \left(\frac{E_1}{E_0} \right)^{3/2} \frac{Q_{\kappa_m}}{2l_0 + 1} \Phi(u),$$

где для оптически разрешенных переходов ($l_1 = l_0 \pm 1, \Delta S = 0$) функция $\Phi(u)$ имеет вид

$$\Phi(u) = C \left(\frac{u}{u+1} \right)^{1/2} \frac{\ln(16+u)}{u+\phi},$$

или в записи по Грину –

$$g(x) = \sqrt{\frac{x-1}{x}} \cdot \frac{15+x}{x+\phi};$$

а для оптически запрещенных переходов ($l_1 \neq l_0 \pm 1, \Delta S = 0$) –

$$\Phi(u) = C \left(\frac{u}{u+1} \right)^{1/2} \frac{1}{u+\phi}. \quad (19)$$

Здесь E_0, E_1 – энергии начального и конечного уровней атома при переходе $0 \rightarrow 1$; Q_{κ_m} – Q -фактор, зависящий только от квантовых чисел угловых моментов.

Таков весьма обширный перечень видов представления функции возбуждения.

Используемая нами зависимость (18) близка к аппроксимации Вайнштейна (19) и строилась на основе ее модификации.

В конце этого раздела рассмотрим вопрос об использовании логарифма сечения. Логарифм имеет смысл использовать в том случае, когда рассматриваемая величина сечения меняется в большом диапазоне порядков величин.

Пусть имеется отклонение регрессии (3) для сечений

$$\delta = Q - \sigma(E, p). \quad (20)$$

Рассмотрим отклонение регрессии для логарифмов величин

$$\delta' = \ln(Q) - \ln(\sigma(E, p)). \quad (21)$$

Из представления его в виде

$$\delta' = -\ln \left(1 - \frac{\delta}{Q} \right)$$

следует, что при малых отклонениях величины δ (см. формулу (20)) отклонение логарифмов δ' (формула (21)) приближается к относительному отклонению

$$\delta' \approx \frac{\delta}{Q}.$$

В связи с этим дисперсию (6) отклонений логарифмов мы называем относительной дисперсией (для краткости).

Результаты исследований для атома водорода

В этом разделе приводятся данные по электронному возбуждению в атоме водорода, полученные на основе описанного выше подхода, по данным из имеющихся источников информации [9].

Задача о рассеянии электронов на атомах водорода и определение сечений такого рассеяния, в частности сечений электрон-

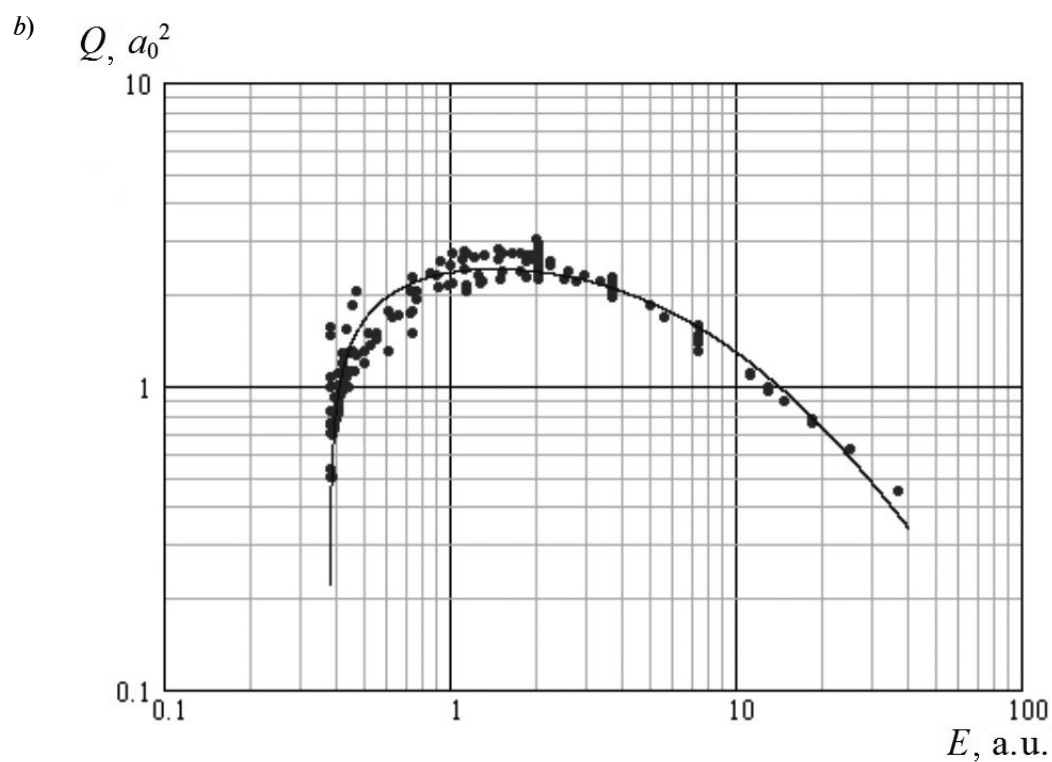
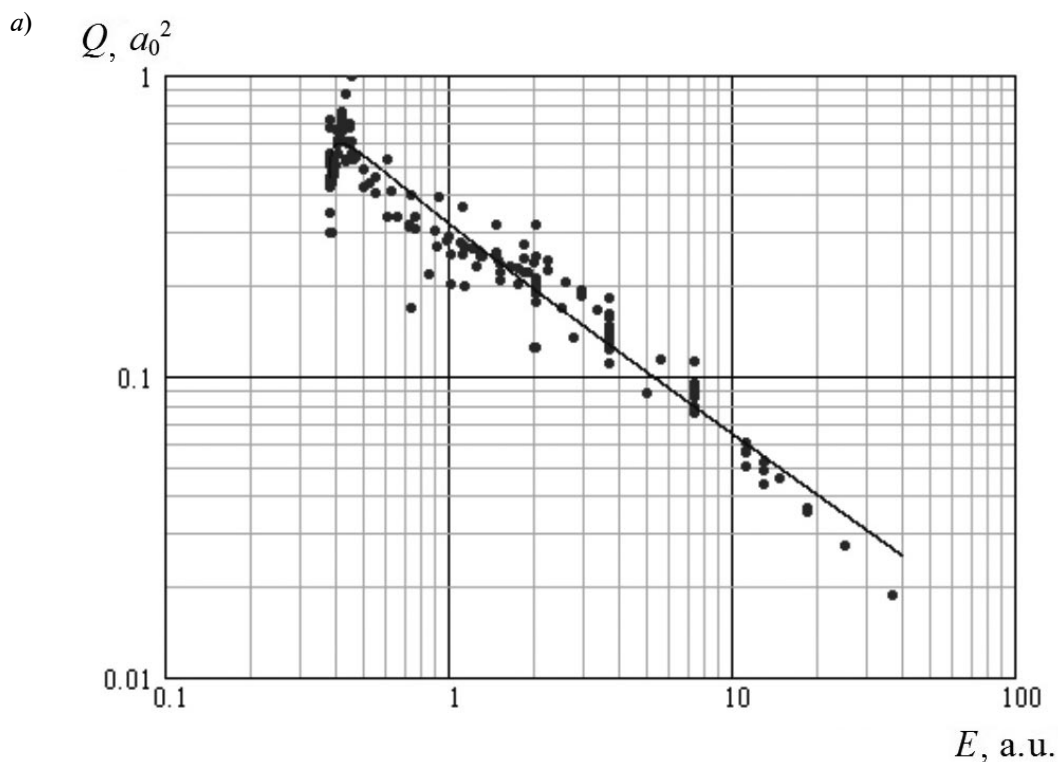


Рис. 1. Сечения электронного возбуждения переходов $1s \rightarrow 2s$ (a) и $1s \rightarrow 2p$ (b) в атоме водорода в зависимости от энергии возбуждающих электронов. Точки – данные из различных источников, линии – регрессионные кривые. Все величины приводятся в атомной системе единиц.

Таблица

Совокупные результаты по сечениям электронного возбуждения переходов $1s \rightarrow 2s, 2p$ в атоме водорода

Верхний уровень	p_0, a_0^2	p_1	p_2	p_3	D	$E_{\max}, \text{ а. е.}$	Q_{\max}, a_0^2
2s	0,572	0,103	0,554	0,67	0,25	0,41	0,59
2p	982	0,448	35,4	1,61	0,26	1,43	2,43

Обозначения: p_0, p_1, p_2, p_3 – параметры аппроксимации; D – величина выборочной относительной дисперсии; E_{\max}, Q_{\max} – энергия и величина сечения в максимуме функции возбуждения.

ного возбуждения различных уровней атома водорода, относится к одной из наиболее часто и давно исследуемых задач атомной физики столкновений вследствие сравнительной простоты объекта исследования. Однако, как оказалось при более подробном ознакомлении с литературными источниками, решение этого вопроса еще далеко до полного завершения, и проведенные исследования разными методами дают неодинаковые результаты. По приведенным данным можно судить, насколько они различаются.

Наибольшее количество работ по электронному возбуждению атома водорода приходится на исследование переходов $1s \rightarrow 2s, 2p$. Для других переходов опубликовано заметно меньше данных.

Для анализа имеющихся результатов нами был использован подход, описанный выше. Применялась четырехпараметрическая аппроксимация зависимости сечений возбуждения от энергии электронов (18). Отклонение регрессии (3) строилось для логарифмов величин сечений, т. е. имело вид (21). Были найдены соответствующие параметры аппроксимации и величины выборочной совокупной относительной дисперсии (13). Информационные источники брались с одинаковым весом $g_i = 1$.

Для переходов $1s \rightarrow 2s, 2p$ в атоме водорода в таблице представлены полученные параметры аппроксимации $p_0, p_1 - p_3$, величина выборочной относительной дисперсии D , энергия и величина сечения в максимуме функции возбуждения E_{\max}, Q_{\max} . Рис. 1 иллюстрирует исходные данные из различных

информационных источников и аппроксимационные кривые, определенные описанным образом. Хорошо виден разброс данных по информационным источникам (все величины приводятся в атомной системе единиц).

Для парциальных источников информации с данными, наиболее сильно отличающимися от регрессионной кривой, проверялась гипотеза (14) о превышении систематической ошибки источника величины выборочной совокупной дисперсии (13). Во всех случаях наименьшее значение вероятности ошибки отбрасывания верной гипотезы (ошибки первого рода) (16) составляет величину, близкую к $\alpha = 0,5$.

Заключение

В статье рассмотрен подход к представлению совокупной информации по сечениям электронно-атомного рассеяния в рамках математической статистики на основе регрессионного анализа. Такой подход позволяет учитывать весь набор доступных значений сечения, полученных независимо разными авторами с использованием разных теоретических и экспериментальных методов, а также в разных условиях. Примечательно, что обсуждаемый подход позволяет также объединить в одной кривой, описывающей взаимосвязь величин Q и E , результаты различных методов, полученных в ограниченном узком диапазоне энергий электронов, и распространить его на соответствующий широкий диапазон энергий. При этом широкий диапазон таков, что в нем данные конкретных методик нельзя

экстраполировать в области энергий, лежащие за пределами своих определенных интервалов значений. Этот вывод очень важен для плазменных приложений, которые требуют знания констант скоростей в широком диапазоне энергий электронов.

Из общих принципов статистики следует, что результаты, полученные на основе

описанного подхода, представляются более надежными, чем данные любого конкретного информационного источника.

Стоит отметить, что подход может быть применен не только к рассматриваемой проблеме, но и к представлению агрегированной информации в других областях исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Сунакава С. Квантовая теория рассеяния. М.: Мир, 1979.
- [2] Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. Спб.: Изд-во «Лань», 2010.
- [3] Друкарев Г.Ф. Столкновения электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.
- [4] Митюрева А.А., Смирнов В.В. Аппроксимация энергетических зависимостей сечений электронного возбуждения атома гелия // Оптика и спектроскопия. 1993. Т. 74, Вып. 1. С. 6–11.
- [5] Митюрева А.А., Смирнов В.В. Аппроксимация энергетических зависимостей сечений электронного возбуждения атомных уровней гелия из метастабильных состояний // Оптика и спектроскопия. 1999. Т. 86. Вып. 6. С. 933–938.
- [6] Митюрева А.А., Смирнов В.В., Пономаренко Г.А. Аппроксимация сечений электронного возбуждения триплетных уровней гелия из метастабильного состояния 2^3S_1 // Оптика и спектроскопия. 2002. Т. 92. Вып. 3. С. 368–374.
- [7] Mityureva A.A., Smirnov V.V. Electron impact excitation cross sections of helium atom levels from the 2^3S_1 metastable state according to experiment and theory // Russian Journal of Physical Chemistry. 2002. Vol. 76. No. 1. Pp. S109–S114.
- [8] Митюрева А.А., Смирнов В.В. Электронное возбуждение атомов аргона в метастабильные состояния и из метастабильных в вышележащие // Оптика и спектроскопия. 2004. Т. 97. Вып. 4. С. 544–558.
- [9] Митюрева А.А., Смирнов В.В. Интегральные сечения электронного возбуждения уровней атома водорода // Оптика и спектроскопия. 2006. Т. 101. Вып. 3. С. 360–365.
- [10] Mityureva A.A. Electron-impact excitation of Kr 5s, 5p levels // World Academy of Science. Engineering and Technology. 2011. No. 59. Pp. 949–952.
- [11] Корн Г.А., Корн Т.М. Справочник по математике. М.: Наука, 1973.
- [12] Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. М.: Наука, 1985.
- [13] Шеффе Г. Дисперсионный анализ. Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1963.
- [14] Rudd M.E., Kim Y.K., Madison D.H., Gallagher J.W. Electron production in proton collisions: total cross sections // Rev. Mod. Phys. 1985. Vol. 57. No. 4. Pp. 965–994.
- [15] Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М., Наука, 1973.
- [16] Очкур В.И. О методе Борна – Оппенгеймера в теории атомных столкновений // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 3(9). С. 734–741.
- [17] Grizinski M. Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions // Phys. Rev. 1965. Vol. 138, No. 2. Pp. 336–358.
- [18] Dravin H.W. Zur formelmässigen Darstellung der Ionisierungsquerschnitte gegenüber Elektronenstoss // Zs. Phys. 1961. Vol. 164. Pp. 513–521.
- [19] Stabler R.C. Classical impulse approximation for inelastic electron-atom collisions // Phys. Rev. A. 1964. Vol. 133. No. 5. Pp. 1268–1274.
- [20] Fon W.C., Berrington K.A., Burke P.J., Kingston A.E. Total cross sections for electron excitation transitions between the 1^1S , 2^3S , 2^1S , 2^3P and 2^1P states of atomic helium // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. No. 16. Pp. 2921–2934.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МИТЮРЕВА Алла Александровна — доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики Санкт-Петербургского государственного университета.

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7 – 9
 mitalal@mail.ru

СМИРНОВ Валерий Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики Санкт-Петербургского государственного университета.

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7 – 9

valery_smirnov@mail.ru

Mityureva A.A., Smirnov V.V. THEORETICAL BASE OF THE APPROACH TO THE REPRESENTATION OF AGGREGATE INFORMATION ON THE CROSS SECTIONS OF THE SCATTERING PROCESSES.

In the present paper, the approach to the representation of aggregate information on the cross sections of elementary processes is described and its justification within mathematical statistics is given. It is caused by necessity of integrated account of the results obtained by different works at different times, in different groups, based on experimental and theoretical studies in various energy ranges. The main attention is paid to the process of electron-atom scattering. As an example of the proposed approach application, the aggregate result on thus obtained integral cross sections of electron impact excitation of the transitions in the hydrogen atom is presented.

SCATTERING CROSS SECTION, ELECTRON EXCITATION, INFORMATION SOURCE, REGRESSION ANALYSIS.

REFERENCES

- [1] **S. Sunakava**, Quantum theory of scattering, Moscow, Mir, 1979.
- [2] **S.E. Frish**, Optical spectra of atoms, Publ. "Lan", 2010.
- [3] **G.F. Drukarev**, Collisions of electrons with atoms and molecules. Moscow, Nauka, 1978.
- [4] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov**, Electron excitation cross section energy behaviour approximation for helium atom, *Opt & Spectr.* 74(1) (1993) 6–11.
- [5] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov**, Approximation of energy dependences of the cross sections for electron excitation of atomic levels of helium from metastable states, *Optics & Spectroscopy.* 86(6) (1999) 833–837.
- [6] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov, G.A. Ponomarenko**, Approximation of the electron excitation cross sections for triplet states excited from the 2^3S_1 Metastable State in Helium, *Optics & Spectroscopy.* 92(3) (2002) 325–331.
- [7] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov**, Electron impact excitation cross sections of helium atom levels from the 2^3S_1 metastable state according to experiment and theory, *Russian Journal of Physical Chemistry,* 76(1) (2002) S109–S114.
- [8] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov**, Electronic excitation of Ar atoms to metastable states and from metastable to higher states, *Optics & Spectroscopy.* 97(4) (2004) 508–521.
- [9] **A.A. Mityureva, V.V. Smirnov**, Integral electronic excitation cross sections of hydrogen atom levels, *Optics & Spectroscopy.* 101 (3) (2006) 338–343.
- [10] **A.A. Mityureva**, Electron-impact excitation of Kr 5s, 5p levels, *World Academy of Science, Engineering and Technology.* Iss. 59 (2011) 949–952.
- [11] **G.A. Korn, T.M. Korn**, Handbook of mathematics, Moscow, Nauka, 1973.
- [12] **V.S. Koroljuk, N.I. Portenko, A.V. Skorokhod, A.F. Turbin**, Handbook of the theory of probability and mathematical statistics. Nauka, Moscow, 1985.
- [13] **H. Scheffe**, The analysis of variance, John Wiley & Sons Inc., USA, 1999.
- [14] **M.E. Rudd, Y.K. Kim, D.H. Madison, J.W. Gallagher**, Electron production in proton collisions: total cross sections, *Rev. Mod. Phys.* 57 (4) (1985) 965–994.
- [15] **L.A. Vainshtein, I.I. Sobelman, E.A. Yukov**, The cross sections for the excitation of atoms and ions by electrons, Oxford, Pergamon Press, 1973.
- [16] **V.I. Ochkur**, On the Born-Oppenheimer method in the theory of atom collisions, *JETF.* 45(3(9)) (1963) 734–741.
- [17] **M. Grizinski**, Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions, *Phys. Rev.* 138(2) (1965) 336–358.
- [18] **H.W. Dravin**, Zur formelmässigen Darstellung der Ionisierungsquerschnitte gegenüber Elektronenstoss, *Zs. Phys.* 164 (1961) 513–521.
- [19] **R.C. Stabler**, Classical impulse approximation for inelastic electron-atom collisions, *Phys. Rev. A.* 133(5) (1964) 1268–1274.
- [20] **W.C. Fon, K.A. Berrington, P.J. Burke, A.E. Kingston**, Total cross sections for electron excitation transitions between the 1^1S , 2^3S , 2^1S , 2^3P and 2^1P states of atomic helium, *J. Phys. B.* 14(16) (1981) 2921–2934.

THE AUTHORS

MITYUREVA Alla A.

St. Petersburg State University

Universitetskaya emb., 7–9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation

mitalal@mail.ru

SMIRNOV Valeriy V.

St. Petersburg State University

Universitetskaya emb., 7–9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation

valery_smirnov@mail.ru

ГРУБЫЕ ОЦЕНКИ И БИНОМИАЛЬНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ В ПРЕДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ КРОККО

Для решения предельных задач Крокко, известных как типичная и однородная, использованы биномы (в качестве аппроксимантов точного решения), а также интегральные тождества. Получена оценка степени близости точного решения к его аппроксимации по величине $\varphi(0)$. Доказано, что решение типичной предельной задачи Крокко имеет логарифмическую особенность дери- ватива при $\varphi = 0$; уравнение Крокко предоставляет необходимое и достаточное условия минимума положительного распределения, выпуклого по $d\varphi/dh$. Показано, что однородная предельная задача Крокко эквивалентна двум типичным предельным задачам Крокко с общей критической точкой.

ПРЕДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА КРОККО, АППРОКСИМАЦИЯ, ВЫПУКЛОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ, МИНИМУМ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО ФУНКЦИОНАЛА.

Введение

Для уравнения Крокко

$$\varphi d^2\varphi / dh^2 + 0,5f(h) = 0, \quad (1)$$

заданного на промежутке $0 < h < 1$, причем $f(h) > 0$, $f \in L_1(0, 1)$, возможна постановка разных предельных задач.

Прежде всего, может быть поставлена типичная предельная задача:

$$(d\varphi / dh)_{h=0} = \varphi(1) = 0. \quad (2)$$

Помимо этой, может быть поставлена предельная задача, однородная по $\varphi(h)$:

$$\varphi(0) = \varphi(1) = 0; \quad (3)$$

а также смешанная однородная предельная задача:

$$\begin{aligned} a_0(d\varphi / dh)_{h=0} + b_0\varphi(0) = \\ = a_1(d\varphi / dh)_{h=1} + b_1\varphi(1) = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

с действительными параметрами a_i, b_i , $i = 0, 1$.

Предельные задачи (1) – (4) имеют фи-

зическую основу и связаны с описанием явлений диффузии, теплопроводности, а также струйных и пристеночных вязких пограничных слоев.

В работе [1] предлагается использовать при решении типичной предельной задачи Крокко для случая $f(h) = h$ вместо постановки (2) условия Коши:

$$\varphi(0) - \alpha = (d\varphi / dh)_{h=0} = 0, \quad (2a)$$

причем постоянную α можно подобрать так, чтобы $\varphi(1) = 0$.

В более точной формулировке утверждается следующее:

Пусть $\varphi = \varphi(h, \alpha)$ и $\varphi(1, \alpha) = 0$. Тогда

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \eta = \eta(\varepsilon) \Rightarrow |\varphi(1, \beta)| < \varepsilon, |\beta - \alpha| < \eta.$$

Следует отметить, что данное утверждение есть не что иное, как теорема о непрерывной зависимости решения дифференциального уравнения от параметров [2].

В работе [1] доказано, что точка $h = 1$ есть подвижная особенность задачи Коши (1), (2a):

$$d\varphi / dh \xrightarrow{h \rightarrow 1-0} -\infty$$

[1, 3], но $d\varphi^2 / dh \xrightarrow{h \rightarrow 1-0} -0$.

Анализ имеющихся результатов

Анализ работы [1] показывает, что на самом деле доказано нечто большее, а именно, что радиус сходимости плоского ряда для дериватива $d\varphi/dh$ равен единице [1, 3, 4].

Можно конкретизировать этот результат. Пусть $\alpha > 0$ – такое значение $\varphi(0)$, при котором $\varphi(1, \alpha) = 0$ и $\beta > 0$ (β – любое произвольное значение $\varphi(0)$, такое, что $\varphi(h_0) = 0$). Тогда

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0 \Rightarrow |\beta - \alpha| < \varepsilon \rightarrow |1 - h_0| < \delta.$$

Это определение описывает алгоритм «пристрелки». Значение константы α можно найти методом «пристрелки». Согласно этому методу, задается $\alpha > 0$ и решается задача Коши (1), (2а). Если значение $\varphi(h_0 < 1, \alpha) = 0$, то значение α следует увеличить; если $\varphi(h_0 > 1, \alpha) = 0$, то α необходимо уменьшить (рис. 1).

Можно нормировать h и φ следующим образом:

$$h = z / r, \varphi = \alpha\Phi, \Phi = \Phi(z), \\ 0 < z < r, 0 < \Phi < 1,$$

что означает $\Phi: h \in (0, r) \rightarrow \Phi \in (0, 1)$, т. е. переменная h изменяется в промежутке $(0, r)$, а переменная Φ изменяется в промежутке $(0, 1)$ [4].

Тогда предельную задачу (1), (2) в новых обозначениях перепишем в таком виде:

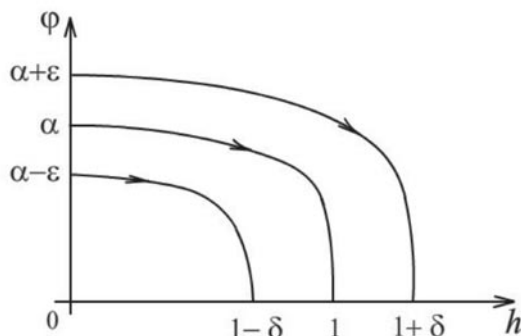


Рис. 1. Зависимость $\varphi(h)$, поясняющая суть алгоритма метода пристрелки

$$2\alpha^2 r^3 \Phi d^2 \Phi / dz^2 + z = 0, \\ \Phi(0) - 1 = (d\Phi / dz)_{z=0} = \Phi(r) = 0.$$

Для полного совпадения с предельной задачей Крокко положим $r = \alpha^{-2/3}$, или $\alpha = r^{-3/2}$, и, следовательно, увеличение α приводит к уменьшению радиуса сходимости r и наоборот. Таким образом, можно утверждать, что

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta = \delta(\varepsilon, \alpha) > 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow -\delta < r(\alpha + \varepsilon) - r < r(\alpha - \varepsilon) - r < \delta.$$

Далее легко подсчитать, что

$$\delta = 2/3\varepsilon\alpha^{-5/3} + O(\varepsilon^2).$$

Следовательно, сходимость процесса пристрелки является неравномерной по α и ухудшается с уменьшением значения α .

Для реализации пристрелки воспользуемся методом неподвижной точки, для чего реализуем последовательность Коши; полнота (нормированного) кольца C^1 гарантирует сходимость (этот прием известен в линеаризованном виде [5]).

Пусть

$$2\varphi_{k-1} d^2 \varphi_k / dh^2 + f(h) = 0,$$

где нижний индекс означает номер итерации.

Очевидно, что данное уравнение представляет собой итерационный аналог уравнения (1). Тогда

$$\varphi_k(h) = \alpha - \int_0^h (h-z)f(z) / \varphi_{k-1}(z) dz$$

есть итерированное решение задачи Коши (1), (2а). Следовательно,

$$\alpha = \int_0^1 (1-z)f(z) / \varphi_{k-1}(z) dz.$$

Далее полагаем, что $f(h) = h$. Тогда если в нулевом приближении $\varphi_0(h) = \alpha$, то $\varphi_1(h) = (1 - h^3)/12$. В первом приближении получаем $\alpha = 12^{-1/2} = 0,2887$, что меньше соответствующего точного значения на 13 %.

Записав это решение в виде

$$\varphi_0(h) = \alpha - h^3/(12\alpha),$$

получаем, что

$$\partial\varphi(1, \alpha)/\partial\alpha = 1 + 1/(12\alpha^2) > 0.$$

Отсюда следует, что значение $\varphi(h, \alpha)$

вблизи правого конца промежутка $h \in (0, 1)$ не убывает при увеличении α , чем и объясняется алгоритм пристрелки.

Во втором приближении

$$\alpha = \sqrt{3} / 2 \ln 3 - \pi / 6 = 0,4278,$$

что больше точного значения на 30 %. Среднее значение постоянной α (ее релаксация) по первым двум приближениям составляет 0,3514, что дает погрешность уже в 6 %.

В предельной задаче (1), (3) точка $h = 1 - 0$ представляет особенность для дериватива, а именно – при $h \rightarrow 1 - 0$, $d\varphi/dh \rightarrow -\infty$.

Можно доказать (и это будет сделано далее), что возникающая сингулярность дериватива имеет логарифмический тип и при этом $\lim_{h \rightarrow 1-0} \varphi d\varphi / dh = 0$. Следовательно, $\varphi^2(h)$ – регулярированная на промежутке $0 < h < 1$ функция. Это свойство квадрата решения типичной предельной задачи Крокко дальше используется для оценки параметров решения.

Цель настоящей работы – получить грубые апостериорные оценки решений предельной задачи Крокко, аппроксимирующие точные решения в среднем.

Постановка задачи

Для приближенных оценок решений предельных задач (1) – (4) в целом (т. е. на промежутке $0 < h < 1$) достаточны интегральные тождества, получаемые из предельных задач.

Указанные оценки мы относим к грубым, так как они выполняются в среднем для промежутка $0 < h < 1$ с некоторыми весами (ядрами), т. е. приближаются к решению в слабой топологии. При этом значения констант решения вычисляются с невысокой точностью (погрешность не ниже 1,5 %). Интегральные же тождества связаны с условием экстремума некоторого распределения. Точные значения констант задачи, как доказано в работе [6], определяются из равномерных разложений решения.

Например, в качестве приближенного решения задачи Крокко (1), (2), (2а) на промежутке $0 < h < 1$ можно использовать бином

$$\varphi(h) = \beta(1 - h^m)$$

с двумя константами: m и β . Постоянная β задает приближенное значение $\varphi(0)$, т. е. $\beta = \varphi(0)$. Значение показателя степени m должно быть немалым, поскольку значение дериватива $d\varphi/dh$ в точке $h=1-0$ не мало.

Например, если $f(h) = h$, то $\beta = \sqrt{7} / 8$, $m = 4$ (эта оценка грубая).

Действительно, константа α аппроксимирована с погрешностью в 1 %, тогда как точное значение равно примерно 1/3.

Здесь следует отметить, что В.П. Варинным анонсировано рекордное по точности значение $\alpha = 0,33205\dots$ (на 32 разряда!), и точность не ограничена [1, 3] (см. также краткое резюме в работе [4]).

Кроме вышеизложенного, для степенных рядов, связанных с предельной задачей Крокко, применяется аппроксимация Паде [5] (вопросы сходимости интерполяционного процесса выходят за рамки данного исследования и здесь не рассматриваются). Детальное изучение Паде-аппроксимации для задач сильной аппроксимации отрезков степенных рядов, аналитического продолжения и решений предельных задач, кроме классических монографий А.А. Гончара, С.П. Сутина, имеется в работах [7, 8]. Наконец, в связи нелинейными задачами в большой работе [9] изучены дифференциальные уравнения с квадратичной нелинейностью (там же приводится история вопроса и обширные дальнейшие ссылки). Близкая по тематике работа [10] содержит лиевы группы преобразований для уравнения пограничного слоя Крокко при градиентном (неравномерном) внешнем течении и соответствующие этим группам решения.

Основные (предваряющие) тождества

Для решения поставленных задач необходимо доказать следующую теорему, выражающую свойства решения типичной предельной задачи (1), (2).

Теорема 1. *В обеих предельных задачах для уравнений (1) – (3) выполняются следующие условия:*

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 1-0} \varphi d\varphi / dh &= 0, \\ \lim_{h \rightarrow +0} \varphi d\varphi / dh &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Доказательство 1. Действительно, в силу уравнения Крокко (1) справедливо следующее равенство:

$$2\varphi d\varphi / dh + \varphi(h) \int_0^h f(z) dz / \varphi(z) = 0,$$

и при $h = 0$ теорема 1 выполняется.

Далее, рассмотрим условия (2). В этом случае можно записать:

$$\begin{aligned} (d\varphi^2 / dh)_{h=1} &= - \lim_{h \rightarrow 1-0} \varphi(h) \int_0^h f(z) dz / \varphi(z) = \\ &= (0 \times \infty) = \lim_{h \rightarrow 1-0} \frac{f(h)\varphi(h)}{\varphi'(h)} = 0, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. Аналогично проверяются предельные условия (3), что и требовалось доказать.

Ниже приводится еще одно доказательство этой теоремы, использующее первый интеграл предельной задачи Крокко.

Доказательство 2. Понижим порядок в уравнении (1).

Пусть $\psi := d\varphi / dh$, и тогда уравнение (1) принимает вид

$$d\psi^2 / d \ln(1 / \varphi) - f(h) = 0. \quad (1a)$$

Пусть в условиях предельной задачи (1) $\alpha := \varphi(0)$. Тогда получаем выражение

$$\psi = \sqrt{\mp \int_0^{\ln(\alpha/\varphi)} f(h) dz}.$$

В предельной задаче (2), очевидно, берется выражение с верхним знаком (минус). Если $f(z)$ — возрастающая функция, то интеграл под корнем расходится, но получается еще одно полезное тождество:

$$\lim_{\varphi \rightarrow 0} \varphi\psi = 0,$$

и это еще одно доказательство.

Теорема доказана дважды.

Для получения важных следствий доказанной теоремы 1 удобно ввести переменную

$$\omega := \ln(\varphi / \alpha) \in (0, \infty).$$

Тогда уравнение (1a) принимает следующий вид:

$$d\psi^2 / d\omega - f(h) = 0. \quad (1б)$$

Пусть $f(h) = h$. Тогда в силу уравнения

(1б) получаем уравнение

$$d\psi^2 / d\omega - h = 0. \quad (1в)$$

Решение этого уравнения такое, что равенство $\psi(0) = 0$ принимает вид

$$\psi := d\varphi / dh = - \sqrt{\int_0^\omega h(\tau) d\tau},$$

или

$$\alpha \exp(-\omega) d\omega / dh = \sqrt{\int_0^\omega h(\tau) d\tau}. \quad (6)$$

Для решения уравнения первого порядка (6) остается разделить переменные.

Поскольку $h(\omega)$ представляет собой монотонно-возрастающее распределение, т. е.

$$h(0) = h(\infty) - 1 = 0,$$

то по второй теореме о среднем (формулы Бонне) можно записать:

$$\begin{aligned} \exists \omega^*, 0 < \omega^* < \omega < \infty \Rightarrow \int_0^\omega h(\tau) d\tau = \\ = h(\omega)(\omega - \omega^*) = \sigma \omega h(\omega), \end{aligned}$$

где $\sigma := 1 - \omega^* / \omega \leq 1$.

Следовательно, в силу уравнения (6), справедливо равенство

$$\alpha \exp(-\omega) d\omega / \sqrt{\omega} = \sqrt{\sigma} h d h,$$

интегрируя которое с учетом начального условия (2), получаем:

$$\alpha \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}) = \int_0^h \sqrt{\sigma z} dz.$$

Пусть σ — постоянная, $\sigma = \sigma_m$, и тогда

$$\alpha \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}) = 2 / 3 \sqrt{\sigma_m} h^3.$$

Пусть $h = 1$. Тогда получаем следующее значение величины α :

$$\alpha = 2 / 3 \sqrt{\sigma_m / \pi}. \quad (7)$$

Использование теоремы 1 и следствий из нее дает возможность получать неравенства и оценки, позволяющие построить приближенные решения уравнения Крокко.

Во-первых, справедливо неравенство $\psi^2 - \omega h(\omega) \leq 0$.

Действительно, по определению:

$$\frac{\Psi^2}{\omega h(\omega)} = \frac{\int_0^\omega h(\tau) d\tau}{\omega h(\omega)} = \sigma \leq 1,$$

что равносильно доказываемому неравенству.

Далее, если в уравнении (16) $f(h)$ – неубывающая функция h , то

$$\int_0^\omega f(h(\tau)) d\tau = (\omega - \omega^*) f(h(\omega)) = \sigma \omega f(h(\omega)), \quad \sigma := 1 - \omega^* / \omega \leq 1.$$

Следовательно,

$$\alpha \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}) = \sqrt{\sigma_m} \int_0^h \sqrt{f(z)} dz,$$

и выражение для α имеет вид

$$\alpha = \sqrt{\sigma_m / \pi} \int_0^1 \sqrt{f(z)} dz. \quad (7a)$$

Введем обозначение

$$\int_0^h \sqrt{f(z)} dz = g(h),$$

из которого ясно, что $g(h)$ – возрастающая функция. Тогда

$$h = g^{-1}(\alpha \sqrt{\pi} / \sqrt{\sigma_m} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega})), \quad (8)$$

где g^{-1} – символ обратного отображения.

Полученное выражение (8) есть не что иное, как приближенное решение уравнения Крокко.

Далее для иллюстрации решения (8) мы рассмотрим степенные функции $f(h)$. Пусть

$$f(h) = h^s, \quad s > 0 \Rightarrow \alpha \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}) = \frac{2\sqrt{\sigma_m}}{s+2} h^{s/2+1}, \quad \alpha = \frac{2}{s+2} \sqrt{\sigma_m / \pi}.$$

Тогда решение уравнения Крокко имеет вид

$$h^{s/2+1} = \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}), \quad h = (\operatorname{erf}(\sqrt{\omega}))^{2/(s+2)}.$$

При $s = 0$ получается точное решение уравнения Фурье, при $s = 1$ – приближенное решение уравнения Крокко:

$$h = (\operatorname{erf}(\sqrt{\omega}))^{2/3}.$$

Если же $f(h)$ – невозрастающее распределение, т. е. $f(0) = 1$, то

$$\int_0^\omega f(h) dh = \omega^* < \omega,$$

и тогда из уравнения (16) получаем следующий первый интеграл:

$$\psi = -\sqrt{\omega^*} = -\sqrt{\theta \omega}, \quad \theta := \omega^* / \omega < 1.$$

Если провести разделение переменных, то

$$\sqrt{\theta_m} h = \alpha \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}), \quad \alpha = \sqrt{\theta_m / \pi}.$$

Окончательное выражение для h имеет следующий вид:

$$h = \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}).$$

Интегральное уравнение, равносильное уравнению Крокко

Уравнение Крокко (1) можно записать в следующем виде:

$$2d\varphi / dh + \int_0^h f(z) dz / \varphi(z) = 0. \quad (1г)$$

Отсюда получается интегральное уравнение для определения $\varphi(h)$:

$$\varphi(h) - \alpha + 0,5 \int_0^h \frac{(h-z)f(z)}{\varphi(z)} dz = 0. \quad (1д)$$

Введем итерационный процесс, обозначив номер итерации буквой k . Тогда решение уравнения (1д) с помощью указанного процесса принимает вид

$$\varphi_k(h) = \alpha - 0,5 \int_0^h (h-z)f(z) / \varphi_{k-1}(z) dz.$$

Пусть $f(z) = z$, тогда, полагая $\varphi_0(h) = \alpha$, последовательно получаем:

$$\varphi_1(h) = \alpha - \frac{h^3}{12\alpha}, \quad \alpha^2 = 1/12,$$

$$\varphi_2(h) = \alpha - \frac{1}{2\alpha} \int_0^h \frac{(h-z)z}{1-z^3} dz = \alpha - 1/(2\alpha) \times$$

$$\times \left\{ h/3 \ln \frac{1}{1-h} + h/6 \ln(1+h+h^2) - h/\sqrt{3} \left(\operatorname{arctg} \frac{2h+1}{\sqrt{3}} - \pi/6 \right) - 1/3 \ln \frac{1}{1-h^3} \right\},$$

$$\alpha^2 = 1/2(\ln \sqrt{3} - \pi/(6\sqrt{3})),$$

и т. д.

Видно, что уже на второй итерации возникает логарифмическая особенность у дери­вativa $d\varphi/dh$, $h \rightarrow 1 - 0$.

Ввиду того, что $\varphi \in C^{(2)}(0,1)$ — элемент полного пространства, для сходимости итерационного процесса достаточна сходимость в себе последовательности $(\varphi_k)_{k \geq 0}$.

Экстремальное свойство решения уравнения Крокко

Прежде всего отметим, что уравнение Крокко порождается некоторым производящим функционалом. В связи с этим справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1. Уравнение Крокко равносильно канонической системе:

$$d\varphi / dh = \psi, \quad d\psi / dh = -0,5f(h) / \varphi$$

с гамильтонианом $E(h, \varphi, \psi) = \psi^2 - f(h) \ln(1 / \varphi)$.

Тогда вдоль решения (характеристики) предельной задачи Крокко распределение I_Δ удовлетворяет условию экстремума:

$$I_\Delta(\varphi) = \int_\Delta ((d\varphi / dh)^2 + f(h) \ln(1 / \varphi)) dh \rightarrow \inf \geq 0, \quad \forall \Delta \subset (0,1), \quad (9)$$

или (что тождественно)

$$dI_\Delta \leq \delta I_\Delta,$$

где d — изменение распределения вдоль куска действительной характеристики (решения), δ — изменение распределения вдоль любой допустимой характеристики.

Нетрудно показать, что необходимое условие (9) экстремума (минимума) распределения I_Δ совпадает с уравнением Крокко. Доказательство существования локального экстремума у распределения I_Δ , предполагаемого в утверждении 1, опускается.

Далее, рассмотрим связь биномиальной аппроксимации решения уравнения Крокко с экстремальным свойством решения. Прежде всего, из предельной задачи (1), (2) следует, что

$$\int_0^1 \psi^2 dh = 0,5 \int_0^1 f(h) dh. \quad (10)$$

В частности, если $f(h) = h$, то равенство (10) принимает вид

$$\int_0^1 \psi^2 dh = 1 / 4. \quad (10a)$$

Поэтому справедлива следующая теорема.

Теорема 2. Пусть выбрано следующее распределение $\varphi(h)$, аппроксимирующее решение предельной задачи (1), (2):

$$\varphi(h) = \alpha(1 - h^m), \quad (11)$$

и $\Delta = (0, 1)$, т. е. распределение (9) является условием глобального экстремума I_Δ на интервале $(0, 1)$.

Тогда, если $\varphi(h)$ доставляет экстремум распределению (9), то выполняется равенство (10a), т. е. имеет место импликация: (9) \rightarrow (10). Другими словами, для выполнения условия (9) необходимо выполнение тождества (10).

Доказательство. Проверим утверждение теоремы 2 для бинома (11). Действительно, подстановка распределения (11) в функционал (9) приводит к условию

$$\frac{(\alpha m)^2}{2m - 1} + 1 / 2 \ln(1 / \alpha) \rightarrow \inf \geq 0. \quad (11a)$$

Найдем минимум левой части выражения (11a) по α . Дифференцируем это выражение по α и приравняем результат нулю:

$$\frac{(\alpha m)^2}{2m - 1} = 1 / 4, \quad \alpha = \sqrt{2m - 1} / (2m).$$

Но это выражение совпадает с тождеством (10a) для бинома (11).

Теорема 2 доказана.

Совершенно аналогично тождеству (10) можно доказать тождества с ядром h^m , $m > 0$.

Действительно, поскольку в условиях предельной задачи (1), (2) выполняется утверждение теоремы 1, согласно которому

$$(\varphi d\varphi / dh)_{h=+0} = (\varphi d\varphi / dh)_{h=1-0} = 0,$$

то, интегрируя по частям, получим для любого $m > 0$ такое равенство:

$$\int_0^1 h^m \varphi d^2\varphi / dh^2 dh = -m \int_0^1 h^{m-1} \varphi(h) d\varphi(h) - \int_0^1 h^m (d\varphi / dh)^2 dh = -m / 2 (h^{m-1} \varphi^2)_0^1 +$$

$$\begin{aligned}
 & + 0,5m(m-1) \int_0^1 h^{m-2} \varphi^2(h) dh - \\
 & - \int_0^1 h^m (d\varphi / dh)^2 dh = 0,5m(m-1) \times \\
 & \times \int_0^1 h^{m-2} \varphi^2(h) dh - \int_0^1 h^m (d\varphi / dh)^2 dh.
 \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned}
 & \int_0^1 h^m (d\varphi / dh)^2 dh = \\
 & = 0,5 \left(m(m-1) \int_0^1 h^{m-2} \varphi^2(h) dh + \int_0^1 h^m f(h) dh \right). \quad (12)
 \end{aligned}$$

Нетрудно показать, что при $m = 0$ равенство (12) переходит в равенство (10), что и требуется.

Если же $m = 1$, то

$$\int_0^1 h (d\varphi / dh)^2 dh = 0,5 \int_0^1 h f(h) dh. \quad (12a)$$

В случае если $m = 2$, то

$$\int_0^1 h^2 (d\varphi / dh)^2 dh =$$

$$= \int \varphi^2(h) dh + 0,5 \int_0^1 h^2 f(h) dh. \quad (12б)$$

Тождества (12а) и (12б) удобно использовать при биномиальной аппроксимации решения предельной задачи (1), (2) в виде полинома, зависящего от параметров.

Реализация интегральных тождеств и апостериорные оценки констант приближенного решения

В данном разделе рассмотрено несколько частных случаев реализации тождеств (12), (12а) и (12б) для построения биномиальных аппроксимаций решения уравнения Крокко. При этом распределение $f(h)$ считается степенной функцией от h .

Случай 1. Пусть $f(h) = h^s$. Тогда из тождеств (12а) и (10) следует, что биномиальная аппроксимация

$$\varphi(h) = \alpha(1 - h^m) \quad (13)$$

реализуется для различных s при следующих значениях параметров α и m :

$$s = 0, \alpha = 0,5559, m = 2,6180;$$

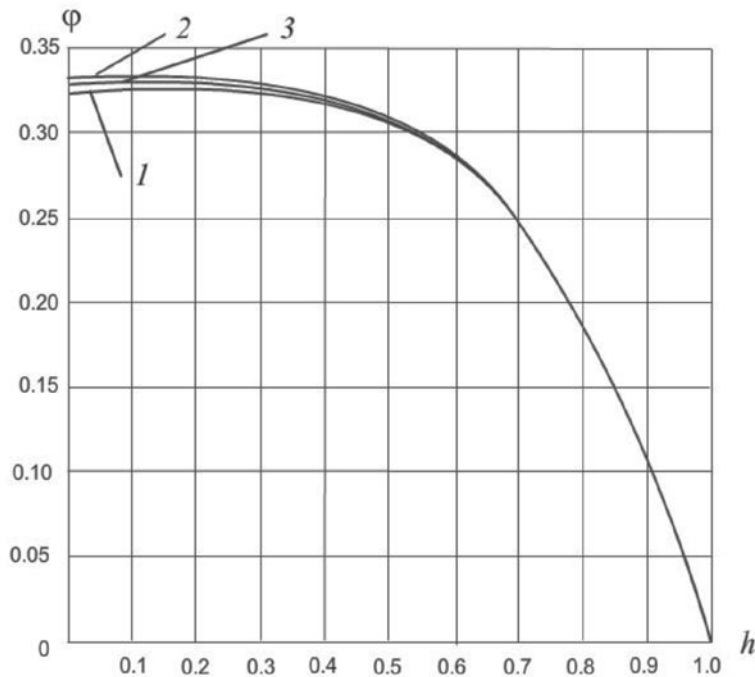


Рис. 2. Биномиальные аппроксимации решения предельной задачи (1) при различных наборах параметров:
 $\alpha = 0,325, m = 4,137$ (1); $\alpha = 1/3, m = 3,927$ (2); $\alpha = 0,3307, m = 4$ (3)

$$\begin{aligned} s = 1, \alpha = 0,3259, m = 4,1370; \\ s = 2, \alpha = 0,2319, m = 5,6460; \\ s = 3, \alpha = 0,1803, m = 7,1500. \end{aligned}$$

В предельной задаче Крокко $s = 1$, и тогда погрешность определения α составляет 2 %. Если $s = 0$, то точное значение $\alpha = 0,5642$ превосходит найденное на 1,5 %.

Существует еще две неплохие аппроксимации решения задачи (1), (2), $s = 1$. Именно, если $f(h) = h$, то $\alpha = 1/3, m = 3,922$ и $\alpha = \sqrt{7}/8, m = 4$.

На рис. 2 представлены три биномиальные аппроксимации $\varphi(h)$, отвечающие найденным значениям параметров α и m . Видно, что незначительное различие кривых наблюдается в области малых значений h . При $h \rightarrow 1 - 0$ расслоение кривых незначительно.

Случай 2. Пусть $f(h) = 1 - h^s$. Тогда аналогично первому случаю получаем следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} s = 1, \alpha = 0,4446, m = 1,8431; \\ s = 2, \alpha = 0,5000, m = 2,000; \\ s = 3, \alpha = 0,5213, m = 2,1019; \\ s = \infty, \alpha = 0,5559, m = 2,6180. \end{aligned}$$

Разумеется, последний случай соответствует случаю $s = 0$ первого случая.

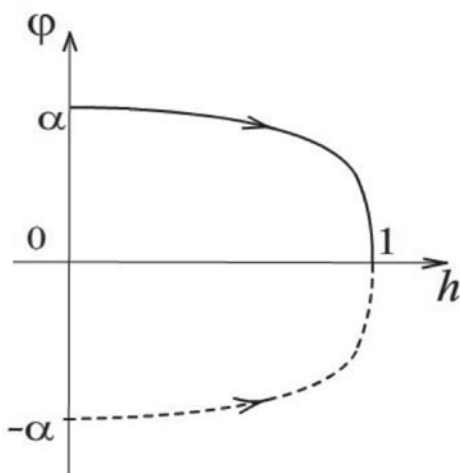


Рис. 3. График положительного и отрицательного решений (сплошная линия и пунктир) типичной предельной задачи Крокко (1), (2) в координатах h, φ (иллюстрация Примера 1)

Случай 3. Пусть $f(h) = (1 - h)^s$. Тогда получаем следующий набор параметров:

$$\begin{aligned} s = 0, \alpha = 0,5559, m = 2,6180; \\ s = 1, \alpha = 0,4446, m = 1,8340; \\ s = 2, \alpha = 0,3433, m = 1,7071; \\ s = 3, \alpha = 0,3366, m = 1,4413. \end{aligned}$$

Об однозначности решений уравнения Крокко

Задача данного раздела – доказать на примерах, что решения уравнения Крокко не являются 2-диффеоморфизмами.

Пример 1. Начнем с типичной предельной задачи (1), (2). Пусть $\varphi(h)$ – ее решение. Тогда функция $-\varphi(h)$ также является решением уравнения (1), таким, что

$$d\varphi(0)/dh = 0, \varphi(1) = 0, \varphi(0) + \alpha = 0.$$

Поэтому график решения в координатах h, φ представляет собой полуовал, симметричный относительно начала координат (рис. 3), отображение $\varphi: (0 < h < 1) \rightarrow (0, \varphi_0)$ – инъекция (мономорфизм или однозначное отображение).

Пример 2. Рассмотрим теперь задачу Коши (1), (2а), равносильную предельной задаче Крокко (1), (2). В этом случае необходимо подобрать постоянную α таким образом, чтобы выполнялось условие $\varphi(1) = 0$. Алгоритм пристрелки уже описан выше в разделе «Анализ имеющихся результатов».

Очевидно, что уравнение Крокко (1) допускает «понижение порядка» и с этим случае принимает вид

$$2\varphi d\varphi / dh + \varphi(h) \int_0^h f(t)dt / \varphi(t) = 0. \quad (14)$$

Действительно, перепишем уравнение (1) в виде интегро-дифференциального уравнения:

$$2d\varphi / dh + \int_0^h f(t)dt / \varphi(t) = 0,$$

а затем домножим обе его части на $\varphi(h)$. Очевидно, что при этом корневое пространство расширится и появится лишнее решение $\varphi(h) = 0$.

Уравнение (14) можно переписать в виде

$$\varphi^2(h) = \alpha^2 - \int_0^h \varphi(z) dz \int_0^z f(t) dt / \varphi(t), \quad (15)$$

откуда получается, что

$$\alpha^2 = \int_0^1 \varphi(z) dz \int_0^z f(t) dt / \varphi(t), \quad (16)$$

или в другой записи:

$$\alpha^2 = \int_0^1 f(t) dt / \varphi(t) \int_t^1 \varphi(z) dz. \quad (16a)$$

Поэтому с учетом равенства (16a) выражение (15) можно записать следующим образом:

$$\varphi^2(h) = \int_h^1 \varphi(z) dz \int_0^z f(t) dt / \varphi(t). \quad (15a)$$

Следовательно, справедливо следующее, почти очевидное, утверждение.

Утверждение 2. *Вещественное решение предельной задачи (1), (2) или равносильной задачи Коши (1), (2a) на промежутке $0 < h < 1$ существует, если отображение $f(h) > 0$.*

Доказательство. Действительно, из формул (15) и (15a) следует, что знак решения определяется только знаком $f(h)$.

Переходим к однородной предельной задаче Крокко (1), (3). Тогда в равенстве (16) $\alpha = 0$. Тогда интегральное уравнение (14) допускает решение $\varphi(h) = 0$, $0 < h < 1$. Это решение удовлетворяет условиям (3).

Пусть в предельной задаче (1), (3) выполняются условия $f(h) \geq 0$, $\varphi \geq 0$. Тогда $d^2\varphi/dh^2 < 0$. Отрицательные решения находятся вне нашего рассмотрения как не имеющие физического смысла.

Утверждение 2 доказано.

Дальнейшие выкладки проводим для «чистого» случая Крокко, т. е. когда $f(h) = h$. Для этого требуется доказать следующую лемму.

Лемма. *Пусть $\varphi(h)$ – решение предельной задачи (1), (3). Тогда существует $h_0 \in (0, 1)$ такое, что при $h = h_0$ $d\varphi/dh = 0$.*

Доказательство. Перепишем первый интеграл для уравнения Крокко в виде

$$\varphi'(h) = \varphi'(0) - (1/2) \int_0^h t dt / \varphi(t), \quad (17)$$

причем штрихами обозначены произво-

дные по h .

Пусть критическое (подозреваемое на максимум) значение $h = h_0 \geq 0$ существует, и тогда

$$\varphi'(0) = (1/2) \int_0^{h_0} t dt / \varphi(t) > 0.$$

Необходимо показать, что $0 < h_0 < 1$. Повторно интегрируя равенство (17), получаем:

$$\varphi(h) - h\varphi'(0) + (1/2) \int_0^h (h-t)t / \varphi(t) dt = 0.$$

Теперь пусть $h = 1$, в этом случае

$$\varphi'(0) = (1/2) \int_0^1 (1-t)t / \varphi(t) dt, \quad (17a)$$

и тогда справедливо выражение

$$\begin{aligned} \varphi(h) &= (1/2) \left(h \int_h^1 t / \varphi(t) dt + \int_0^h t^2 / \varphi(t) dt - \right. \\ &\quad \left. - h \int_0^1 t^2 / \varphi(t) dt \right) = (1/2) \left(h \int_h^1 t / \varphi(t) dt + \right. \\ &\quad \left. + (1-h) \int_0^1 t^2 / \varphi(t) dt - \int_h^1 t^2 / \varphi(t) dt \right) \geq \\ &\geq (1/2)(1-h) \int_0^1 t^2 / \varphi(t) dt > 0. \end{aligned}$$

Следовательно, $\varphi(h) > 0$, $0 < h < 1$.

Из равенств (17) и (17a) вытекает, что

$$\int_{h_0}^1 t dt / \varphi(t) = \int_0^1 t^2 dt / \varphi(t) > 0. \quad (18)$$

Нетрудно видеть, что если в уравнении (18) $h_0 = 0$, то из этого необходимо следует, что $\varphi = \infty$ почти всюду на промежутке $(0, 1)$. Но это недопустимо (исключено). Случай, когда $h_0 = 1$, также оказывается невозможным, поскольку слева в равенстве должен стоять 0, а справа – положительное число.

Лемма доказана.

Полученный здесь результат, очевидно, не зависит от $f(h)$. Попутно в ходе доказательства установлено, что $d\varphi/dh > 0$ на левом конце промежутка (от 0 до точки $h = h_0 - 0$) и что $\varphi(h) > 0$, когда $0 < h < 1$.

Далее продолжим проведение выкладок для «чистого» случая Крокко.

Легко доказать, что $d\varphi/dh < 0$ на промежутке $h_0 + 0 < h < 1 - 0$.

Для этого проинтегрируем уравнение Крокко от правого конца промежутка:

$$\varphi'(h) - \varphi'(1) - \int_h^1 t dt / \varphi(t) = 0,$$

откуда следует, что

$$\varphi'(1) = - \int_{h_0}^1 t dt / \varphi(t) < 0.$$

Следовательно,

$$\varphi'(h) = - \int_{h_0+0}^h t dt / \varphi(t) < 0, \\ h_0 + 0 < h < 1 - 0,$$

что и требовалось.

Для наглядности представим график функции $\varphi = \varphi(h)$. Она должна отражаться на нем в виде овала в первом квадранте координатной плоскости с максимальным значением $\varphi_0 := \varphi(h_0) > 0$ (рис. 4). Видно, что предельная задача Крокко в записи (1), (3) распадается на две типичные предельные задачи для промежутков $(+0, h_0 - 0)$ и $(h_0 + 0, 1 - 0)$:

$$\varphi(0) = (d\varphi / dh)_{h=h_0-0} = 0, \quad 0 < h < h_0; \\ \varphi(1) = (d\varphi / dh)_{h=h_0+0} = 0. \quad (17)$$

Решения с такими условиями легко построить. Например, если $s = 0$ ($f = 1$), то

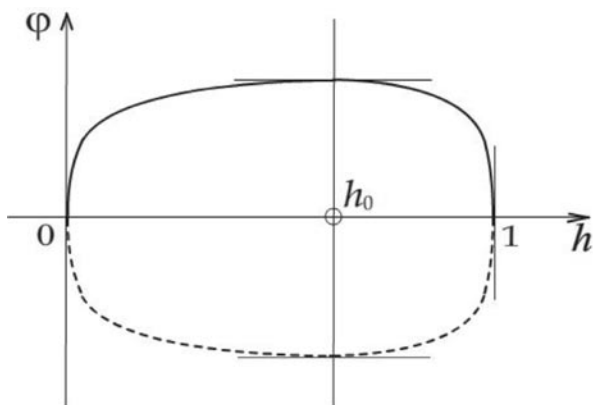


Рис. 4. График решения однородной предельной задачи Крокко (1), (3); при h_0 функция φ имеет максимальное положительное и минимальное отрицательные значения

$$h_0 - h_l = \varphi_0 \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}); \\ h_r - h_0 = \varphi_0 \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}); \quad (18)$$

$$\omega := \ln(\varphi_0 / \varphi), \quad \varphi_0 := \varphi(h_0) \geq \varphi(h),$$

где h_l, h_r – сужения $h(\omega)$ на левый и на правый промежутки соответственно, т. е.

$$h = h_l, \quad 0 < h < h_0; \quad h = h_r, \quad h_0 < h < 1.$$

Пусть в решении (18) $\varphi = 0$. Тогда

$$h_0 = 1 - h_0, \quad h_0 = 1/2, \quad \varphi_0 = 1/(2\pi^{0.5}).$$

Максимальное значение φ , которое записывается как $\varphi(h_0) = \varphi_0$, оказывается вдвое меньше, чем соответствующее решение в типичной предельной задаче Крокко (1), (2).

В случае, когда $f(h) = h$, решение можно получить аналогичным образом. На промежутке $0 < h < h_0$ ставим такие же предельные условия, как и в типичной предельной задаче Крокко, а именно

$$\varphi(0) = \varphi'(h_0) = 0.$$

Далее следует применить аппроксимацию в виде кубического бинома:

$$\varphi(h) = \alpha(h_0^3 - (h_0 - h)^3).$$

С этой целью используем тождество

$$\varphi'(0) = (1/2) \int_0^{h_0} t dt / \varphi(t).$$

Из него следует, что

$$\varphi'(0) = 3\alpha h_0^2,$$

и, проделав простые расчеты, получим следующее равенство:

$$\alpha^2 h_0^3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\pi}{18},$$

которое связывает величины α и h_0 .

Теперь пусть $\varphi := \alpha\Phi$, $\zeta := h / h_0$. Функция $\Phi = \Phi(\zeta)$ удовлетворяет уравнению Крокко и допускает кубическую аппроксимацию:

$$\Phi(\zeta) = 1 - (1 - \zeta)^3.$$

Тогда легко подсчитать, что $\alpha^2 = h_0^3$, откуда получаем значения h_0 и α :

$$h_0 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\pi}{18} \right)^{1/6} = 0,68 > 1/2, \quad \alpha = 0,46.$$

Заключение

В результате проведенного исследования можно сделать следующие заключения:

для приближенных оценок решений предельных задач Крокко (1) – (4) в целом (т. е. на промежутке $0 < h < 1$) достаточно использовать интегральные тождества, получаемые из предельных условий. Такие оценки можно рассматривать как грубые, поскольку значения констант решения вычисляются с погрешностью не менее 1,5 %. Показано, что интегральные тождества связаны с условием экстремума некоторого распределения. В качестве эталонных решений использованы решения, полученные В.П. Вариным;

применение интегральных тождеств оказывается достаточным для определения постоянных биномиальной аппроксимации (различных) предельных задач Крокко, т. е. (1), (2) и (1), (3), с невысокой точностью

(погрешность составляет около 1 %). Максимальное расхождение точного решения предельной задачи и биномиальной аппроксимации наблюдается (естественно) вблизи особенности $h = 1 - 0$ для дериватива. Эта особенность является регулярной, «стираемого» (логарифмического) порядка;

уравнение Крокко связано с необходимым условием минимума для положительного распределения (функционала). Соответствующий гамильтониан знакопеременен. Решение задачи на минимум распределения равносильно определению констант бинома из интегральных тождеств;

однородная предельная задача (1), (3) распадается на две типичные предельные задачи Крокко для промежутков левее и правее критической точки (максимума) $\varphi(h)$. Интегральные тождества в предельной задаче (1), (3) также применимы для грубой оценки постоянных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Варин В.П.** Плоский асимптотический ряд Блазиуса // Математический форум (сборник). Сер. Итоги науки. Владикавказ, 2015. С. 34–47;
- [2] **Шилов Г.Е.** Математический анализ. Спецкурс. М.: Физматгиз, 1961.
- [3] **Варин В.П.** Плоские разложения и их приложения. М.: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2014. № 23. 25 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-23>;
- [4] **Варин В.П.** Плоский асимптотический ряд Блазиуса // Теория операторов, комплексный анализ, математическое моделирование. Матер. научн. конф. Пос. Дивноморское. 7 – 13 сент. 2014. С. 16.
- [5] **Башкин В.А., Диканский Е.А.** Решение уравнений Прандтля при нулевом градиенте давления на неизотермической поверхности // Ученые Записки ЦАГИ. 2000. Т. 31. № 3–4. С. 47–59.
- [6] **Брюно А.Д., Горючкина И.В.** Сходимость степенных разложений решений ОДУ. М.: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2013. № 94. 13 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-94>;
- [7] **Сорокин В.Н.** Аппроксимации Эрмита – Паде обобщенных гипергеометрических рядов от двух переменных // Сибирский математический журнал. 2002. Т. 43. № 4. С. 894–906.
- [8] **Комарова Е.В.** Асимптотическая Паде-интерполяция решений краевых и вариационных задач с параметром. Автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук. 05.13.18. М., 2003. 14 с.
- [9] **Феоктистов В.В., Мякинник О.О.** О решении задач пограничного слоя, преобразованных к системе уравнений в частных производных первого порядка с квадратичной нелинейностью // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2004. № 1. С. 54–71.
- [10] **Павлов В.Г., Якимов Е.И.** Переменные Крокко и уравнения пограничного слоя на поверхности при неравномерном внешнем потоке // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. 2004. № 2. С. 30–33.
- [11] **Петриченко М.Р.** Однородная предельная задача Крокко // Научное обозрение физико-математических и технических наук. М.: Просперо, 2015. Вып. 14. С. 53–55.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович – доктор технических наук, заведующий кафедрой гидравлики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
fonpetrich@mail.ru

Petritchenko M.R. ROUGH ESTIMATES AND BINOMIAL APPROXIMATIONS FOR THE CROCCO EQUATION IN THE BOUNDARY PROBLEMS.

In order to solve the Crocco boundary problems known as the typical one and the uniform one, binomials (as approximants of exact solutions) and integral identities have been used. The extent of the closeness of the exact solution to its approximation was estimated using the $\varphi(0)$ value. The solution of the typical Crocco boundary problem was proved to have a logarithmic singularity of the derivative at $\varphi = 0$. The Crocco equation was found to provide both necessary and sufficient conditions for the minimum of a positive distribution being vortex in $d\varphi/dh$. The uniform Crocco boundary problem was demonstrated to be equivalent to the two typical Crocco boundary problems with a common critical point.

CROCCO BOUNDARY PROBLEM, APPROXIMATION, CONVEX DISTRIBUTION, MINIMUM OF POSITIVE FUNCTIONAL.

REFERENCES

- [1] **V.P. Varin**, Ploskiy asimptoticheskiy ryad Blaziusa [The plane asymptotical Blasius series], Matematicheskii forum, seriya «Itogi nauki», Vladikavkaz, 2015, 34–47.
- [2] **G.E. Shilov**, Matematicheskii analiz, spetskurs [Mathematical analysis, special course], M.: Fizmatgiz, 1961.
- [3] **V.P. Varin**, Ploskiye razlozheniya i ikh prilozheniya [The plane expansions and their applications], Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2014, No. 23, URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-23>;
- [4] **V.P. Varin**, Ploskiy asimptoticheskiy ryad Blaziusa, Teoriya operatorov, kompleksnyy analiz, matematicheskoye modelirovaniye [The plane asymptotical Blasius series, Theory of operators, Complex analysis, Mathematical simulation], Divnomorskoye, 2014, P. 16.
- [5] **V.A. Bashkin, E.A. Dikanskiy**, Resheniye uravneniy Prandtya pri nulevom gradiyente davleniya na neizotermicheskoy poverkhnosti [The solution of Prandtl equation for zero-pressure gradient on the non-isothermal surface], Uchenyye zapiski TsAGI. 31(3-4) (2000) 47–59.
- [6] **A.D. Bryuno, I.V. Goryuchkina**, Skhodimost stepennykh razlozheniy resheniy ODU [The convergence of power expansions of ODE solutions], Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2013, No. 94, URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-94>;
- [7] **V.N. Sorokin**, Approksimatsii Ermita-Pade obobshchennykh gipergeometricheskikh ryadov ot dvukh peremennykh [The Hermit-Pade approximations to generalized hypergeometrical series in two variables], Sibirskiy matematicheskii zhurnal. 43(4) (2002) 894–906.
- [8] **E.V. Komarova**, Asimptoticheskaya Pade-interpolyatsiya resheniy krayevykh i variatsionnykh zadach s parametrom [The asymptotical Pade-interpolation of the boundary-value and variational problems with a parameter], avtoreferat dissert... k.f.-m. nauk, 05.13.18, Moscow, 2003.
- [9] **V.V. Fyeoktistov, O.O. Myakinnik**, O reshenii zadach pogranichnogo sloya, preobrazovannykh k sisteme uravneniy v chastnykh proizvodnykh pervogo poryadka s kvadrachnoy nelineynostyu [On the solution of the boundary-layer problems transformed to the partial first-order differential system with a quadratic linearity], Vestnik MGTU im. N.E. Baumana Seriya «Yestestvennyye nauki». 1(2004) 54–71.
- [10] **V.G. Pavlov, E.I. Yakimov**, Peremennyye Krokko i uravneniya pogranichnogo sloya na poverkhnosti pri neravnomernom vneshnem potoke [The Crocco variables and the boundary-layer equations on the surface under nonuniform external flow], Vestnik KGTU im. A.N. Tupoleva. 2 (2004) 30–33.
- [11] **M.R. Petritchenko**, Odnorodnaya predelnaya zadacha Krokko [The uniform Crocco boundary problem], Nauchnoye obozreniye fiziko-matematicheskikh i tekhnicheskikh nauk, Prospero, No. 14, Moscow, 2015, 53–55.

THE AUTHOR

PETRITICHENKO Michael R.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

fonpetrich@mail.ru

КРИТЕРИЙ ОПТИМАЛЬНОГО ВЫБОРА МЕДНОГО ТЕРМОСОПРОТИВЛЕНИЯ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЙ В АТМОСФЕРЕ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

В качестве критерия выбора оптимального значения медного термосопротивления при температурных измерениях в атмосфере при нормальных условиях предлагается параметр, прямо пропорциональный чувствительности термосопротивления и обратно пропорциональный произведению «мертвого» сопротивления на «мертвую» температуру (произведение погрешностей при определении температуры и сопротивления). На примере исследования четырех образцов показано удобство предлагаемого критерия. Для одного из термосопротивлений этот параметр оказывается выше в исследуемом диапазоне температур.

КРИТЕРИЙ ВЫБОРА, МЕДНОЕ ТЕРМОСОПРОТИВЛЕНИЕ, ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ, «МЕРТВОЕ» СОПРОТИВЛЕНИЕ, «МЕРТВАЯ» ТЕМПЕРАТУРА.

Экспериментальные исследования, связанные с прецизионными температурными измерениями, редко обходятся без использования платиновых и медных термосопротивлений (ТС). После градуировки они могут использоваться для определения температуры по измеряемой величине сопротивления ТС.

Для меди, используемой в качестве термосопротивления (ТС), согласно ГОСТу 1994 года [1], отношение его сопротивления соответственно при 100 и 0 °С должно было составлять

$$\frac{R(100\text{ °C})}{R(0\text{ °C})} = 1,427 \pm 0,001. \quad (1)$$

Если использовать известную линейную зависимость сопротивления от температуры

$$R(t) = R_0 + at, \quad (2)$$

где R_0 – сопротивление проводника при температуре $t = 0\text{ °C}$, a – угловой коэффи-

циент, который следует зависимости

$$a = R_0\alpha \quad (3)$$

(α – температурный коэффициент сопротивления), и записать формулу (2) для тех же температур, то получим следующее соотношение:

$$\frac{R(100\text{ °C})}{R(0\text{ °C})} = 1 + \alpha \cdot 100\text{ °C}. \quad (4)$$

Если сопоставить правые части формул (1) и (4), то получим следующее значение температурного коэффициента сопротивления:

$$\alpha = 0,00427 \pm 0,00001. \quad (5)$$

С 1 января 2008 года, согласно ГОСТу [2], вместо отношения (1) был взят температурный коэффициент сопротивления, значение которого для медных ТС должно было составлять $0,00428\text{ (°C)}^{-1}$ (без указания допуска).

В следующий ГОСТ, 2009 года [3], кро-

ме этой величины, были включены медные ТС со значением температурного коэффициента сопротивления $\alpha = 0,00426 \text{ (}^\circ\text{C)}^{-1}$. Таким образом, в настоящее время температурный коэффициент сопротивления для ТС реально по ГОСТу должен иметь вместе с допуском прежнее значение (5).

Последняя поправка, скорее всего, связана с тем, что в качестве добавок для изготовления медной проволоки (применяется в качестве ТС), используют, например, никель, олово и серебро. Естественно, что из-за этого обстоятельства медное ТС может иметь разный температурный коэффициент сопротивления (например, у импортных ТС он равен нижней границе значения (5) [3]).

С другой стороны, если рассматривать чувствительность ТС (характеристика, показывающая, как быстро меняется сопротивление при изменении температуры), которая, очевидно, зависит от углового коэффициента a , то в его формулу (3), помимо температурного коэффициента α должно входить еще и значение сопротивления R_0 .

В связи с вышеизложенным, возникает вопрос, нельзя ли сформулировать специальный критерий, который бы помог выбрать оптимальное значение сопротивления медного ТС для проведения температурных измерений.

С этой целью было проведено исследование, которому посвящена данная статья.

В качестве исследуемых были выбраны

четыре образца из медной эмалированной проволоки диаметром 0,1 мм, изготовленной голландской компанией Velleman, различающихся по величине сопротивления примерно в два раза (см. таблицу, где даны значения сопротивления при $0 \text{ }^\circ\text{C}$ и $20 \text{ }^\circ\text{C}$; они обозначены как R_0 , R_{20} соответственно).

Проволоку наматывали на деревянный каркас размером $440 \times 230 \times 20$ мм. Численное значение ТС измерялось с помощью моста Уитстона, в свободные плечи и диагональ которого были включены магазины сопротивлений Р-33 и цифровой вольтметр В7-35 соответственно. На вход моста подавалось постоянное стабилизированное напряжение 9 В. Температуру t в лаборатории при нормальных условиях ($15 - 25$) $^\circ\text{C}$ измеряли термометром с ценой деления $0,1 \text{ }^\circ\text{C}$; она колебалась естественным образом в течение промежутка времени утро-вечер. Иногда для обогрева помещения лаборатории применялась батарея водяного отопления или масляная батарея. Достижение теплового равновесия между ТС и измерительной средой контролировали по графику зависимости $R(t)$; оно считалось достигнутым, если на данном графике отсутствовали характерные отчетливые «провалы» сопротивления в какой-либо температурной области (такие провалы возникали, если образец не успевал нагреться).

Обработка экспериментальных результа-

Таблица

Полученные экспериментальные данные

Параметр	Значение параметра для образца			
	1	2	3	4
R_0 , кОм	0,5378	0,8585	1,5693	3,1738
R_{20} , кОм	0,5828	0,9293	1,7035	3,4372
ΔR_0 , Ом	0,09	0,12	0,19	0,49
R_p , Ом	1,2	1,9	3,4	6,9
a , Ом \cdot ($^\circ\text{C}$) $^{-1}$	2,260	3,540	6,710	13,170
Δa , Ом \cdot ($^\circ\text{C}$) $^{-1}$	0,005	0,005	0,010	0,025
α , 10^{-3} ($^\circ\text{C}$) $^{-1}$	4,20	4,12	4,20	4,15
K , ($^\circ\text{C}$) $^{-2}$	3,60	3,50	3,90	3,60
K_0 , ($^\circ\text{C}$) $^{-2}$	631	870	1247	722

тов зависимости (2), полученной в описанных нормальных условиях, производилась с помощью линейного метода наименьших квадратов (МНК) (для каждого образца было проведено 1720 измерений). С помощью МНК определяли угловой коэффициент a и свободный член R_0 (напомним, что он соответствует значению ТС при 0°C), со своими среднеквадратичными отклонениями (соответственно Δa и ΔR_0 , см. таблицу). Приборная погрешность магазина сопротивлений при выбранных условиях обуславливалась его классом точности, который составлял 0,2 %.

Очевидно, что эффективность работы ТС должна быть прямо пропорциональна его чувствительности (см. выше) и обратно пропорциональна произведению «мертвого» сопротивления на «мертвую» температуру (см. далее). Поэтому в качестве параметра, определяющего критерий для выбора оптимального значения ТС, нами предлагается величина

$$K = \frac{a}{R_D t_D}, \quad (6)$$

где $a = \Delta R / \Delta t$ — чувствительность ТС (она определяется тангенсом угла наклона линейной зависимости $R(t)$ к оси абсцисс t); R_D — «мертвое» сопротивление (МС); t_D — «мертвая» температура (МТ).

В качестве МС R_D бралась погрешность сопротивления при 20°C , учитывающая класс точности магазина сопротивлений. Она оказалась примерно на порядок выше, чем среднеквадратичное отклонение ΔR_0 ТС (см. таблицу) в измеряемом диапазоне температур. Следует отметить, что если взять в качестве магазина сопротивлений другой, с более высоким классом точности, например МСР-60М (класс точности 0,02 %), то полученные таким образом МС оказываются сравнимыми с соответствующими среднеквадратичными отклонениями. В качестве МТ t_D бралась погрешность температуры при 20°C (при определенном ее значении) при фиксированном сопротивлении при той же температуре. Если же принять погрешность при 20°C как погрешность термометра, то при этом теряется индивидуальность

ТС, поскольку последняя у всех одна и та же; она составляет $0,05^\circ\text{C}$. В связи с вышесказанным, МТ определялась как произведение МС на котангенс угла (a^{-1}) между полученной экспериментальной зависимостью $R(t)$ и осью абсцисс t , т. е.

$$t_D = R_D \cdot a^{-1}. \quad (7)$$

При подстановке формулы (7) в выражение для критерия (6) получим, что

$$K = (a/R_D)^2. \quad (8)$$

Полученные экспериментальные результаты сведены в таблице. Из ее анализа можно сделать следующие заключения.

1. Погрешности, полученные по формулам косвенных измерений [4], с учетом приборной погрешности для температурного коэффициента a и параметра K , составили соответственно $1,1 \cdot 10^{-4} (^\circ\text{C})^{-1}$ и $0,05 (^\circ\text{C})^{-2}$, а для параметра K_0 с учетом величин, полученных из МНК, погрешность оказалась более чем на два порядка меньше, чем сама величина для всех образцов.

2. С учетом погрешностей, представленных в п. 1, температурные коэффициенты a у всех образцов совпадают, и за исключением второго, у которого отличия наблюдаются в третьей значащей цифре, они совпадают с аналогичной величиной (5) по существующему в настоящее время ГОСТу.

3. Параметр K имеет наибольшее значение для третьего образца, тогда как для первого, второго и четвертого образцов значения параметра K совпадают.

4. Если в качестве МС взять среднеквадратичное отклонение ΔR_0 для свободного члена из МНК и, используя соотношение (7), определить соответствующую МТ, то при подстановке в выражение (8) введенный параметр K_0 для третьего ТС становится существенно больше, по сравнению с другими ТС.

5. На основании п.п. 3 и 4 можно заключить, что из результатов, полученных при выбранных условиях для четырех образцов медных ТС, оптимальным при температурных измерениях является значение сопротивления у третьего образца.

Таким образом, предлагаемый параметр $K(K_0)$ может служить в качестве удобного и надежного критерия выбора оптималь-

ного значения медного термосопротивления при температурных измерениях в атмосфере при нормальных условиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] ГОСТ 6651-94. Термопреобразователи сопротивления. Общие технические требования и методы испытаний. М.: ИПК Изд-во стандартов, 2002. 31 с.

[2] ГОСТ Р 8.625-2006. Термометры сопротивления из платины, меди и никеля. Методика проверки. М.: Стандартинформ, 2007. 33 с.

[3] ГОСТ 6651-2009. Термопреобразо-

ватели сопротивления из платины, меди и никеля. Общие технические требования и методы испытаний. М.: Стандартинформ, 2011. 25 с.

[4] Белов В.Н., Молодкин Ю.Л., Пальмова Н.И., Хачатурьянц А.В. Обработка результатов измерений. Л.: Изд-во ЛПИ им. М.И. Калинина, 1988. 41 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ОКТЯБРЬСКИЙ Валерий Павлович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vokt@yandex.ru

Oktyabrskiy V.P. THE CRITERION FOR THE OPTIMAL SAMPLING OF COPPER THERMISTOR TO MEASURE IN THE ATMOSPHERE UNDER NORMAL CONDITIONS.

In this paper a new parameter is suggested as a criterion for selecting the optimal value of the copper thermal resistance in temperature measurements in the atmosphere under normal conditions. The proposed parameter is directly proportional to the sensitivity of thermal resistance and inversely proportional to the product of 'dead' resistance and 'dead' temperature (the product of errors of temperature and resistance when their determination). It has been shown through the example of 4 samples that this criterion is convenient. For one of the thermal resistance this parameter is higher in the investigated range of temperatures.

SELECTION CRITERION, COPPER THERMISTOR, TEMPERATURE MEASUREMENT, 'DEAD' RESISTANCE, 'DEAD' TEMPERATURE.

REFERENCES

[1] GOST 6651-94. Termopreobrazovateli soprotivleniya. Obshchiye tekhnicheskkiye trebovaniya i metody ispytaniy [Resistance thermal converters. General technical requirements and test methods], Moscow, ИПК Изд-во standartov, 2002.

[2] GOST R 8.625-2006. Termometry soprotivleniya iz platiny, medi i nikelya. Metodika proverki [Resistance thermometers of platinum, copper and nickel. Test procedure], Moscow, Standartinform, 2007.

[3] GOST 6651-2009. Termopreobrazovateli soprotivleniya iz platiny, medi i nikelya. Obshchiye tekhnicheskkiye trebovaniya i metody ispytaniy [Resistance thermal converters of platinum, copper and nickel. General technical requirements and test methods], Moscow, Standartinform, 2011.

[4] V.N. Belov, Yu.L. Molodkin, N.I. Palmova, A.V. Khachataryants, Obrabotka rezultatov izmereniy [The treatment of measuring data], Leningrad, Leningrad Polytechnical Institute, 1988.

THE AUTHOR

ОКТЯБРСКИЙ Valeriy P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

vokt@yandex.ru



DOI: 10.5862/JPM.230.7

УДК: 57.043

*В.Ю. Паневин¹, А.Н. Софронов¹,
Д.А. Фирсов¹, А.Л. Тер-Мартirosян^{2,3}*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого;

² ЗАО «Полупроводниковые приборы», г. Санкт-Петербург;

³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

ЦИФРОВАЯ СИСТЕМА ВИЗУАЛИЗАЦИИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ДЛЯ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЙ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ В СТОМАТОЛОГИИ

В работе предложена новая компактная система визуализации пространственного распределения интенсивности флуоресценции фотосенсибилизатора при проведении антибактериальной фотодинамической терапии. Система представляет собой малогабаритную интраоральную камеру со встроенным лазерным излучателем. Длина волны лазерного излучения соответствует коротковолновому пику поглощения фотодитазина, что обеспечивает эффективное возбуждение его флуоресценции. Камера со встроенным спектрально-селективным фильтром регистрирует распределение интенсивности флуоресценции. Разработанная система может позволить проводить диагностику остаточного числа патогенных бактерий по флуоресцентным изображениям в процессе антибактериальной фотодинамической терапии в стоматологии.

СТОМАТОЛОГИЯ, АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕРАПИЯ, ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ, ИНТРАОРАЛЬНАЯ КАМЕРА.

Введение

Фотодинамическая терапия (ФДТ) как метод лечения онкологических заболеваний различных локализаций интенсивно развивается в последнее время. Указанный метод основан на выделении активного кислорода в результате фотохимической реакции на клеточном уровне с участием фотосенсибилизатора. Последний является в данном случае препаратом, фармакокинетика которого обуславливает избирательное накопление в митохондриях и мембранах патологических клеток. При воздействии на фотосенсибилизированную ткань оптического излучения происходит переход нетоксичного триплетного кислорода в синглетный, который обладает выраженным цитотоксичным действием, приводящим к разрушению клеточных мембран опухолевых клеток [1, 2].

Эффективность ФДТ во многом опре-

деляется физико-химическими, фармакодинамическими и фармакокинетическими свойствами фотосенсибилизатора. В настоящее время существует несколько групп фотосенсибилизирующих препаратов, в частности на основе порфиринов и хлоринов. Наиболее конкурентоспособными из них по совокупности своих медико-биологических и оптико-физических свойств являются фотосенсибилизаторы на основе производных хлорина e_6 , в частности коммерчески доступный отечественный препарат Фотодитазин® [3].

Вместе с тем, эффективность метода ФДТ в сильной степени зависит от спектрального состава оптического излучения, возбуждающего фотохимическую реакцию фотосенсибилизатора. Согласование спектрального состава излучения со спектром поглощения фотосенсибилизатора позволяет существенно улучшить эффективность оптического возбуждения последнего и

снизить побочные эффекты от облучения здоровой ткани. Достижения последних лет в области полупроводниковой оптоэлектроники дают возможность такого согласования практически для любого фотосенсибилизатора, благодаря разработке недорогих компактных мощных источников лазерного излучения на основе полупроводниковых лазерных диодов [4].

Одним из существенных достоинств метода ФДТ является тот факт, что фотохимическая реакция сопровождается флуоресценцией как фотосенсибилизатора, так и синглетного кислорода, выделяющегося в результате реакции. Анализ флуоресценции позволяет проводить диагностику *in situ*, т. е. непосредственно в процессе проведения фотодинамической терапии; кроме того, он дает возможность производить раннюю диагностику онкологических заболеваний. Первичная визуализация происходящей фотохимической реакции возможна по анализу интенсивности и пространственного распределения фотолюминесценции синглетного кислорода. Однако спектр его флуоресценции расположен в ближней инфракрасной области с максимумом на длине волны 1270 нм [5, 6]. Ранее были представлены системы визуализации фотолюминесценции кислорода на основе чувствительных в ближнем инфракрасном диапазоне камер на основе InGaAs и спектрально-селективных фильтров [5, 6]. Однако подобные системы весьма дороги и используются в основном для фундаментальных исследований.

В отличие от спектра люминесценции синглетного кислорода, спектральные особенности флуоресценции фотодитазина лежат в видимой области, где для визуализации с успехом могут применяться кремниевые фоточувствительные ПЗС- и КМОП-матрицы, которые существенно дешевле матриц на основе InGaAs. Как показали исследования, проведенные с помощью двухканальной системы визуализации в видимой и ближней инфракрасной областях [5], между интенсивностями фотолюминесценции синглетного кислорода и фотосенсибилизатора имеется корреляция, что позволяет проводить диагностику по

фотолюминесценции фотосенсибилизатора в видимой области. Такая система, включающая монохромную кремниевую камеру, светодиодный осветитель и программное обеспечение для визуализации и анализа пространственного распределения фотолюминесценции фотодитазина, в настоящее время уже разработана [7, 8], успешно прошла клинические испытания в качестве средства диагностики злокачественных новообразований наружных локализаций и разрешена к применению на территории РФ [9].

Несмотря на то, что изначально метод ФДТ разрабатывался, главным образом, для лечения злокачественных новообразований с наружной локализацией, последнее время он находит применение и в других областях медицины, например в стоматологии, в медицинской косметологии в качестве антивозрастной терапии и т. п. Так, в стоматологии под фотодинамической терапией подразумевается антибактериальная фотодинамическая терапия (АФТ), так как она позволяет бороться с патогенной бактериальной флорой в полости рта. В последнее время появились публикации об успешном применении АФТ для лечения воспалительных заболеваний пародонта [10] и фотоактивируемой дезинфекции в эндодонтии и пародонтологии [11]. При этом в литературе не встречается данных об использовании основного преимущества фотодинамики – флуоресцентной диагностики для контроля в процессе АФТ, поскольку имеющиеся на настоящий момент системы визуализации для ФДТ [5 – 7] не могут применяться в стоматологии в силу своих больших габаритов.

В данной работе предложена новая оригинальная компактная система визуализации фотохимической реакции, которую можно использовать для флуоресцентной диагностики в процессе антибактериальной фотодинамической терапии в стоматологии.

Оптические свойства фотодитазина

Для разрабатываемой системы флуоресцентной диагностики при АФТ в стоматологии был выбран по совокупности своих

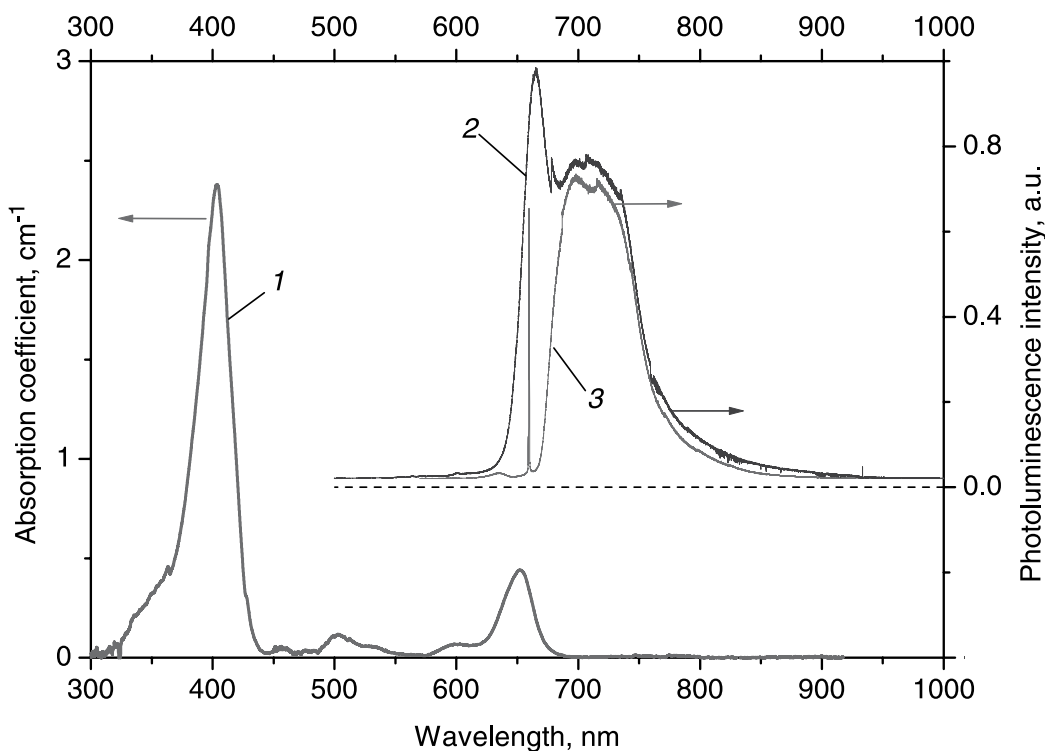


Рис. 1 [12]. Спектры оптического поглощения (кривая 1) и флуоресценции (2, 3) раствора фотодитазина с концентрацией 0,71 мл/л при комнатной температуре. Длины волн возбуждающего излучения составляли 406,0 нм (2) и 659,6 нм (3)

свойств фотодитазина в качестве фотосенсибилизатора. Его оптические свойства, в частности спектр оптического поглощения, хорошо известны. Фотодитазин имеет линию поглощения на длине волны 653 нм, ряд слабых особенностей в области 500 и 600 нм, а также сильную линию поглощения с максимумом на длине волны 403 нм. Спектры флуоресценции фотодитазина при возбуждении излучением с разными длинами волн были измерены и подробно обсуждались ранее в работе [12]. Результаты этой работы представлены на рис. 1 в виде спектра поглощения раствора фотодитазина и спектров его фотолюминесценции при возбуждении световым излучением с длинами волн 650 и 405 нм.

Одним из важных параметров ФДТ в онкологии является глубина проникновения возбуждающего оптического излучения в биологические ткани. Для указанных целей традиционно используется линия поглощения фотодитазина на длине волны 653 нм,

поскольку излучение с такой длиной волны имеет довольно существенную глубину проникновения. При этом возникают довольно серьезные требования к оптическим элементам, осуществляющим спектральную фильтрацию полезного сигнала фотолюминесценции от паразитного сигнала рассеянного возбуждающего излучения. Так, в случае использования полосовых оптических фильтров для блокировки возбуждающего излучения перепад оптической плотности в узком (около 10 нм) спектральном интервале между длинноволновым краем пика поглощения и коротковолновым краем спектра фотолюминесценции должен быть не менее 3.

Как видно из спектров поглощения, приведенных на рис. 1, коэффициент поглощения на длине волны 403 нм, по крайней мере, в пять раз превышает таковой на длине волны 653 нм. Это может приводить к более эффективному возбуждению фотосенсибилизатора коротковолновым излуче-

нием, однако в онкологии излучение в области 400 нм практически не используется в силу малой глубины проникновения.

В стоматологических применениях АФТ проводится на поверхности тканей, что снимает требования к большой глубине проникновения и открывает возможности для использования лазерных излучателей с длиной волны в области 400 нм для эффективного возбуждения фотосенсибилизатора. Такое излучение не только повышает эффективность возбуждения, но и серьезно упрощает спектральную селекцию флуоресценции и рассеянного возбуждающего излучения. Кроме того, спектр флуоресценции при возбуждении коротковолновым излучением имеет дополнительную полосу излучения в области 630 – 680 нм по сравнению со спектром, который возбуждается длинноволновым излучением, а это увеличивает интегральную интенсивность флуоресценции.

Устройство системы визуализации фотохимической реакции

В разработанной системе визуализации фотохимической реакции для флуоресцентной диагностики в процессе АФТ применен лазерный излучатель, в составе которого используется полупроводниковый лазерный диод на основе нитрида галлия с длиной волны излучения 405 нм в стандартном корпусе ТО-18. Плата питания лазерного диода выполнена на основе прецизионного интегрального стабилизатора тока, обеспечивающего стабильную выходную оптическую мощность лазерного излучения до 10 мВт. Этого значения мощности достаточно для диагностического облучения фотосенсибилизатора и возбуждения его фотолюминесценции.

В качестве фоточувствительного компонента в системе использован малогабаритный кремниевый КМОП-сенсор изображения (фоточувствительная комплементарная матричная структура металл-оксид-полупроводник). Применение современных приборов такого типа с высокой степенью интеграции аналоговой и цифровой схмотехники, с цифровыми управляющими входами и цифровым выводом

данных обеспечивает простоту их сопряжения со специализированными контроллерами и малые габариты результирующего устройства. В системе применен специализированный контроллер, преобразующий «сырые» данные с сенсора в видеопоток по стандарту UVC, передающийся в компьютер по интерфейсу USB.

Спектр чувствительности сенсора определяется, главным образом, фундаментальными свойствами кремния и ограничен с длинноволновой стороны (длина волны около 1 мкм) шириной запрещенной зоны кремния, а с коротковолновой стороны (около 400 нм) – совокупным действием поверхностной рекомбинации и ограниченной глубины проникновения света. Для блокировки возбуждающего излучения применен оптический фильтр с границей пропускания на длине волны 550 нм. Таким образом, спектральная фоточувствительность системы согласована со спектром фотолюминесценции фотодитазина.

Система размещена в малогабаритном корпусе, представляющем собой, фактически, интраоральную камеру с встроенным излучателем. Поле зрения камеры на рабочем расстоянии до объекта (около 15 мм) составляет 1 см². Конструкция системы обеспечивает согласование поля зрения камеры и области, облучаемой диагностическим излучением. Питание всей системы осуществляется по USB.

Принцип работы системы визуализации фотохимической реакции

Разработанная в данной работе система визуализации фотохимической реакции позволяет осуществить захват, выполнить оцифровку, и передать флуоресцентное изображение участка интраорального пространства на монитор персонального компьютера в режиме реального времени. При этом оператор сможет проводить как визуальный контроль места локализации наиболее интенсивной фотохимической реакции, так и провести количественный анализ полученных таким образом цифровых флуоресцентных изображений. Это может позволить оператору выявить на изображении области с искомыми пороговыми или мак-

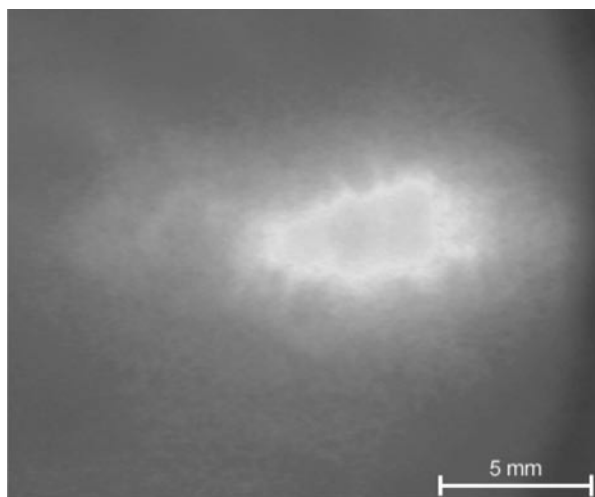


Рис. 2. Пространственное распределение интенсивности флуоресценции раствора фотодитазина, нанесенного неоднородно на поверхность бумаги.

Самые светлые области изображения соответствуют максимальной концентрации фотодитазина

симальными значениями интенсивности фотохимической реакции. Знание закономерностей, связывающих интенсивность флуоресценции в каждой точке на поверхности исследуемого объекта с локальной концентрацией фотосенсибилизатора, которая в свою очередь должна коррелировать с локальным остаточным числом патогенных микроорганизмов или патологических клеток, позволяет оператору получать объективные данные об эффективности интраоральной фотодинамической терапии непосредственно в процессе ее применения.

Пример изображения, полученного с помощью предложенной в данной работе системы визуализации фотохимической реакции, приведен на рис. 2. Оно представляет собой картину пространственно-

го распределения флуоресценции раствора фотодитазина, нанесенного на поверхность бумаги. Значение яркости каждого пикселя изображения несет информацию об интенсивности флуоресценции фотодитазина в соответствующих точках поверхности листа бумаги. В данном эксперименте раствор фотодитазина распределен по площади листа бумаги неоднородно, и поэтому на рис. 2 можно увидеть области с различной яркостью. Самые светлые области изображения соответствуют максимальной концентрации фотодитазина.

Заключение

В данной работе представлены принципы действия и устройство новой системы визуализации фотохимической реакции, которая, благодаря своей компактности, позволяет проводить манипуляции в интраоральной полости пациента стоматологического медицинского учреждения. Возможность проведения количественного анализа интенсивности фотохимической реакции по флуоресцентным изображениям позволяет проводить с помощью данной системы диагностику остаточного числа патогенных бактерий в полости рта непосредственно в режиме реального времени. Таким образом, представленная система визуализации фотохимической реакции существенно расширяет возможности стоматологии и может быть использована как при диагностике, так и при антибактериальной фотодинамической терапии стоматологических заболеваний.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации (Минобрнауки России) в рамках реализации комплексного проекта по созданию высокотехнологичного производства (договор № 02.G25.31.0064).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Henderson B.W., Dougherty T.J. How does photodynamic therapy work? // *Photochemistry and Photobiology*. 1992. Vol. 55. No. 1. Pp. 145–157.

[2] Гельфонд М.Л. Фотодинамическая терапия в онкологии // *Практическая онкология*. 2007. Т. 8. № 4. С. 204–210.

[3] Инновация в медицине. Фотодинамическая терапия. Режим доступа: <http://фотодита->

зин.рф/ Дата обращения 20.10.2015.

[4] Воробьев Л.Е., Софронов А.Н., Фирсов Д.А. и др. Лазерные диоды для фотодинамической терапии // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2011. № 2(122). С. 80–84.

[5] Lee S., Isabelle M.E., Gabally-Kinney K.L., et al. Dual-channel imaging system for singlet oxy-

gen and photosensitizer for PDT // *Biomedical Optics Express*. 2011. Vol. 2. No. 5. Pp. 1233–1242.

[6] **Lisheng Lin, Huiyun Lin, Shusen Xie, et al.** Imaging singlet oxygen luminescence in blood vessels // *SPIE Newsroom*. DOI: 10.1117/2.1201406.005511. 2014. URL: <http://spie.org/x108772.xml>

[7] **Аникеева М.С., Софронов А.Н., Дремов С.С., Тер-Мартirosян А.Л.** Цифровая система визуализации флуоресценции для фотодинамической терапии // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление*. 2012. № 6 (162). С. 159–164.

[8] **Тер-Мартirosян А.Л., Гельфонд М.Л., Дремов С.С., Софронов А.Н.**, Патент РФ № 2551634. Устройство для флуоресцентной диагностики злокачественных новообразований. Оpubл.: 27.05.2015. Бюл. № 15.

[9] Прибор медицинский «Флуовизор®». Рег. уд. от 15.07.2015 г. № РЗН 2015/2870.

[10] **Бобров А.П., Бадмаева А.Н., Кузнецов А.В.** Применение фотодитазина при лечении воспалительных заболеваний пародонта, вызванных зубными протезами // *Российский биотерапевтический журнал*. 2008. Т. 7. № 4. С. 44–46.

[11] **Янушевич О.О., Айвазова Р.А., Соколова Е.Ю.** Фотоактивируемая дезинфекция как альтернатива традиционным методам антисептического воздействия в эндодонтии, пародонтологии и гастроэнтерологии // *Эндодонтия Today*. 2014. Вып. 3. С. 3–8.

[12] **Винниченко М.Я., Софронов А.Н., Фирсов Д.А. и др.** Исследование оптических свойств фотодитазина для расширения возможностей фотодинамической терапии // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2014. № 3 (201). С. 110–117.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАНЕВИН Вадим Юрьевич — старший преподаватель кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
pvyu@rphf.spbstu.ru

СОФРОНОВ Антон Николаевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Sofronov@rphf.spbstu.ru

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
DmFir@rphf.spbstu.ru

ТЕР-МАРТИРОСЯН Александр Леонович — доктор технических наук, генеральный директор Закрытого акционерного общества «Полупроводниковые приборы», ведущий инженер кафедры световых технологий и оптоэлектроники Санкт-Петербургского национального исследовательского университета информационных технологий, механики и оптики.

194156, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, 27,
197101, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49
sales@atcsd.ru

Panevin V.Yu., Sofronov A.N., Firsov D.A., Ter-Martirosyan A.L. DIGITAL SYSTEM OF FLUORESCENCE VISUALIZATION FOR ANTIBACTERIAL PHOTODYNAMIC THERAPY IN DENTISTRY.

In the present work the novel compact system for visualization of the spatial intensity distribution of the photosensitizer fluorescence for the antibacterial photodynamic therapy in dentistry is suggested. The compact intraoral system includes visible imaging camera and violet laser diode. The wavelength of the laser radiation is matched to the short-wavelength absorption peak of the photoditazin, so the effective excitation of its fluorescence is ensured. The built-in spectral-selective optical filter allows the camera to detect only the spatial distribution of the fluorescence intensity while the excitation radiation is blocked. Intraoral fluorescent

images obtained with the suggested system can be used for diagnosis of residual amount of pathogens.

DENTISTRY, ANTIBACTERIAL PHOTODYNAMIC THERAPY, FLUORESCENCE VISUALIZATION, INTRAORAL CAMERA.

REFERENCES

- [1] **B.W. Henderson, T.J. Dougherty**, How does photodynamic therapy work? *Photochemistry and Photobiology*. 55 (1) (1992) 145–157.
- [2] **M.L. Gelfond**, Fotodinamicheskaya terapiya v onkologii [Photodynamic therapy for cancer], *Prakticheskaya onkologiya*. 8(4) (2007) 204–210.
- [3] Innovation in Medicine, Photodynamic Therapy, URL: <http://fotoditazin.com/Data:20.10.2015>.
- [4] **L.Ye. Vorobyev, A.N. Sofronov, D.A. Firsov, et al.**, Laser diodes for photodynamic therapy, *St.Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. No. 2(122) (2011) 80–84.
- [5] **S. Lee, M.E. Isabelle, K.L. Gabally-Kinney, et al.**, Dual-channel imaging system for singlet oxygen and photosensitizer for PDT, *Biomedical Optics Express*. 2(5) (2011) 1233–1242.
- [6] **Lisheng Lin, Huiyun Lin, Shusen Xie, et al.**, Imaging singlet oxygen luminescence in blood vessels, *SPIE Newsroom*. DOI: 10.1117/2.1201406.005511. 2014. URL: <http://spie.org/x108772.xml>.
- [7] **M.S. Anikeyeva, A.N. Sofronov, S.S. Dremov, A.L. Ter-Martirosyan**, Digital system for fluorescence visualization for photodynamic therapy, *St.Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science. Telecommunications and Control Systems*. No. 6 (162) (2012) 159–164.
- [8] **A.L. Ter-Martirosyan, M.L. Gelfond, S.S. Dremov, A.N. Sofronov**, Patent RF No. 2551634, Device for the fluorescent diagnostics of the cancerous tumors, Publ.: 27.05.2015 Bull. No 15.
- [9] Medical Device «Fluovisor®», reg. cert. No. RZN 2015/2870, 15.07.2015
- [10] **A.P. Bobrov, A.N. Badmayeva, A.V. Kuznetsov**, Primenenie fotoditazina pri lechenii vospalitelnykh zabolevaniy parodonta, vyzvannykh zubnymi protezami [Photoditazin in the treatment of prosthetic gingivitis and periodontitis], *Rossiyskiy bioterapevticheskiy zhurnal*. 7 (4) (2008) 44 – 46.
- [11] **O.O. Yanushevich, R.A. Ayzazova, E.Yu. Sokolova**, Fotoaktiviruemaya dezinfektsiya kak alternativa traditsionnym metodam antisepticheskogo vozdeystviya v endodontii, paradontologii i gastroenterologii [Photoactivated decontamination as an alternative method of treatment in endodontics, periodontology and gastroenterology], *Endodontiya Today*. No. 3 (2014) 3–8.
- [12] **M.Ya. Vinnichenko, A.N. Sofronov, D.A. Firsov, et al.**, Investigation of photoditazin optical properties for expanding possibilities of photodynamic therapy, *St.Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. No. 3(201) (2014) 110–117.

THE AUTHORS

PANEVIN Vadim Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
pvyu@rphf.spbstu.ru

SOFRONOV Anton N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Sofronov@rphf.spbstu.ru

FIRSOV Dmitry A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
DmFir@rphf.spbstu.ru

TER-MARTIROSYAN Alexander L.

Joint-stock company 'ATC-Semiconductor Devices';
Saint-Petersburg National Research University
of Information Technologies, Mechanics and Optics
P.O. Box 29, St.Petersburg, 194156, Russian Federation
49 Kronverskiy Av., St.Petersburg, 197101, Russian Federation
sales@atcsd.ru

DOI: 10.5862/JPM.230.8

УДК: 537.533.621.3

К.В. Соловьев

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

АЛГОРИТМ ТРАЕКТОРНОГО АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ УГЛОВУЮ ФОКУСИРОВКУ ЗАДАННОГО ПОРЯДКА В ПЛОСКОСТИ СИММЕТРИИ

Изучен класс фокусирующих электростатических полей, построенный путем решения обратной задачи корпускулярной оптики. Предложен и протестирован эффективный алгоритм расчета траекторий в таких полях, базирующийся на параметрическом задании потенциалов. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании новых энергоанализирующих устройств с улучшенными характеристиками

ЭНЕРГОАНАЛИЗ, ЭЛЕКТРОННАЯ ОПТИКА, ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА, УГЛОВАЯ ФОКУСИРОВКА.

Решение обратных задач динамики заряженных частиц в электрических и магнитных полях является мощным средством синтеза новых корпускулярно-оптических систем, обладающих требуемыми характеристиками. Среди результатов, полученных в рамках данного подхода, следует отметить, например, построение энергоанализирующей системы с идеальной фокусировкой в плоскости симметрии [1], создание масс-сепарирующих систем с идеальной пространственно-временной фокусировкой пучка [2]. Несмотря на солидный арсенал накопленных аналитических средств (см., например, монографии [3, 4]), количество решенных обратных задач корпускулярной оптики невелико [5], а получение, анализ и приложения новых решений представляют несомненный интерес и не теряют своей актуальности.

Рассматриваемые в данной работе поля с плоскостью симметрии могут служить основой современных приборов дисперсионного анализа пучка заряженных частиц по энергиям. Идея работы таких приборов состоит в дискриминации частиц по энер-

гии и концентрации по другим параметрам (в частности, по углу старта). Об интересе к энергоанализаторам, свидетельствует выход в последнее время ряда монографий и статей [6–8], авторы которых развивают теорию данного вида устройств.

Профессор СПбПУ Ю.К. Голиков предложил следующий подход к постановке задачи поиска симметричных электростатических структур с заданными свойствами [1, 5, 9]. Рассматривается плоскость ZOX , которая далее ассоциируется с плоскостью симметрии системы. Потенциал f зависит лишь от координаты x , зависимость $f(x)$ монотонна и обеспечивает торможение заряженной частицы, движущейся в положительном направлении оси x . Вдоль оси z частица дрейфует, поскольку сила по координате z отсутствует. Далее предполагается, что частица, обладающая безразмерной энергией W (безразмерные переменные введены согласно [5, 9]), стартует из начала координат под углом θ ($0 < \theta < \pi/2$) к оси z . Отразившись в поле $f(x)$, частица должна вновь оказаться на оси z в точке фокуса $z = P(A)$, где $A = W \sin^2 \theta$. Условие

равенства времен движения по координатам x и z приводит к интегральному уравнению, позволяющему построить по функции прилета $P(A)$ одномерное неявное (в виде зависимости $x = F(f)$) распределение потенциала, реализующее функцию $P(A)$. Решение данного интегрального уравнения имеет вид

$$x = F(f) = \frac{1}{2\pi} \int_0^f \frac{P(A) dA}{\sqrt{(f-A)(W-A)}} \quad (1)$$

и в ряде важных случаев может быть записано в элементарных функциях. В частности, идеальной угловой фокусировке (в диапазоне углов $0 < \theta < \pi$) соответствует случай $P(A) = 1$,

$$x = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{\sqrt{W} + \sqrt{f}}{\sqrt{W} - \sqrt{f}} = \frac{1}{2\pi} L. \quad (2)$$

Если выразить f через x , то получается хорошо известное поле системы «Гутанхмон» [1, 5, 9]:

$$f(x) = \text{th}^2 \pi x. \quad (3)$$

Фокусировке k -го порядка соответствует функция

$$P(A) = 1 + g(A)(A - A_0)^{k+1},$$

где значение параметра A_0 определяется углом фокусировки θ_0 , а $g(A)$ — произвольная зависимость, удовлетворяющая условию $g(A_0) \neq 0$.

Приведем для примера потенциалы, реализующие указанную функцию прилета при $k = 0, 1, 2$ и $g(A) \equiv 1$:

$$x = F_0(f) = \frac{1}{4\pi} (-2\sqrt{fW} - (f + W - 2A_0 + 2)L), \quad (4)$$

$$x = F_1(f) = \frac{1}{16\pi} (-2\sqrt{fW}(3(f+W) - 8A_0) - (3f^2 + 2fW + 3W^2 - 8A_0(f+W) + 8A_0^2 + 8)L), \quad (5)$$

$$x = F_2(f) = \frac{1}{96\pi} (-2\sqrt{fW}(15(f^2 + W^2) + 14fW - 54A_0(f+W) + 72A_0^2) - (5(f^3 + W^3) + 3fW(f+W) - 12A_0fW - 2A_0(9(f^2 + W^2) - 12A_0(f+W) + 8A_0^2) + 16)L), \quad (6)$$

где L определена ранее в формуле (2). Потенциал (4) фокусировки не обеспечивает.

Отметим существенное для дальнейшего

понимания свойство потенциалов (4) — (6). Выбор полиномиальной функции прилета

$$P(A) = 1 + (A - A_0)^{k+1}, \quad A_0^{k+1} \neq 1,$$

приводит к бесконечности производной $x_f = \partial x / \partial f$ при $f = 0$. Действительно, функция (1) с учетом выбранной $P(A)$ является линейной комбинацией интегралов

$$I_s = \int_0^f \frac{A^s dA}{\sqrt{(f-A)(W-A)}}, \quad s = 0, 1, \dots, k+1$$

Очевидно, что

$$\frac{\partial I_0}{\partial f} = \frac{\sqrt{W}}{(W-f)\sqrt{f}} \xrightarrow{f \rightarrow 0} \infty.$$

Легко показать, что

$$\frac{\partial I_s}{\partial f} = s I_{s-1} - \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{s-1} W^m I_{s-1-m} + \frac{W^{k-1/2} \sqrt{f}}{W-f} \xrightarrow{f \rightarrow 0} 0, \quad s > 0,$$

поскольку для любого неотрицательного s при $f \rightarrow 0$ и $I_s \rightarrow 0$. Соответственно, линейная комбинация интегралов I_s , $s = 0, 1, \dots, k+1$ бесконечна при $f = 0$ для любого целого неотрицательного k .

Предвосхитив возможный вопрос о необходимости построения полей, реализующих фокусировку конечного порядка при наличии поля, обеспечивающего идеальную фокусировку, отметим, что отсутствие каких-либо параметров в структуре поля (3) не позволяет оптимизировать поведение (уже не идеальное) пучка в плоскости, ортогональной плоскости симметрии. В то же время контролируемое снижение качества фокусировки в плоскости ZOX обеспечивает существенную свободу в задании потенциала и, соответственно, в управлении поперечным поведением пучка.

Возвращаясь к потенциалам (4) — (6), можно заметить, что, в отличие от потенциала (2), их обращение и запись в форме, аналогичной (3), невозможна. В то же время дальнейший траекторный анализ системы предполагает решение прямой задачи, что, при рассмотрении пока лишь движения в плоскости симметрии, приводит к уравнениям вида

$$\ddot{x} = -f_x \quad (7)$$

или, с учетом особенностей задания потенциала, к уравнениям

$$\ddot{x} = -1 / x_f. \quad (8)$$

Однако, поскольку x_f зависит не от x , а от f , при численном интегрировании (8) возникает необходимость в многократном решении уравнения $x = F(f)$ для определения f по заданному x на каждом шаге интегрирования. При имеющихся выражениях (4) – (6) это приводит как к потере точности, так и неоправданному росту времени вычислений.

С учетом вышеизложенного, представляется логичным применить другой подход. Перейдем к переменной f в качестве независимой. В результате получим уравнение

$$\ddot{f} = -x_{ff} / x_f \cdot \dot{f}^2 - 1 / x_f^2 \quad (9)$$

с начальными условиями

$$f(0) = 0, \quad \dot{f}(0) = \dot{x}(0) / x_f(0). \quad (10)$$

Но, как показано выше, $x_f(0) = \infty$. Соответственно, $f_x(0) = 0$, и использование второго из начальных условий (10) для однозначного задания траектории становится невозможным.

Выходом из возникшего затруднения может служить введение параметризации. Пусть $x = x(p)$, $f = f(p)$. Тогда из уравнения (7) получаем уравнение для параметра p :

$$\ddot{p} = -(x_{pp} / x_p) \dot{p}^2 - f_p / x_p^2 \quad (11)$$

с начальными условиями

$$p(0) = 0, \quad \dot{p}(0) = \dot{x}(0) / x_p(0). \quad (12)$$

Для регуляризации удобно ввести

$$f = p^2, \quad (13)$$

поскольку при этом устраняются дробные степени в структуре выражений (4) – (6). Решение прямой задачи (11), (12) с учетом параметризации (13) демонстрирует совпадение ее результатов с условиями обратной задачи, что и доказывает работоспособность алгоритма (рис. 1).

Следующим этапом исследования является рассмотрение движения заряженной частицы в пространстве трех измерений.

Прежде всего, необходимо построить

потенциал в пространстве при наличии лишь его обратного одномерного представления $x = F(f)$. Задача сводится (ввиду отсутствия зависимости потенциала от z) к задаче аналитического продолжения функции комплексного переменного с прямой на плоскость. Введем комплексный потенциал $\Omega = \psi + i\varphi$ и запишем [5]:

$$x + iy = F(-i\Omega) = X(\varphi, \psi) + iY(\varphi, \psi). \quad (14)$$

Получаем параметрическое представление

$$\begin{aligned} x &= X(\varphi, \psi) = \operatorname{Re} F(-i\Omega), \\ y &= Y(\varphi, \psi) = \operatorname{Im} F(-i\Omega), \end{aligned} \quad (15)$$

которое удобно использовать при построении сечений эквипотенциальных поверхностей $\varphi = c = \operatorname{const}$ плоскостями $z = \operatorname{const}$, зафиксировав φ и варьируя ψ .

Уравнения движения в трехмерном случае по-прежнему тривиальны:

$$\ddot{x} = -\varphi_x, \quad \ddot{y} = -\varphi_y, \quad \ddot{z} = 0, \quad (16)$$

но их прямое решение сталкивается с проблемами, аналогичными описанным для случая одного измерения. Дело в том, что выразить явно φ_x , φ_y через x и y невозможно, а использование $x_\varphi, x_\psi, y_\varphi, y_\psi$, через которые представляются функции правой части уравнений (16), приводит к необходимости численного решения системы (15) относительно φ и ψ по ходу процедуры интегрирования. Рассматривать φ и ψ в качестве новых координат нельзя, ввиду неоднозначности задания интегральных кривых набором начальных условий.

К счастью, проверенный на примере плоской задачи метод (11), (12) легко распространяется на случай трех измерений. Итак, вводя для одномерного случая параметр p соотношением $f = G(p)$, мы получили связь

$$x = F(G(p)) = F^*(p).$$

Учитывая представления (14), (15), переходим к комплексной параметризации путем формальной замены x на $x + iy$, p на $p + iq$, f на $-i\Omega = \varphi - i\psi$:

$$x + iy = \operatorname{Re} F^*(p + iq) + i \operatorname{Im} F^*(p + iq), \quad (17)$$

$$\varphi - i\psi = \operatorname{Re} G(p + iq) + i \operatorname{Im} G(p + iq). \quad (18)$$

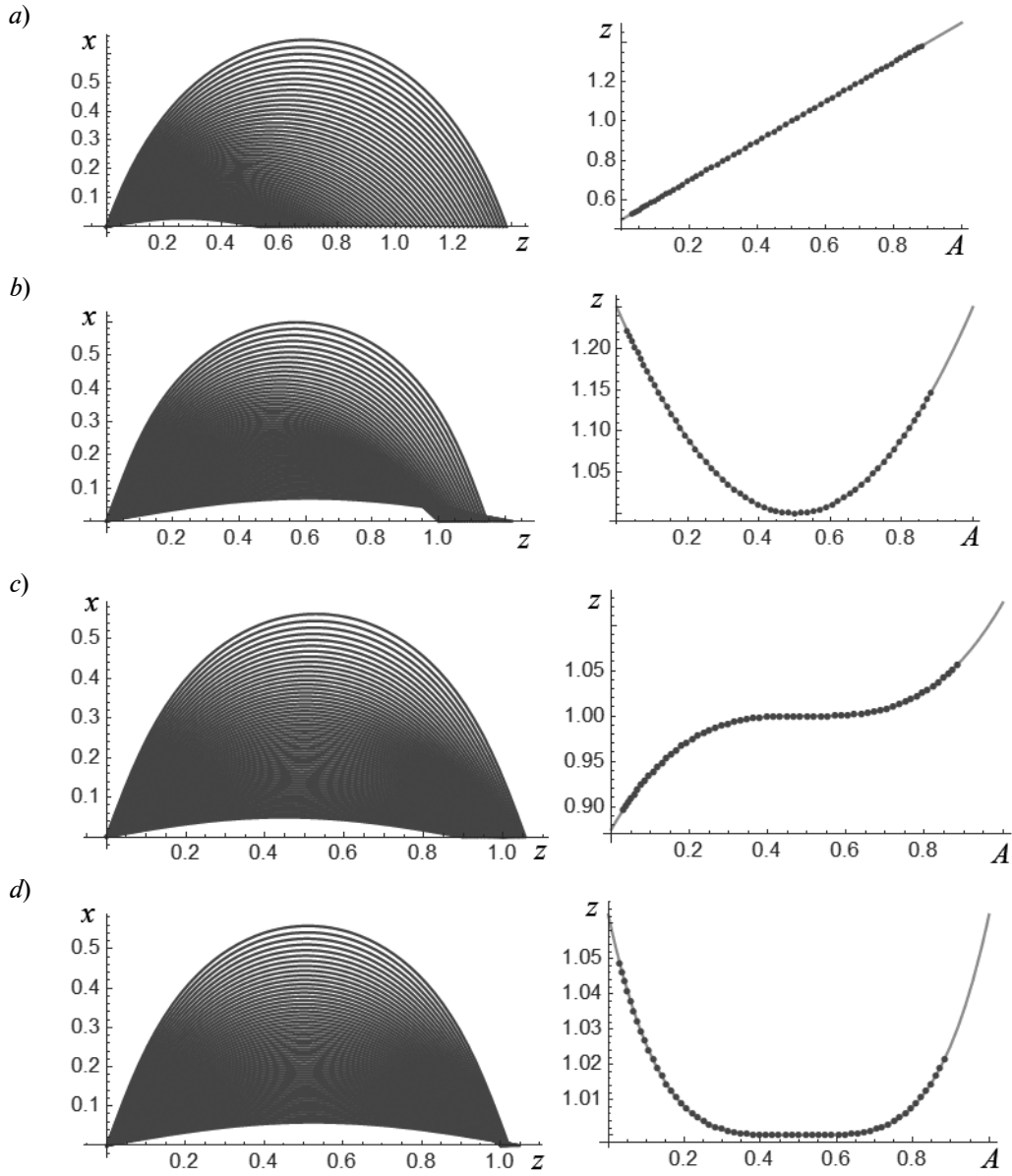


Рис. 1. Результаты расчета траекторий (слева) и функций прилета (справа) заряженных частиц в плоскости ZOX электростатического поля для различных k : 0 (а), 1 (б), 2 (с), 3 (д). Показано совпадение решения прямой задачи (11), (12) с условиями обратной задачи; $A = W \sin^2 \theta$

Для равенства (13) выражение (18), очевидно, дает следующие соотношения:

$$\varphi = p^2 - q^2, \quad \psi = 2pq. \quad (19)$$

Отделив вещественную и мнимую части (17), (18), получим параметрическую связь x, y и φ, ψ посредством пары p, q .

Приняв p, q за новые координаты, найдем уравнения движения. Согласно равенству (17),

$$x = x(p, q), \quad y = y(p, q). \quad (20)$$

Дифференцируя эти функции дважды по времени, а затем, разрешая результат относительно \ddot{p}, \ddot{q} , имеем следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \ddot{p} = & ((y_{pp}x_q - y_qx_{pp})\dot{p}^2 + \\ & + 2(x_qy_{pq} - x_{pq}y_q)\dot{p}\dot{q} + \\ & + (y_{qq}x_q - x_{qq}y_q)\dot{q}^2 + \end{aligned} \quad (21)$$

$$+ (\ddot{x} y_q - \ddot{y} x_q) / (x_p y_q - x_q y_p); \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \ddot{q} = & ((x_{pp} y_p - x_p y_{pp}) \dot{p}^2 + \\ & + 2(y_p x_{pq} - x_p y_{pq}) \dot{p} \dot{q} + \\ & + (x_{qq} y_p - y_{qq} x_p) \dot{q}^2 + \\ & + (\ddot{y} x_p - \ddot{x} y_p) / (x_p y_q - x_q y_p). \end{aligned} \quad (22)$$

Входящие в соотношения (21), (22) вторые производные координат x , y следует заменить домноженными на минус единицу компонентами градиента потенциала, предварительно преобразовав последний с учетом его параметризации. Таким образом, необходимо найти φ_x , φ_y с учетом следующей из (18) параметризации $\varphi = \varphi(p, q)$.

Рассматривая функцию $\varphi = \varphi(p(x, y), q(x, y))$ как сложную и принимая во внимание тождество

$$p(x(p, q), y(p, q)) \equiv p,$$

$$q(x(p, q), y(p, q)) \equiv q,$$

получаем компоненты поля в виде отношений якобианов:

$$\varphi_x = \frac{\begin{vmatrix} \varphi_p & \varphi_q \\ y_p & y_q \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} x_p & x_q \\ y_p & y_q \end{vmatrix}}, \quad \varphi_y = \frac{\begin{vmatrix} \varphi_p & \varphi_q \\ x_p & x_q \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} x_p & x_q \\ y_p & y_q \end{vmatrix}}. \quad (23)$$

Знаменатели в отношениях (23) не равны нулю, по крайней мере в некоторой окрестности плоскости симметрии, ввиду неравенства нулю x_p в одномерном случае.

Результат подстановки φ_x , φ_y (23) в соотношения (21), (22) имеет вид

$$\begin{aligned} \ddot{p} = & ((y_{pp} x_q - y_q x_{pp}) \dot{p}^2 + \\ & + 2(x_q y_{pq} - x_{pq} y_q) \dot{p} \dot{q} + \\ & + (y_{qq} x_q - x_{qq} y_q) \dot{q}^2) / (x_p y_q - x_q y_p) + \\ & + (-\varphi_p (x_q^2 + y_q^2) + \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & + \varphi_q (x_p x_q + y_p y_q)) / (x_p y_q - x_q y_p)^2; \\ \ddot{q} = & ((x_{pp} y_p - x_p y_{pp}) \dot{p}^2 + \\ & + 2(y_p x_{pq} - x_p y_{pq}) \dot{p} \dot{q} + \\ & + (x_{qq} y_p - y_{qq} x_p) \dot{q}^2) / (x_p y_q - x_q y_p) + \\ & + (-\varphi_q (x_q^2 + y_q^2) + \end{aligned} \quad (25)$$

$$+ \varphi_p (x_p x_q + y_p y_q)) / (x_p y_q - x_q y_p)^2. \quad (25)$$

Начальные условия для уравнений (24), (25) при известных значениях начальных условий $x(0)$, $y(0)$, $\dot{x}(0)$, $\dot{y}(0)$ и с учетом соотношений

$$\dot{x} = x_p \dot{p} + x_q \dot{q}, \quad \dot{y} = y_p \dot{p} + y_q \dot{q} \quad (26)$$

принимают вид

$$p(0) = 0, \quad q(0) = 0, \quad (27)$$

$$\dot{p}(0) = \frac{\dot{x}(0) y_q(0) - x_q(0) \dot{y}(0)}{x_p(0) y_q(0) - x_q(0) y_p(0)}, \quad (28)$$

$$\dot{q}(0) = \frac{x_p(0) \dot{y}(0) - \dot{x}(0) y_p(0)}{x_p(0) y_q(0) - x_q(0) y_p(0)}. \quad (29)$$

Уравнения движения (24), (25) и начальные условия (27), (28) получены без учета конкретного вида параметризации. Для произвольного $k \in N$ всегда можно найти поле $x = F_k(f)$ и, используя равенство (17), получить явный вид связи (20). Также легко определить в аналитическом виде все входящие в уравнения (24), (25), (28) производные (20).

С учетом выражений (19) получаем следующие соотношения:

$$\varphi_p = 2p, \quad \varphi_q = -2q. \quad (30)$$

Начальные условия (27), (28) полностью определены начальными условиями по координатам x , y .

Таким образом, задача Коши (24), (25), (27), (28) может быть решена, ее решение – функции $p(t)$, $q(t)$ – найдены. Искомая пространственная траектория определится с учетом (20) как

$$(x(p(t), q(t)), y(p(t), q(t)), \sqrt{2W} \cos \theta \cdot t).$$

Хотя ход решения чрезвычайно прост и прозрачен, подготовительные вычисления требуют достаточно громоздких преобразований, вряд ли возможных за разумное время без применения системы компьютерной алгебры [10].

Тестирование алгоритма проводилось путем сравнения решения задачи для системы «Тутанхамон» [5], заданной параметрически (посредством формул (2), (17)) с результатами прямого интегрирования дви-



жения частицы в поле

$$\varphi(x, y) = \frac{\operatorname{sh}^2 2\pi x - \sin^2 2\pi y}{(\operatorname{ch} 2\pi x + \cos 2\pi y)^2} = \operatorname{Im} i \operatorname{th}^2(x + iy). \quad (31)$$

Указанные результаты совпали с высокой точностью, что доказывает работоспособность предложенного алгоритма расчета.

Таким образом, в работе исследован класс симметричных электростатических

полей, реализующих фокусировку заданного порядка в их средней плоскости. Предложен эффективный алгоритм расчета траекторий в таких полях, базирующийся на специально введенном параметрическом задании потенциалов. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании новых энергоанализирующих устройств с улучшенными характеристиками.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Галль Л.Н., Галль Р.Н., Голиков Ю.К., Уткин К.Г. Электростатический энергоанализатор. Авторское свидетельство № 544307 СССР. МПК Н 01 J 36/26, Н 01 J 39/34. Заявители СКБ АП АН СССР, ЛПИ им. М.И. Калинина. № 2091369/25; заявл. 03.01.75; опубл. Бюл. № 3. 1977.

[2] Галль Л.Н., Голиков Ю.К., Александров М.Л. и др. Времяпролетный масс-спектрометр. Авторское свидетельство № 1247973 СССР. МПК Н 01 J 49/40. Заявители СКБ АП АН СССР, ЛПИ им. М.И. Калинина. № 3840525/24-21, заявл. 16.01.85; опубл. Бюл. № 28. 1986.

[3] Галиуллин А.С. Построение систем программного движения. М.: Наука, 1971. 352 с.

[4] Галиуллин А.С. Методы решения обратных задач динамики. М.: Наука, 1986. 224 с.

[5] Голиков Ю.К., Краснова Н.К. Теория синтеза электростатических энергоанализаторов.

СПб: Изд-во Политехнического университета. 2010. 409 с.

[6] Gurov V.S., Saulebekov A.O., Trubitsyn A.A. Analytical, approximate-analytical and numerical methods in the design of energy analyzers. Waltham – San Diego – Oxford – London: Academic Press (Elsevier Inc), 2015. 222 p.

[7] Yavor M. Optics of charged particle analyzers. Amsterdam. Academic Press (Elsevier Inc), 2009. 405 p.

[8] Khurshheed A. Energy analyzer attachments for the scanning electron microscope // Microscopy and Microanalysis. 2015. Vol. 21. No. 4. Pp. 130–135.

[9] Голиков Ю.К., Уткин К.Г., Григорьев Д.В. Обратные задачи теории электростатических энергоанализаторов // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 9. С. 128–131.

[10] Wolfram Mathematica. Сайт производителя программы www.wolfram.com.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
k-solovyev@mail.ru

Solovyev K.V. THE TRAJECTORY ANALYSIS ALGORITHM FOR ELECTROSTATIC FIELDS PROVIDING AN ANGLE FOCUSING OF GIVEN ORDER IN THE PLANE OF SYMMETRY.

A class of focusing electrostatic fields built as inverse corpuscular optics problem solution has been investigated. An effective algorithm to make trajectory analysis of these fields was suggested and tested. The algorithm was based on the special parametric form of potentials representation.

The main complexity of the problem is to treat the result of inverse form of potential representation, where coordinates are functions of the potential and the flux, but it is impossible to give the potential by an explicit function of coordinates. To solve the equations of motion in a direct form, it is necessary to find (numerically) coordinates at every integration step. It reduces the precision and increases the time of the calculations. We suggested using a parametric form of the potential and the relationship between coordinates. Direct equations of motion can be replaced with differential equations for parameters, which can be solved without any difficulty.

The results obtained can be applied to designing of new energy-analyzing devices with enhanced capabilities.

CHARGED-PARTICLE ENERGY ANALYSIS, ELECTRON OPTICS, INVERSE PROBLEM, ANGLE FOCUSING.

REFERENCES

- [1] **L.N. Gall, R.N. Gall, Yu.K. Golikov, K.G. Utkin**, Elektrostatičeskij energoanalizator [Electrostatic energy analyzer]. Avtorskoye svidetelstvo № 544307 SSSR. MPK H 01 J 36/26, H 01 J 39/34. Zayaviteli SKB AP AN SSSR, LPI im. M.I. Kalinina. No. 2091369/25; zayavl. 03.01.75; opubl. Byul. No. 3. 1977.
- [2] **L.N. Gall, Yu.K. Golikov, M.L. Aleksandrov, Ye.E. Pechalina, N.A. Kholin**, Vremyaproletnyy mass-spektrometr [Time-of-flight mass spectrometer]. Avtorskoye svidetelstvo № 1247973 SSSR, MPK H 01 J 49/40, Zayaviteli SKB AP AN SSSR, LPI im. M.I. Kalinina, № 3840525/24-21, zayavl. 16.01.85; opubl. Byul. No. 28. 1986.
- [3] **A.S. Galiullin**, Postroyeniye sistem programmnogo dvizheniya [Design of programmed motion systems], Moscow, Nauka, 1971.
- [4] **A.S. Galiullin** Metody resheniya obratnykh zadach dinamiki [Methods of inverse dynamics problems solution], Moscow, Nauka, 1986.
- [5] **Yu.K. Golikov, N.K. Krasnova**, Teoriya sinteza elektrostatičeskikh energoanalizatorov [Theory of energy analyzers synthesis], SPb., Izd-vo Politehnicheskogo universiteta, 2010.
- [6] **V.S. Gurov, A.O. Saulebekov, A.A. Trubitsyn**, Analytical, Approximate-Analytical and Numerical Methods in the Design of Energy Analyzers. Waltham-San Diego-Oxford-London. Academic Press (Elsevier Inc), 2015.
- [7] **M. Yavor**, Optics of charged particle analyzers. Amsterdam. Academic Press (Elsevier Inc), 2009.
- [8] **A. Khursheed**, Energy Analyzer Attachments for the Scanning Electron Microscope // Microscopy and Microanalysis, 21 (4) (2015) 130–135.
- [9] **Yu.K. Golikov, K.G. Utkin, D.V. Grigoryev**, Obratnyye zadachi teorii elektrostatičeskikh energoanalizatorov [Inverse problems of electrostatic energy analyzers theory], ZhTF. 69 (9) (1999) 128–131
- [10] Wolfram Mathematica. Sayt proizvoditelya [Manufacturer site] www.wolfram.com

THE AUTHOR

SOLOVYEV Konstantin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

k-solovyev@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.230.9

УДК: 531.8

*Н.Р. Кудинова¹, В.А. Полянский¹,
А.М. Полянский², Ю.А. Яковлев¹*

¹ Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург

² НПК «Электронные и пучковые технологии», г. Санкт-Петербург

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ МАТЕРИАЛОВ С МИКРО- И НАНОСТРУКТУРОЙ

Предлагается новый подход к моделированию пластичности материалов с ультрамелкодисперсной и наноструктурой, главным преимуществом которого является минимальное количество используемых физических параметров. В рамках предлагаемой модели проведен расчет объемной плотности энергии поверхностного натяжения зерен, формирующих структуру материала, которая составляет значительную часть внутренней энергии при деформации. Зависимость температуры плавления наночастиц от их размера сопоставлена с экспериментальными данными. На ее основании получена модельная зависимость предела текучести от размера частиц материала. Она интерпретирована как результат изменения энергии поверхностного натяжения структурных зерен при деформации. Проведено сопоставление полученной зависимости с законом Холла – Петча, которое дополнительно подтверждает гипотезу о решающей роли сил поверхностного натяжения в начальной фазе пластического деформирования ультрамелкодисперсных материалов.

УЛЬТРАМЕЛКОДИСПЕРСНАЯ СТРУКТУРА, НАНОСТРУКТУРА, ПРЕДЕЛ ТЕКУЧЕСТИ, ТЕМПЕРАТУРА ПЛАВЛЕНИЯ.

Введение

Материалы с ультрамелкодисперсной структурой и наноструктурой обладают экстремальными механическими характеристиками. Это ставит перед конструкторами сложную задачу выбора необходимого материала при проектировании и расчетах машин и конструкций. Внутреннюю структуру материала можно изменять в процессе изготовления детали. Например, при прессовании можно придавать ей требуемые свойства в разных частях детали. Эти возможности делают необходимым предсказание механических характеристик материала на этапе проектирования машин. Такое прогнозирование еще более важно при проектировании новых материалов.

Для указанного прогноза необходима модель изменения механических характеристик материала в зависимости от размера и формы структурных элементов. Важнейшим механическим параметром конструкционного материала является предел текучести. С одной стороны, линейный характер зависимости напряжений от деформаций при отсутствии текучести позволяет быстро и точно производить расчеты на прочность, с другой стороны, пластическое течение материала позволяет сгладить сингулярности поля напряжений. Благодаря явлению упрочнения, возникающего в зонах пластической деформации, появляется дополнительный запас по прочности. При штамповании и прессовании пластическое течение является основным видом деформации.

В этом случае знание механических характеристик материала, например таких, как предел текучести, необходимо для расчета параметров технологического процесса.

Пластическое деформирование сопровождается неупругими потерями энергии. Величина предела текучести характеризует упругую энергию, необходимую для начала процесса пластических деформаций материала. Несмотря на то, что режим пластического деформирования напоминает деформирование материала в жидкой фазе, удельные энергии, необходимые для нагревания материала до температуры плавления и полного расплавления, имеют значительно более высокие (на порядок) значения, чем энергии упругой и максимально возможной пластической деформаций (вплоть до разрушения материала).

Ввиду указанного различия считается, что механизм пластической деформации связан либо со скольжением зерен металла [1, 2], либо с развитием и перемещением дислокаций, которые приводят к росту микротрещин [3 – 6].

Ростом микротрещин Н.Дж. Петч [7] объяснил экспериментальную зависимость предела текучести от среднего размера зерен материала. Эта зависимость (закон Холла – Петча) нарушается только при размерах зерен менее 1 мкм. Она является своеобразным тестом для различных теорий пластичности, учитывающих размер зерна [1 – 3].

Вместе с тем, образование микротрещин при достижении предела текучести происходит не всегда, особенно в материалах с мелкодисперсной структурой.

Согласно дислокационной теории пластичности [8], все механические характеристики сильно зависят от плотности дислокаций на поверхности зерен. Эта величина не поддается прямому измерению, поэтому прогностическая ценность дислокационного подхода невелика. Мезомеханика [9] описывает пластичность как коллективные дислокационные эффекты, т. е. в модельном смысле содержит в себе дислокационную теорию со всеми ее достоинствами и недостатками.

Таким образом, известные механизмы пластичности не дают возможности построить прогностическую расчетную модель материала, которая позволила бы предсказать конкретные значения предела текучести.

Помимо изменения предела текучести, измельчение структурных элементов сказывается на температурной точке плавления. Последняя определяется экспериментально для микро- и нанодисперсных материалов, но не столь однозначно, как предел текучести. Например, агрегированные и порошковые металлические наноматериалы могут иметь различные значения температуры плавления, тогда как металлические нанопорошки чистых металлов в среде инертного газа характеризуются снижением температуры плавления при уменьшении размеров наночастиц от 20 до 1 – 2 нм [10].

Изменение температуры плавления, очевидно, связано с уменьшением коэффициента поверхностного натяжения, так как вероятность отрыва отдельных атомов и молекул от кристаллита в результате теплового движения при этом возрастает. Кроме того, известно, что экспериментальная зависимость температуры плавления от коэффициента поверхностного натяжения является линейной для различных веществ [11]. Эта экспериментальная закономерность свидетельствует об отсутствии сильного влияния межграницного взаимодействия кристаллитов на силы поверхностного натяжения и процесс плавления при среднем размере кристаллита порядка 100 мкм. Следовательно, можно рассматривать поверхностную энергию кристаллитов как отдельную составляющую внутренней энергии материала.

Влияние сил поверхностного натяжения кристаллитов на предел текучести материала пока не исследовано. Но сама экспериментальная процедура измерения сил поверхностного натяжения, основанная на механизме «нулевой ползучести» [12], свидетельствует о наличии такого влияния. Следовательно, если известна зависимость энергии поверхностного натяжения от размера кристаллитов, то можно предсказывать изменения предела текучести при



измельчении структуры металла. Это является предпосылкой для построения модели, которая бы позволяла предсказывать значения предела текучести по объемной плотности энергии поверхностного натяжения.

Оценка связи коэффициента поверхностного натяжения частиц с их размером

Уравнение Гиббса – Толмена – Кенинга – Бафа [13, 14] для сферической частицы имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln R} = \frac{\frac{2\delta}{R} \left(1 + \frac{\delta}{R} + \frac{1}{3} \frac{\delta^2}{R^2} \right)}{1 + \frac{2\delta}{R} \left(1 + \frac{\delta}{R} + \frac{1}{3} \frac{\delta^2}{R^2} \right)}, \quad (1)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения; R – радиус частицы; δ – постоянная Толмена, равная по порядку величины толщине поверхностного слоя частицы.

В общем случае данное уравнение неразрешимо в явном виде, так как постоянная δ зависит от радиуса. Для его решения

принимается условие $R \gg \delta$, что позволяет избавиться от слагаемых порядка $O\left(\frac{2\delta}{R}\right)$. Интегрирование уравнения (1) в этом случае приводит к следующей известной формуле [15]:

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + \frac{2\delta}{R}}, \quad (2)$$

где σ_0 – коэффициент поверхностного натяжения для плоской поверхности.

С учетом условия $R \gg \delta$ можно получить и другое асимптотическое выражение для коэффициента поверхностного натяжения [15]:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{2\delta}{R}\right). \quad (3)$$

Решения (2) и (3) чаще всего рассматриваются как наиболее близкие к точному. Именно их обычно используют для сравнения с экспериментальными данными.

Однако существует общее решение

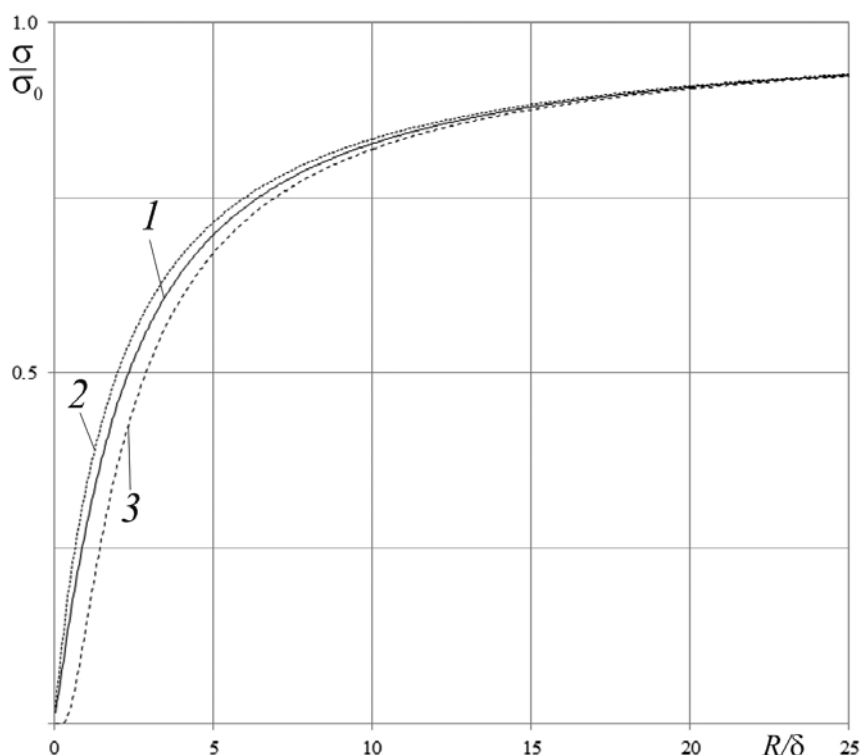


Рис. 1. Графики зависимости нормированного на константу σ_0 коэффициента поверхностного натяжения от радиуса частицы, нормированного постоянной δ . Кривая 1 – точное решение (4), кривые 2 и 3 – аппроксимации (2) и (3), соответственно

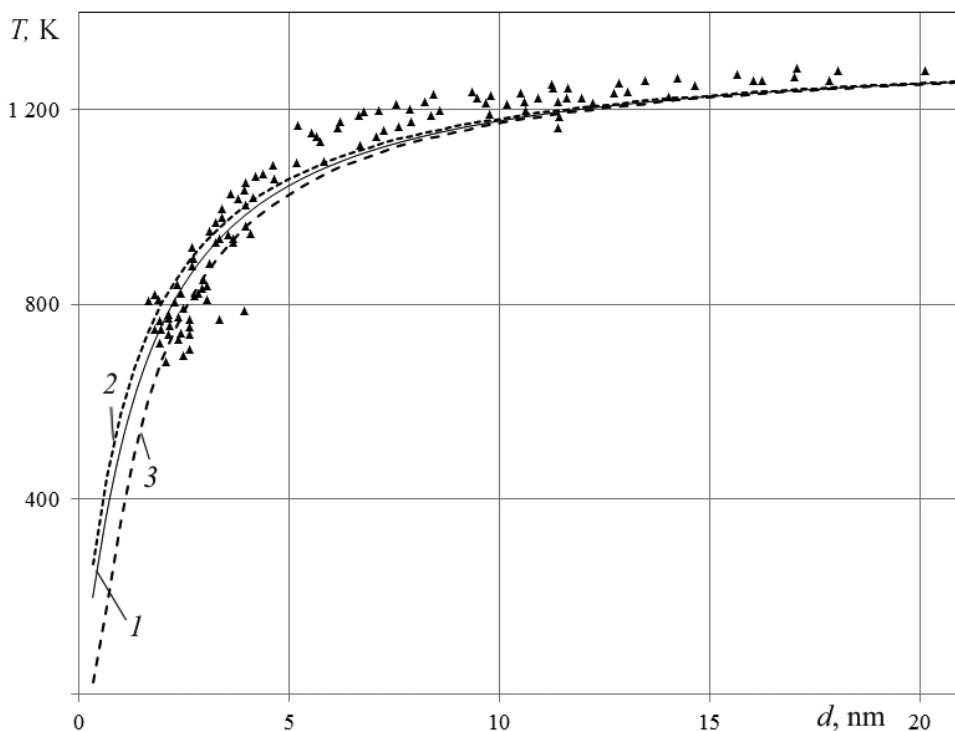


Рис. 2. Экспериментальная (точки) и расчетные (линии 1 – 3), зависимости температуры плавления золота от среднего диаметра его частиц d . Расчетные значения получены по приближенным формулам (6), (7) (кривые 2, 3 соответственно) и по точному решению (5) уравнения (1) (кривая 1)

уравнения (1), в предположении, что δ не зависит от R . Оно представимо в аналитическом виде [12]:

$$\sigma = \frac{\sigma_0 R}{\delta} \exp \left(- \sum_{k=1}^3 \frac{x_k^2 \ln \left(\frac{R}{\delta} - x_k \right)}{3x_k^2 + 4x_k + 2} \right), \quad (4)$$

где $x_1 = -0,558$, $x_{2,3} = -0,721 \pm 0,822i$ – корни кубического уравнения

$$3x^3 + 6x^2 + 6x + 2 = 0.$$

На рис. 1 представлено сопоставление точного решения (4) с наиболее часто используемыми аппроксимациями (2) и (3).

С помощью известной линейной зависимости температуры плавления материала от коэффициента поверхностного натяжения частиц и решений (2) – (4) нами построена модельная зависимость температуры плавления от размера частиц. Получены следующие выражения для температур:

$$T_l = \frac{T_0 R}{\delta} \exp \left(- \sum_{k=1}^3 \frac{x_k^2 \ln \left(\frac{R}{\delta} - x_k \right)}{3x_k^2 + 4x_k + 2} \right), \quad (5)$$

$$T_l = \frac{T_0}{\left(1 + \frac{2\delta}{R} \right)}, \quad (6)$$

$$T_l = T_0 \exp \left(- \frac{2\delta}{R} \right). \quad (7)$$

На рис. 2 представлены такие зависимости для чистого золота (экспериментальные точки и расчетные кривые). Сопоставление графиков показывает, что точное решение (5) хорошо описывает экспериментальные данные в диапазоне размеров частиц от 3 до 20 нм. Приближенные зависимости, полученные по формулам (6) и (7), дают существенную ошибку только в диапазоне от 1 до 5 нм.

Следовательно, точное решение (5) по-



зволяет адекватно описать изменение температуры плавления. Этот результат дает возможность надежно применять полученную нами зависимость коэффициента поверхностного натяжения от размеров частиц в дальнейших расчетах.

Связь предела текучести материала с энергией поверхностного натяжения его частиц

Как следует из рис. 1, коэффициент поверхностного натяжения быстро убывает при уменьшении размера частиц R/δ материала, для частиц размером менее 20δ (около 20 нм). Его значения для большинства металлов с более крупными структурными элементами составляют порядка $\sigma_0 = 1 - 2$ Дж/м². Упругая энергия, запасаемая в металле при одноосном растяжении до предела текучести, составляет для сталей порядка 90 кДж/м³. Сравним эту энергию с объемной плотностью энергии поверхностного натяжения ρ_σ . Предположим для простоты оценок сферическую форму частиц, тогда она составит $\rho_\sigma = 3\sigma_0/R$. Уже при характерном размере кристаллитов порядка $2R = 120 - 200$ мкм величина ρ_σ становится равной максимальной энергии упругой деформации. Следовательно, необходим учет поверхностной энергии при построении моделей пластического деформирования ультрамелкодисперсных материалов. Можно предположить, что именно она определяет механизмы пластического деформирования в этом случае.

Для проверки высказанной гипотезы воспользуемся законом Холла – Петча [16, 7], который был открыт как эмпирический. Для объяснения этого закона Петч предложил рассматривать зарождение и развитие микротрещины в зерне с характерным размером d (в наших предположениях это диаметр $d = 2R$). В настоящее время как сам закон, так и отклонения от него при нанометровых размерах кристаллитов трактуются исключительно на основе дислокационного механизма пластического деформирования.

Согласно закону Холла – Петча, предел текучести τ зависит от размера зерна

$d = 2R$ поликристаллического материала и выражается как

$$\tau = \tau_0 + K(2R)^{-1/2},$$

где τ_0 – некоторое напряжение трения, которое необходимо для скольжения дислокации; K – материальная константа, именуемая часто коэффициентом Холла – Петча (обе величины оцениваются по экспериментальным данным).

Рассмотрим начало процесса пластического деформирования. Для большинства металлов он характерен тем, что деформации растут практически без дополнительного увеличения напряжений. В простейшем случае одноосного растяжения можно считать эти напряжения постоянными. Следовательно, энергия пластической деформации должна быть пропорциональна пределу текучести. Предположим, что пластические деформации приводят к росту внутренней поверхности кристаллитов, без существенного изменения их объема, тогда при начале пластического течения механические напряжения должны компенсировать как упругие деформации кристаллитов, так и силы поверхностного натяжения. Из этого следует, что предел текучести линейно связан с объемной плотностью поверхностной энергии. Такой характер связи дает возможность аппроксимировать закон Холла – Петча с помощью зависимости удельной поверхностной энергии материала от размера частиц. Используя точное решение уравнения Гиббса – Толмена – Кенига – Баффа (4), мы можем получить выражение для объемной плотности энергии поверхностного натяжения в материале, содержащем сферические частицы. Полученная зависимость выражается следующим образом:

$$\rho_\sigma = \frac{3\sigma_0}{\delta} \exp \left(- \sum_{k=1}^3 \frac{x_k^2 \ln \left(\frac{R}{\delta} - x_k \right)}{3x_k^2 + 4x_k + 2} \right). \quad (8)$$

Нормированная объемная плотность поверхностной энергии $\rho_\sigma \delta / \sigma_0$ представлена на рис. 3 в зависимости от величины $(R/\delta)^{-1/2}$. На графике можно выделить несколько квазилинейных участков. По-

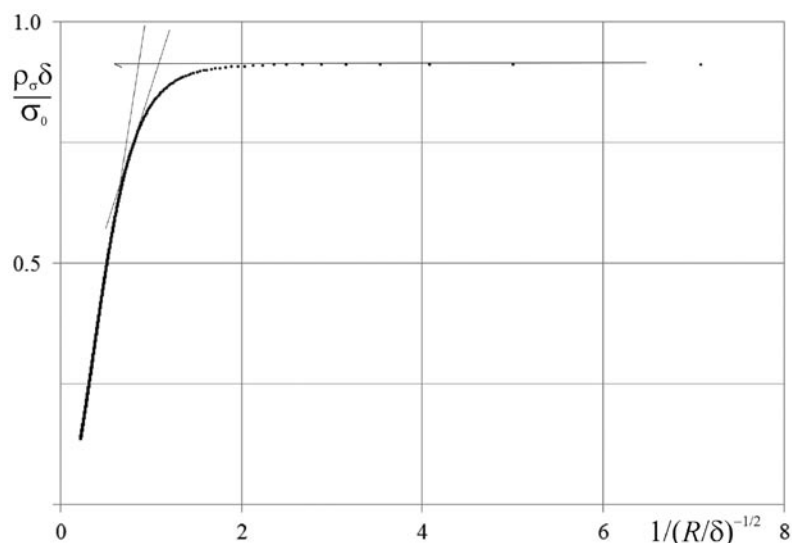


Рис. 3. Нормированная объемная плотность поверхностной энергии $\rho_\sigma \delta / \sigma_0$ в зависимости от величины $(R/\delta)^{-1/2}$ и линейные аппроксимации участков кривой зависимостью Холла – Петча. Использована формула (8)

казаны линейные аппроксимации участков кривой, соответствующие зависимости Холла – Петча. Следует отметить, что при размере зерна ($2R$) от 4δ до 2δ происходит сильное изменение параметров аппроксимирующей зависимости. Полученная зависимость может быть аппроксимирована с помощью закона Холла – Петча, однако когда размер зерна становится меньше 2δ , объемная плотность поверхностной энергии достигает предельного значения (порядка $0,913 \sigma_0 / \delta$). Приведенный на рис. 3 график дает основание для того, чтобы интерпретировать пластичность как изменение поверхностной энергии. Другими словами, если материал «потек», то это означает, что превышено допустимое значение поверхностной энергии.

Полученные зависимости свидетельствуют о том, что поверхностная энергия играет ключевую роль при переходе от упругой деформации к пластической. Предлагаемый анализ подобных зависимостей дает возможность предсказывать значения предела текучести по известной удельной поверхностной энергии, без привлечения дислокационных моделей.

Приведенные нами оценки показывают, что точные решения уравнения Гиббса – Толмена – Кенинга – Бафа позволяют с

приемлемой для практики точностью вычислять температуру плавления. Совпадение графика нормализованной зависимости объемной плотности энергии поверхностного натяжения от диаметра частиц с законом Холла – Петча в диапазоне $d > 4\delta$ и их различие при меньших значениях диаметра хорошо согласуются с экспериментальными данными. Во втором случае в законе Холла – Петча изменяется показатель степени (который был равен $-1/2$), стоящий при размере частицы ($2R$). Для многих металлов этот размер как раз составляет $(4 - 8) \delta$.

Выводы

Таким образом, энергия поверхностного натяжения играет ключевую роль при пластическом деформировании ультрамелкодисперсных материалов. И этот механизм позволяет строить новые расчетные модели пластического деформирования без привлечения дислокационной теории.

Точное решение уравнения Гиббса – Толмена – Кенинга – Бафа позволяет более адекватно описать зависимость температуры плавления от размера частиц в диапазоне от 3 до 20 нм, что дополнительно подтверждает гипотезу о решающей роли сил поверхностного натяжения в начальной фазе пластического деформирования



ультрамелкодисперсных материалов.

Имеющиеся экспериментальные данные о зависимости мезо процессов пластического течения от радиуса кривизны нано-

структурных элементов [17] подтверждают эту точку зрения.

Исследование выполнено при поддержке грантов №12-08-00386 и №14-08-00646 РФФИ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Kocks U.F.** The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation // *Metal. Trans.* 1970. Vol. 1. No. 5. Pp. 1121–1143.
- [2] **Kim H.S.** A composite model for mechanical properties of nanocrystalline materials // *Scripta Mater.* 1998. Vol. 39. No. 8. Pp. 1057–1061.
- [3] **Гуткин М.Ю., Овидько И.А.** Физическая механика деформируемых наноструктур. Ч. 1. Нанокристаллические материалы. СПб.: Янус, 2003. 194 с.
- [4] **Birnbaum H.K., Sofronis P.** Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture // *Mater. Sci. Eng.* 1994. Vol. 176. No. 1–2. Pp. 191–202.
- [5] **Sofronis P., Liang Y., Aravas N.** Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys // *Europ. J. Mech. A. Solids.* 2001. Vol. 20. No. 6. Pp. 857–872.
- [6] **Delafosse D., Magnin T.** Interfaces in stress corrosion cracking: A case study in duplex stainless steels // *Solid State Phenomena.* 1998. Vol. 59–60. Pp. 221–250.
- [7] **Petch N.J.** The cleavage strength of polycrystals // *J. Iron and Steel Inst.* 1953. Vol. 174. Pp. 25–28.
- [8] **Ovid'ko I.A., Skiba N.V.** Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials // *Scripta Mater.* 2012. Vol. 67. No. 1. Pp. 13–16.
- [9] **Панин В.Е.** Основы физической мезомеханики // *Физическая мезомеханика.* 1998. Т. 1. № 1. С. 5–22.
- [10] **Buffat Ph., Borel J.-P.** Size effect on the melting temperature of gold particles // *Phys. Rev.* 1976. Vol. A13. No. 6. Pp. 2287–2298.
- [11] **Udin H., Shaler A.J., Wulff J.** The surface tension of solid copper // *Trans. AIME.* 1949. Vol. 185. Pp. 186–190.
- [12] **Рехвиашвили С.Ш., Киштикова Е.В.** О температуре плавления наночастиц и наноструктурных веществ // *Письма в ЖТФ.* 2006. Т. 32. № 10. С. 50–55.
- [13] **Buff P.F.** Spherical interface. II. Molecular theory // *J. Chem. Phys.* 1955. Vol. 23. No. 3. Pp. 419–427.
- [14] **Koenig F.O.** On the thermodynamic relation between surface tension and curvature // *J. Chem. Phys.* 1950. Vol. 18. No. 4. Pp. 449–459.
- [15] **Юров В.М., Портнов В.С., Ибраев Н.Х., Гученко С.А.** Поверхностное натяжение твердых тел, малых частиц и тонких пленок // *Успехи современного естествознания.* 2011. № 11. С. 55–58.
- [16] **Hall E.O.** Deformation and ageing of mild steel // *Proc. Phys. Soc. Sec. B.* 1951. Vol. 64. No. 6. Pp. 495–502.
- [17] **Панин В.Е., Панин А.В., Елсукова Т.Ф., Попкова Ю.Ф.** Фундаментальная роль кривизны кристаллической структуры в пластичности и прочности твердых тел // *Физическая мезомеханика.* 2014. Т. 17. № 6. С. 7–18

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУДИНОВА Наталья Романовна – аспирантка *Института проблем машиноведения РАН.* 199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 61. natalii@sibmail.com

ПОЛЯНСКИЙ Владимир Анатольевич – доктор технических наук, заведующий лабораторией прикладных исследований *Института проблем машиноведения РАН.* 199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 61. varol@mail.ru

ПОЛЯНСКИЙ Анатолий Митрофанович – кандидат физико-математических наук, директор *Научно-производственного комплекса «Электронные и пучковые технологии».* 198188, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ст. Броневая, 6. ampol@electronbeamtech.com

ЯКОВЛЕВ Юрий Алексеевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник *Института проблем машиноведения РАН.* 199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 61. yura.yakovlev@gmail.com

Kudinova N.R., Polyanskiy V.A., Polyanskiy A.M., Yakovlev Yu.A. MODELING OF THE PLASTICITY OF MICROSTRUCTURED AND NANOSTRUCTURED MATERIALS.

A new approach to modeling of the plasticity of materials with nanostructure and ultrafine one has been proposed. Its main advantage is the minimum number of physical parameters in use. In the context of the proposed model, we calculated the volumetric density of the energy of surface tension of the material grains. This energy is a significant part of the internal energy during deformation. The size dependence of the melting temperature of nanoparticles was compared with experimental data. We obtained size dependence of the yield point on its basis. Yield point was interpreted as the result of changes of grains surface energy during the deformation. The obtained yield point dependence on the grain size was related to the Hall-Petch law, and this resulted in confirmation of the hypothesis on the crucial role of surface tension forces in the initial stage of plastic deformation of ultrafine materials.

ULTRAFINE STRUCTURE, NANOSTRUCTURE, YIELD POINT, MELTING TEMPERATURE.

REFERENCES

- [1] **U.F. Kocks**, The relation between polycrystal deformation and single crystal deformation, *Metal. Trans.* 1(5) (1970) 1121–1143.
- [2] **H.S. Kim**, A composite model for mechanical properties of nanocrystalline materials, *Scripta Mater.* 39(8) (1998) 1057–1061.
- [3] **M.Yu. Gutkin, I.A. Ovidko**, *Physical Mechanics of Deformed Nanostructures, Volume 1: Nanocrystalline Materials SPb.: Yanus, 2003.*
- [4] **H.K. Birnbaum, P. Sofronis**, Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture, *Materials Science and Engineering.* 176 (1–2) (1994) 191–202.
- [5] **P. Sofronis, Y. Liang, N. Aravas**, Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys, *Europ. J. Mech. A. Solids.* 20(6) (2001) 857–872.
- [6] **D. Delafosse, T. Magnin**, Interfaces in Stress Corrosion Cracking: A Case Study in Duplex Stainless Steels, *Solid State Phenomena.* 59-60 (1998) 221–250.
- [7] **N.J. Petch**, The cleavage strength of polycrystals, *J. Iron and Steel Inst.*, 174 (1953) 25–28.
- [8] **I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba**, Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials, *Scripta Materialia.* 67(1) (2012) 13–16.
- [9] **V.E. Panin**, Overview on mesomechanics of plastic deformation and fracture of solids, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics.* 30(1) (1998) 1–11.
- [10] **Ph. Buffat, J.-P. Borel**, Size effect on the melting temperature of gold particles, *Phys. Rev.* A13(6) (1976) 2287–2298.
- [11] **H. Udin, A.J. Shaler, J. Wulff**, The Surface Tension of Solid Copper, *Trans. AIME.* 185 (1949) 186–190.
- [12] **S.Sh. Rekhviashvili, E.V. Kishtikova**, On the temperature of melting of nanoparticles and nanocrystalline substances, *Technical Physics Letters.* 32(5) (2006) 439–441.
- [13] **P.F. Buff**, Spherical Interface. II. Molecular Theory, *J. Chem. Phys.* 23(3) (1955) 419–427.
- [14] **F.O. Koenig**, On the Thermodynamic Relation between Surface Tension and Curvature, *J. of Chem. Phys.* 18(4) (1950) 449–459.
- [15] **V.M. Yurov, V.S. Portnov, N.Kh. Ibrayev, S.A. Guchenko**, Poverhnostnoe natyazhenie tverdyh tel, malyh chastic i plenok [The surface tension of solid bodies, small particles and thin membrans], *Uspehi sovremennogo estestvoznania.* (11) (2011) 55–58.
- [16] **E.O. Hall**, Deformation and ageing of mild steel, *Proc. Phys. Soc. Sec. B.* 64(6) (1951) 495–502.
- [17] **V.E. Panin, A.V. Panin, T.F. Elskova, Yu.F. Popkova**, Fundamentalnaya rol' krivizny kristallicheskoy struktury v plastichnosti i prochnosti tverdyh tel [Fundamental role of curvature of the crystal structure in plasticity and strength of solids], *Fisicheskaya mezomehanika.* 17(6) (2014) 7–8

THE AUTHORS

KUDINOVA Natalia R.

Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS
61 Bolshoi Pr. V.O., St. Petersburg, 199178, Russian Federation
natalii@sibmail.com

POLYANSKIY Vladimir A.

Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS
61 Bolshoi Pr. V.O., St. Petersburg, 199178, Russian Federation
vapol@mail.ru



POLYANSKIY Anatoly M.

Research & Development Company Electronic & Beam Technologies
6 Bronevaya, St. Petersburg, 198188, Russian Federation
ampol@electronbeamtech.com

YAKOVLEV Yuri A.

Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS
61 Bolshoi Pr. V.O., St. Petersburg, 199178, Russian Federation
yura.yakovlev@gmail.com

DOI: 10.5862/JPM.230.10

UDC: 535.37

C.B. Palan, N.S. Bajaj, S.K. Omanwar

Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, India

ELEMENTARY RESULTS ON THE DOSIMETRIC PROPERTIES OF SrSO₄:Eu²⁺ PHOSPHOR

A polycrystalline sample of SrSO₄:Eu²⁺ phosphor has been successfully synthesized using the co-precipitation method and studied for its luminescence properties. The phosphor showed rather high optical stimulated luminescence (OSL) sensitivity which was about 75% of that for the commercially available α -Al₂O₃:C phosphor (TLD-500). The continuous wave (CW)-OSL curve exhibited three components having photoionization cross-sections of $1.78 \cdot 10^{-17}$, $7.70 \cdot 10^{-17}$ and $17.69 \cdot 10^{-17}$ cm² respectively. The thermal luminescence (TL) sensitivity was about 100 times higher than that for TLD-500. The kinetic parameters for TL curve such as activation energy and frequency factor were calculated using peak shape treatment. OSL components were determined from CW and linear modulated (LM)-OSL data. The minimum detectable dose was found to be 11.6 mGy with 3 σ of background. Also reusability studies showed that it was possible to reuse the phosphor for 10 cycles without change in the OSL output. In the TL mode the dose-response was nearly linear in the range of measurement (20 – 400 mGy), and fading was 40% in 72 h. Photoluminescence spectra of SrSO₄:Eu²⁺ exhibited emission in the near UV region when excited with an UV source at 254, 315, and 323 nm.

CO-PRECIPIATION, TLD-500, CW-OSL, PHOTOIONIZATION CROSS-SECTION.

1. Introduction

Solid-state luminescent dosimetry is based on radiation energy storage in dosimetric materials in the form of lattice defects and captured charge carriers. The stored energy can be released through the light from luminescence centers. Energy release is stimulated either by heating (thermally stimulated luminescence (TSL/TL)) or by irradiating with light quanta of proper energy (optically stimulated luminescence (OSL)). TL-based dosimeters are widely used in radiation dose monitoring but in comparison to TL dosimetry technique OSL has been becoming popular in radiation dosimetry applications [1 – 4]. OSL has been first used in archaeological dating and later proposed for personnel monitoring and environmental monitoring of radiation with the development of Al₂O₃:C [5].

Different stimulation techniques have been followed by OSL measurements that offer different signal-to-noise ratio. A few of them are CW-OSL, P-OSL, LM-OSL, TA-OSL and NL-OSL, amongst which CW-OSL is the most

preferred and popular choice of stimulation mode, because in CW-OSL, the luminescence is recorded very fast and looks like a decay curve, the background count rate or net background is nearly constant and signal-to-noise ratio is high [6].

Over the last several decades sulfate hosts doped with rare earth materials have been widely used in radiation dosimetry, and also these materials show good luminescent properties. Many researchers have reported on these materials with different synthesis methods and studies for different luminescence properties [7–9].

In this paper we are reporting TL and OSL properties (under beta irradiation) of Eu-doped SrSO₄ phosphor synthesised by using co-precipitation.

2. Experimental details

SrSO₄ phosphor activated with Eu was prepared by the co-precipitation method described in our earlier works [10]. The stoichiometry of the reaction was maintained

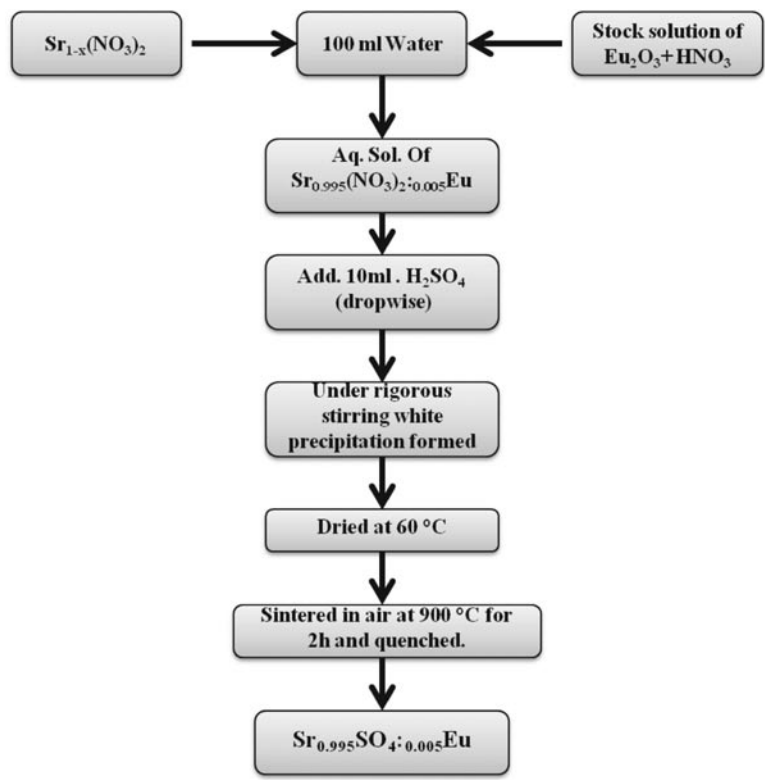


Fig. 1. Flow chart of $\text{Sr}_{0.995}\text{SO}_4 : 0.005\text{Eu}^{2+}$ synthesized by the co-precipitation method

by the formula $\text{Sr}_{1-x}\text{SO}_4 : x\text{Eu}^{2+}$. The nitrate precursor of strontium was dissolved in 100 ml of double-distilled water with drop-wise addition of the stock solution prepared for Eu_2O_3 . The solution was prepared in a glass beaker under stirring to form a homogeneous aqueous solution, and it was confirmed that the precursor was dissolved in distilled water. 10 ml of the H_2SO_4 solution were added drop by drop into the mixed aqueous solution of $\text{Sr}_{1-x}(\text{NO}_3)_2 : x\text{Eu}$ under rigorous stirring at room temperature and white precipitation formed. After that, the SrSO_4 precipitate was centrifuged and rinsed several times by distilled water to remove the excess residual salts. The precipitate was dried at 60°C for 2 h by optical heating. The dried sample was annealed at 900°C for 1 h to get a white crystalline powder of $\text{SrSO}_4 : \text{Eu}^{2+}$. The complete process involved in the reaction is presented as a flow chart in Fig. 1.

3. Results and discussion

The structure of the as-prepared samples were analyzed by a Rikagu Miniflex X-ray

diffractometer, using monochromatic $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ($\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$) radiation in the 2θ range of $10^\circ - 60^\circ$. Photoluminescence was studied by means of a Hitachi F-7000 fluorescence spectrophotometer. Emission and excitation spectra were recorded using a spectral slit of 2.5 nm for each window. For studying the TL and the OSL response, all the samples were irradiated using a $^{90}\text{Sr} / ^{90}\text{Y}$ beta source with the dose rate of 20 mGy per minute. All OSL measurements were carried out using an automatic Risø TL/OSL-DA-15 reader system which capable of accommodating up to 48 disks. Blue-light diodes emitting at 470 nm (LEDs with $\text{FWHM} = 20 \text{ nm}$) were arranged in four clusters, each containing seven individual LEDs. The total power from 28 LEDs at the sample position was 80 mW/cm^2 . A green long pass filter (GG-420) was incorporated in front of each blue LED cluster to minimize the amount of directly scattered blue light from reaching the detector system. The standard photomultiplier used in the Risø TL/OSL luminescence reader was a bialkali EMI 9235QA, which has an

extended UV response with maximum detection efficiency between 300 and 400 nm. To prevent scattered stimulation light from reaching the photomultiplier, the Risø reader was equipped with a 7.5 mm Hoya U-340 detection filter, which has a peak transmission around 340 nm (FWHM ~80 nm).

X-ray diffraction pattern. The structure of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor was orthorhombic, with the space group $Pbnm$ (62), and with the lattice parameters of $a = 6.86$, $b = 8.35$, $c = 5.34$ Å and $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. In order to determine the phase purity, chemical nature of the phosphor, X-ray diffraction (XRD) analysis was carried out. Fig. 2, *a* shows the XRD pattern of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor along with the standard XRD pattern (International Centre for Diffraction Data (ICDD) Card No. 01-075-6773). The XRD pattern showed the formation of pure SrSO_4 phase. The addition of the dopant (Eu) did not seem to have any effect on the XRD pattern which suggested that the dopant was incorporated in the lattice.

Thermally stimulated luminescence. The $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor was studied for its TL/OSL defects. Fig. 3 shows the typical TL glow curve of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ and its comparison with the commercial $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3:\text{C}$ (TLD-500) irradiated to the same dose. The $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor was found to be 100 times more sensitive than that of the commercially available $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3:\text{C}$

(both materials were in powdered form). By using a convenient peak-shape method, kinetic parameters such as activation energy and frequency factor of glow curve were calculated [11 – 15]. Fig. 4 presents the TL glow curve of the $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor deconvoluted using Origin software. The glow peak does not contain any satellites in the temperature range from 150 to 320°C. The geometrical factor, μ_g , calculated for the given peak, confirms the second-order kinetic nature of the curve. Thus, by second-order approximations, the activation energy was found to be 1.496 eV while the frequency factor was found to be $8.41 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ for the glow peak at 246 °C. Fig. 5, *a* shows the dose response of the phosphor in the range from 20 to 400 mGy, which has been found in linear nature. The linear correlation coefficient of linear fitting was found to be 0.998. Fig. 5, *b* shows the fading response up to 5 days. It is clear from the graph that about 40 % fading occurs at the end of 72 h while after this period the intensity remains constant.

Optically stimulated luminescence (OSL). The sample was studied for its OSL response using blue LED stimulation (470 nm). Fig. 6 shows the optically stimulated (continuous wave) luminescence (CW-OSL) curves of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ for 20 mGy beta-dose. The third-order exponential decay curves of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor can be seen. The goodness of the

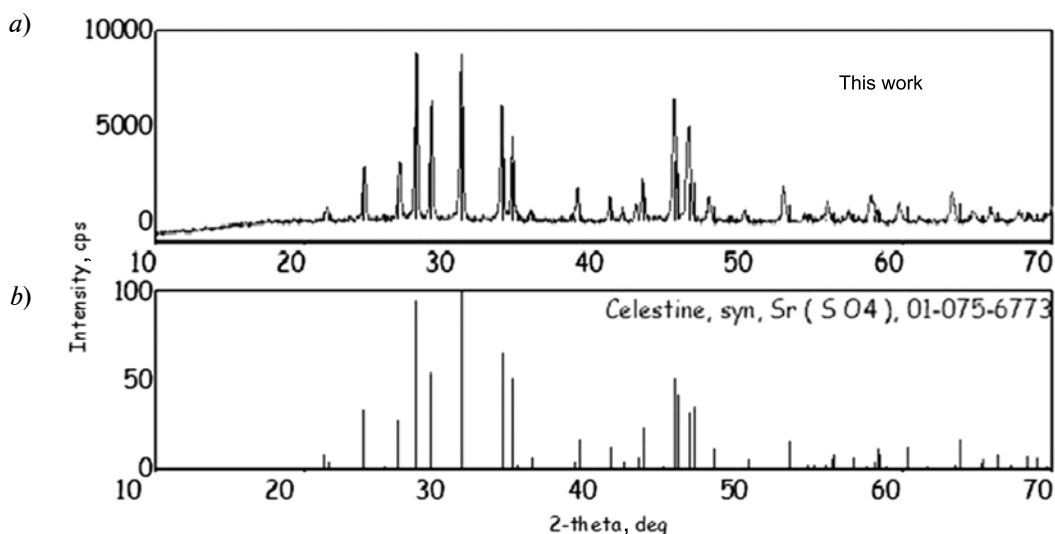


Fig. 2. X-Ray diffraction (XRD) pattern of SrSO_4 prepared by co-precipitation method (*a*) and standard data from ICDD file (*b*)

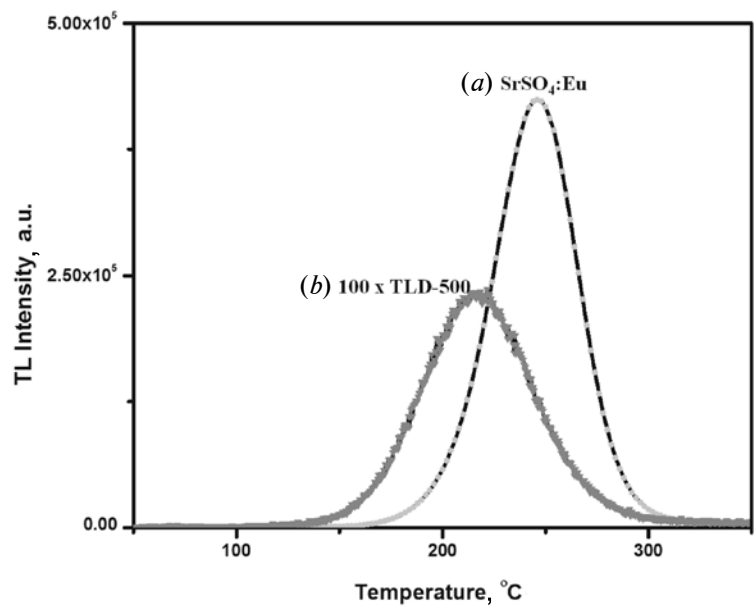


Fig. 3. The comparison of TL intensity for the SrSO₄:Eu²⁺ phosphor (a) with that for TLD-500 (b)

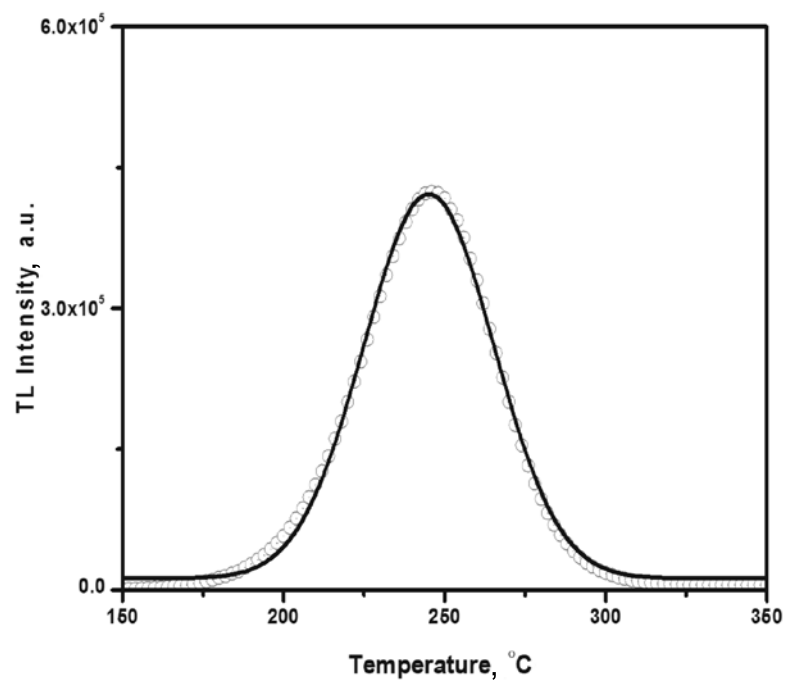


Fig. 4. The deconvolution curve of SrSO₄:Eu²⁺ phosphor

fit was determined by calculating the figure of merit (FOM), and the obtained value of FOM was 0.415% which also confirmed a very good agreement between theoretical and experimental fitting. The OSL components from the CW-OSL decay curve were evaluated

using a third-order equation for the CW-OSL intensity given by the authors of Ref. [16]. The third-order exponential fit to the decay curve showed the presence of three components with photoionization cross-sections of $1.78 \cdot 10^{-17}$, $7.70 \cdot 10^{-17}$ and $17.69 \cdot 10^{-17}$ cm², respectively.

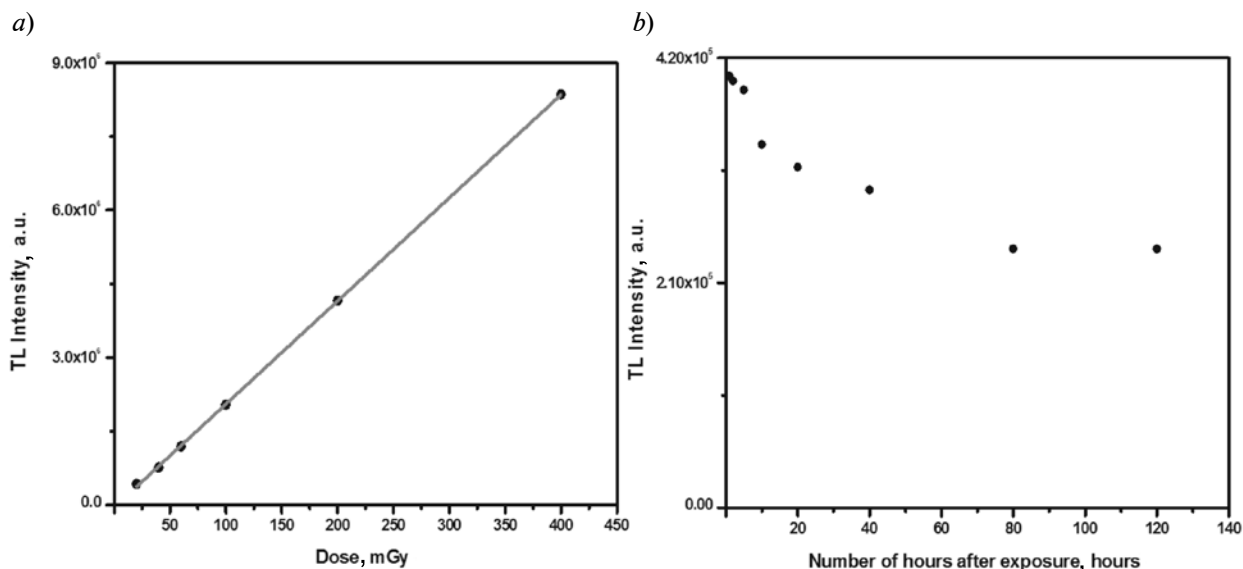


Fig. 5. The dose response of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ sample in the range from 20 to 400 mGy (a) and the fading effect on TL intensity (b)

The OSL sensitivities were compared using two different methods. By the first method, the OSL counts during the first second were compared, whereas the second method was used to take the total area under the OSL curve [17]. Fig. 7 shows the OSL sensitivity of the

$\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor compared with that of the commercially available $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3:\text{C}$. The OSL sensitivity of the $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor was found to be 75% of that of the $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{C}$ phosphor by the first method (OSL counts during the first second).

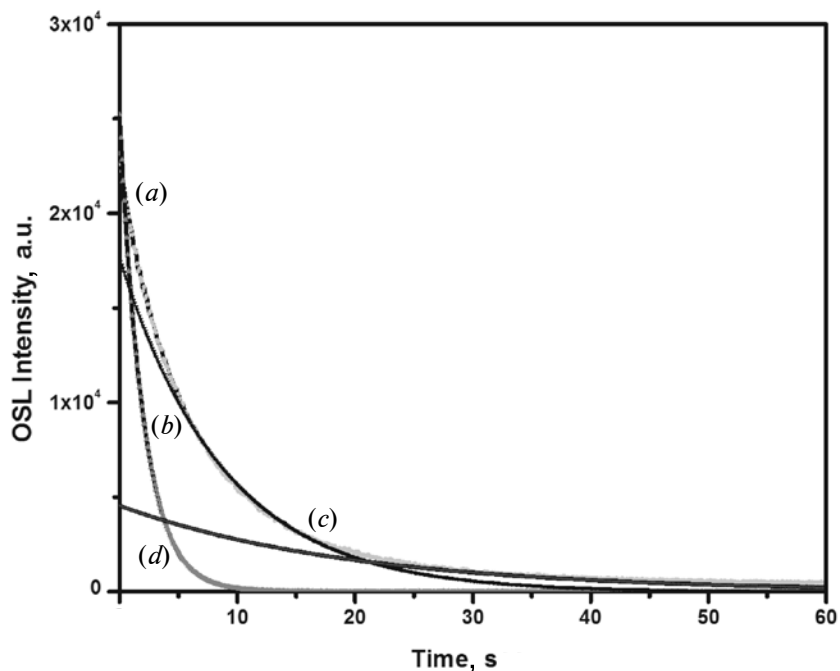


Fig. 6. CW-OSL response of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ for 20mGy beta dose; the third-order exponential fit to the decay curve (a) shows the presence of three components: the first (b), the second (c), the third (d) ones

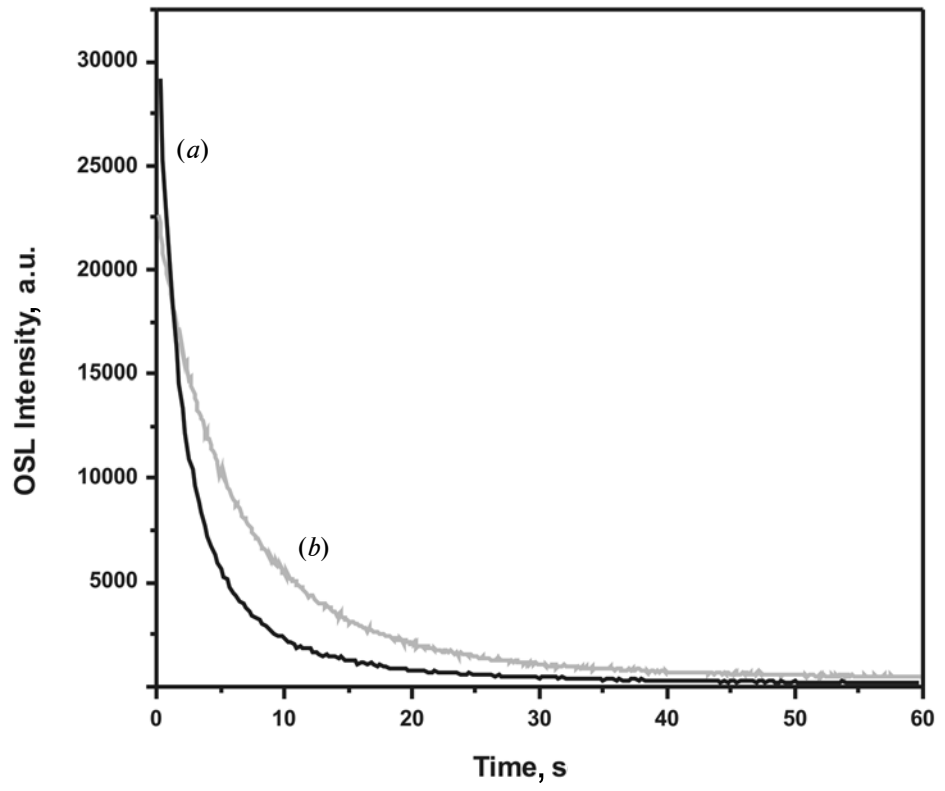


Fig. 7. CW-OSL response of $\text{SrSO}_4\text{:Eu}^{2+}$ phosphor (b) as compared with that of the commercial $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:C}$ one (a) for 20 mGy beta dose

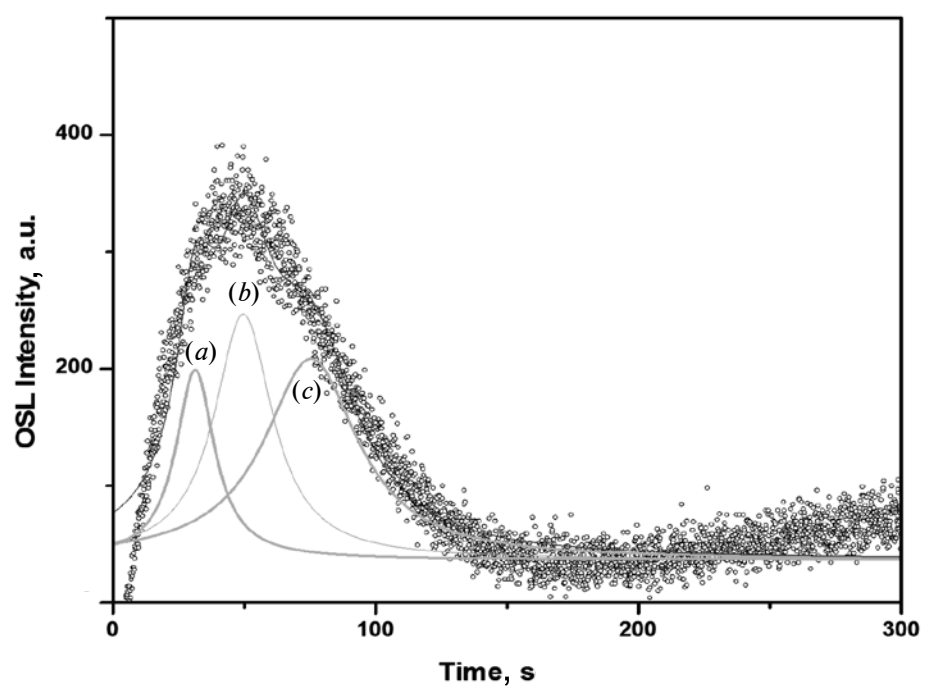


Fig. 8. Deconvolution of the LM-OSL curve for $\text{SrSO}_4\text{:Eu}^{2+}$: the first component (a), the second (b) and the third (c) ones

Table

Kinetic parameters of LM-OSL for the SrSO₄:Eu²⁺ phosphor

Component	μ_g	$\tau = T_m - T_1$	$\delta = T_2 - T_m$	$\omega = T_2 - T_1$
First	0.498	11.30	11.20	22.50
Second	0.502	16.10	16.20	32.30
Third	0.501	26.80	26.90	53.71

Linear modulated optically stimulated luminescence (LM-OSL). The CW-OSL results only exhibit the multiple components but they do not reveal the contribution of traps responsible for the total OSL signal. On the other hand, the application of LM-OSL is expected to separate the different peaks having a distinct spread in the values of photoionization cross section [7]. Fig. 8 presents the LM-OSL response of the SrSO₄:Eu²⁺ phosphor under beta irradiation. The LM-OSL curve is shown to consist of three OSL components similar to those for CW-OSL. The geometrical factor, μ_g , calculated for the given components, confirmed the first-order kinetic nature of the curve components [1]. The calculated results related to the LM-OSL curve are given in Table.

Reusability. This is one of the most

important properties that any dosimetric material should possess. A SrSO₄:Eu²⁺ phosphor disk was exposed to beta radiation of 20 mGy, and the OSL response was measured. Ten such cycles were carried out. The studies showed that it was possible to reuse the phosphor for 10 cycles with no change in the OSL output (Fig. 9).

Minimum detectable dose (MDD). This parameter of the phosphor depends on the standard deviation of the background signal which affects the signal-to-noise ratio. MDD is a function of phosphor sensitivity and instrumentation. The minimum detectable dose was found to be 11.6 mGy corresponding to 3 σ of the background.

Photoluminescence. The combined excitation and emission spectra of the SrSO₄:Eu²⁺ phosphor

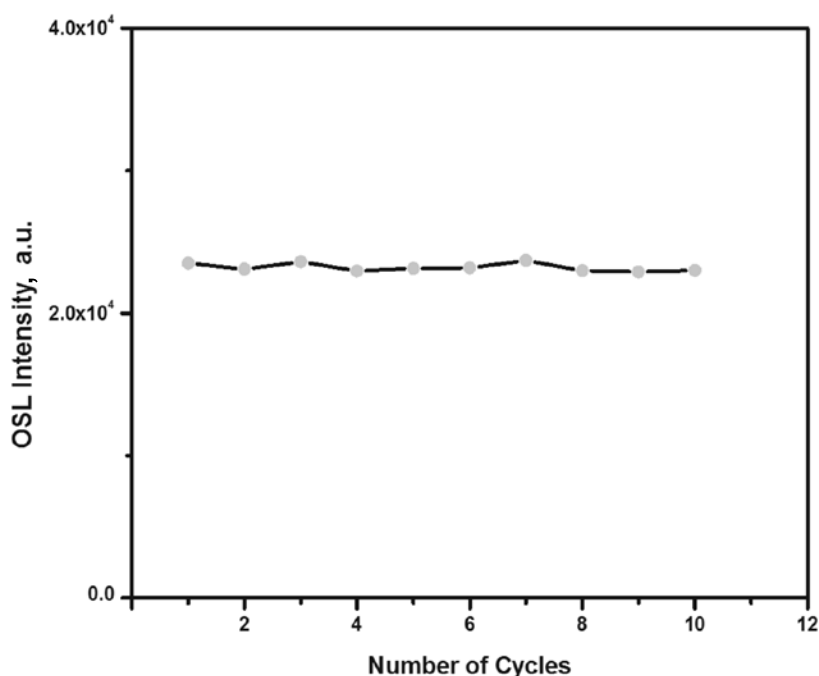


Fig. 9. The result of reusability study of SrSO₄:Eu²⁺

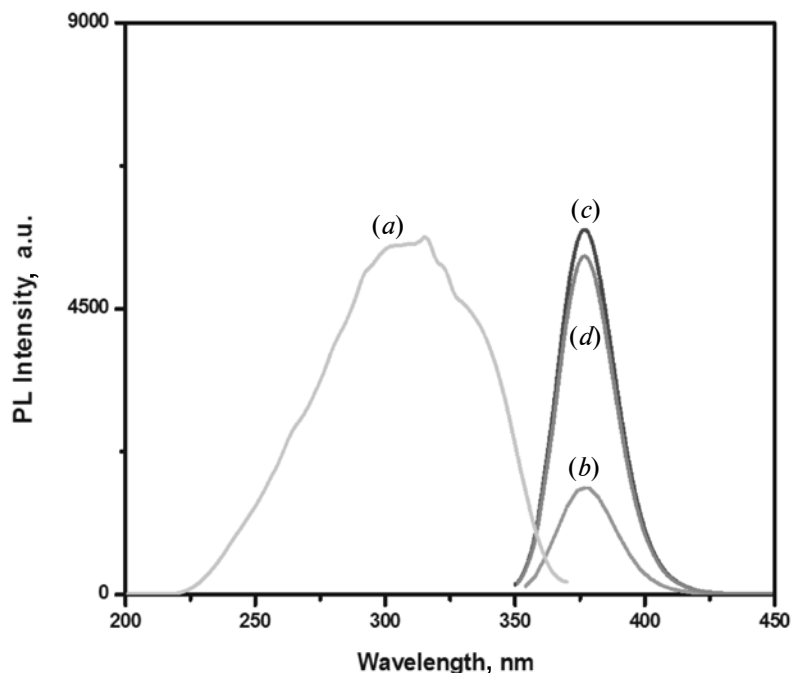


Fig. 10. The combined excitation (a) and emission (the rest) spectra of the $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor. The emission wavelengths (nm): 254 (b), 315 (c) and 323 (d); the excitation at 377 nm

are shown in Fig. 10. The excitation spectra consist of a broad peak around 220 – 360 nm and relatively weak peaks at 254, 315 and 323 nm arising from the transition from $^8S_{7/2}$ state of $4f^7$ configuration to the states belonging to the $4f^65d^1$ one. However, emission was observed at 254, 315 and 323 nm. A narrow peak around 377 nm in the emission spectra was observed for all the excitations. This wavelength corresponds to the transition from the lowest band of the $4f^65d^1$ configuration to the $^8S_{7/2}$ state of the $4f^7$ configuration of the Eu^{2+} ion [18].

4. Conclusions

The co-precipitation method was successfully employed for the preparation of potential TLD and OSLD $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ phosphor. The XRD profile of $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ was in good agreement with the ICDD file. The comparison of TL and OSL sensitivities showed that the former for $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ was 100 times higher than that for TLD-500 and the latter for $\text{SrSO}_4:\text{Eu}^{2+}$ was 75% of the sensitivity for the commercially available $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3:\text{C}$ phosphor (TLD-500). The CW-OSL decay curve was found to consist of three OSL components having photoionization

cross-sections of $1.78 \cdot 10^{-17}$, $7.70 \cdot 10^{-17}$ and $17.69 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$, respectively. OSL components were determined from the CW and the LM-OSL data. The minimum detectable dose (MDD) was found to be 11.6 mGy with 3σ of background. Also the reusability studies showed that the phosphor could be reused for 10 cycles without any change in the OSL output. In the TL mode phosphor showed the linear dose response. The fading turned out to be up to 40 % at the end of 72 h, and after that the TL intensity became constant.

Although $\text{SrSO}_4:\text{Eu}$ is not a material equivalent to TLD-500 but, due to its high TL and OSL sensitivities and linear dose response, this phosphor can be proposed as a suitable candidate for radiation dosimetry, of course, after further progress in the studies.

Acknowledgements

One of the authors, Chetan B. Palan, is very much thankful to the Head of Radiological Physics and Advisory Division (RPAD), Bhabha Atomic Research Centre, Mumbai-400085, India, for providing the necessary facilities for the analysis of the OSL and TL results.

REFERENCES

- [1] **M. Kumar, B. Dhabekar, S.N. Menon, et al.**, LiMgPO₄: Tb, B OSL phosphor – CW and LM OSL studies, Nucl. Instrum. Methods, Phys. Res. B. 269 (2011) 1849–1854.
- [2] **S.K. Omanwar, K.A. Koparkar, H.S. Virk**, Recent advances and opportunities in TLD materials, A Review Defect and Diffusion Forum. 347 (2013) 75–110.
- [3] **C.B. Palan, N.S. Bajaj, D.K. Koul, S.K. Omanwar**, Elementary Result TL & OSL properties of LiBaPO₄:Tb³⁺ phosphor, Int. J. Lumin. and Appl. 5 (2015) 12–14.
- [4] **C.B. Palan, N.S. Bajaj, A. Soni, et al.**, Bull. Mater. Sci. doi.org/10.1007/s12034-015-0964-2.
- [5] **D.J. Huntley, D.I. Godfrey-Smith, M.L.W. Thewatt**, Optical dating of sediments, Nature. 313 (1985) 105–107.
- [6] **N.S. Rawat, B. Dhabekar, M.S. Kulkarni, et al.**, Optimization of CW-OSL parameters for improved dose detection threshold in Al₂O₃:C, Radiat. Meas. 71 (2014) 212–216.
- [7] **B.C. Bhatt, A. Soni, G.S. Polymeris, et al.**, Optically stimulated luminescence (OSL) and thermally assisted OSL in Eu²⁺-doped BaSO₄ phosphor, Radiat. Meas. 64 (2014) 35–43.
- [8] **J. Manam, S. Das**, Preparation, characterization and thermally stimulated luminescence studies of undoped, Cu and Mn doped SrSO₄ compounds, Opt. Mater. 31 (2009) 1231–1241.
- [9] **M. Kerikmäe, M. Danilkin, I. Jaek, et al.**, OSL and TSL interrelations in SrSO₄:Eu, Radiat. Meas. 45 (2010) 559–561.
- [10] **N.B. Ingle, S.K. Omanwar, P.L. Muthal, et al.**, Synthesis of CaSO₄:Dy, CaSO₄: Eu³⁺ and CaSO₄: Eu²⁺ phosphors, Radiat. Meas. 43 (2008) 1191–1197.
- [11] **N.S. Bajaj, S.K. Omanwar**, Combustion synthesis and luminescence characteristics of NaSr₄(BO₃)₃:Tb³⁺, J. Lumin. 148 (2014) 169–173.
- [12] **N.S. Bajaj, S.K. Omanwar**, Combustion synthesis and luminescence characteristic of rare earth activated LiCaBO₃, J. Rare Earth. 30 (2012) 1005–1008.
- [13] **S.W.S. Mckeever**, Thermoluminescence of solids, Cambridge University Press, 1998, P. 88.
- [14] **Z.S. Khan, N.B. Ingale, S.K. Omanwar**, Synthesis of thermoluminescence α-Ca₂P₂O₇: Eu³⁺ bio-nanomaterial, Mater. Lett. 158 (2015) 143–146.
- [15] **Z.S. Khan, N.B. Ingale, S.K. Omanwar**, Synthesis and thermoluminescence properties of rare earth-doped NaMgBO₃ phosphor, Environ Sci Pollut Res, DOI 10.1007/s11356-015-4993-6.
- [16] **S. Mckeever, L. Botter-Jensent, N. Agersnaplarsent, A. Dullert**, Temperature dependence of OSL decay curves experimental and theoretical aspects, Radiat Meas. 27 (1997) 161–170.
- [17] **B. Dhabekar, S.N. Menon, E.A. Raja, et al.**, LiMgPO₄:Tb, B – a new sensitive OSL phosphor for dosimetry, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 269 (2011) 1844–1848.
- [18] **T. Baby, V.P.N. Nampoori**, Fluorescence emission of SrS: Eu²⁺ phosphor-energy level splitting of Eu²⁺, Solid State Commun. 81 (1992) 367–369.

THE AUTHORS

PALAN Chetan B.

Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, India
Amravati, Maharashtra 444602, India
Chetanpalan27@gmail.com

BAJAJ Nikhilesh S.

Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, India
Amravati, Maharashtra 444602, India
nsb.0208@yahoo.com

OMANWAR Shreeniwas Kerba

Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, India
Amravati, Maharashtra 444602, India
Omanwar@rediffmail.com

Палан Ч.Б., Баджадж Н.С., Оманвар Ш.К. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗУЧЕНИЯ ДОЗИМЕТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛЮМИНОФОРА SrSO₄:Eu²⁺.

С помощью метода соосаждения был успешно синтезирован поликристаллический образец люминофора SrSO₄: Eu²⁺, и изучены его люминесцентные свойства. Люминофор проявил высокую



люминесцентную чувствительность (для оптически стимулированной люминесценции (OSL)), составляющую примерно 75 % от таковой для коммерчески доступного $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:C}$ (TLD-500). Кривая OSL с непрерывной оптической стимуляцией (CW-OSL) состоит из трех участков с сечениями ионизации $1,78 \cdot 10^{-17}$, $7,70 \cdot 10^{-17}$ и $17,69 \cdot 10^{-17}$ см^2 соответственно. Чувствительность термостимулированной люминесценции (TL) составила в 100 раз большую величину, чем у TLD-500. Кинетические параметры для кривой термовысвечивания, такие как энергия активации и частотный фактор процесса, были рассчитаны с помощью обработки формы пика. Компоненты кривой OSL определяли как с помощью данных по непрерывной оптической стимуляции люминесценции, так и по спектру линейно-модулированной оптически стимулированной люминесценции. Найдено, что минимальная детектируемая доза люминофора (MDD) равна 11,6 грей, что втрое превышает уровень фона. Исследования повторного применения люминофора показали, что его можно использовать в течение 10 циклов без изменения выхода OSL. В режиме TL зависимость от мощности дозы поглощенного излучения была почти линейной в диапазоне измерений (20 – 400 грей); фединг составил 40 % через 72 часа. Для спектров испускания фотолюминесценции $\text{SrSO}_4\text{:Eu}^{2+}$ характерно свечение в ближней УФ-области на длинах волн 254, 315 и 323 нм при возбуждении УФ-источником.

МЕТОД СООСЖДЕНИЯ, TLD-500, ОПТИЧЕСКИ СТИМУЛИРОВАННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ, СЕЧЕНИЕ ФОТОИОНИЗАЦИИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Kumar M., Dhabekar B., Menon S.N., et al.** $\text{LiMgPO}_4\text{:Tb}$, B OSL phosphor – CW and LM OSL studies // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2011. Vol. 269. Pp. 1849–1854.
- [2] **Omanwar S.K., Koparkar K.A., Virk H.S.** Recent advances and opportunities in TLD materials // A Review Defect and Diffusion Forum. 2013. Vol. 347. Pp. 75–110.
- [3] **Palan C.B., Bajaj N.S., Koul D.K., Omanwar S.K.** Elementary Result TL & OSL properties of $\text{LiBaPO}_4\text{:Tb}^{3+}$ phosphor // Int. J. Lumin. and Appl. 2015. Vol. 5. Pp. 12–14.
- [4] **Palan C.B., Bajaj N.S., Soni A., et al.** Bull. Mater. Sci. doi.org/10.1007/s12034-015-0964-2.
- [5] **Huntley D.J., Godfrey-Smith D.I., Thewatt M.L.W.** Optical dating of sediments // Nature. 1985. Vol. 313. Pp. 105–107.
- [6] **Rawat N.S., Dhabekar B., Kulkarni M.S., et al.** Optimization of CW-OSL parameters for improved dose detection threshold in $\text{Al}_2\text{O}_3\text{:C}$ // Radiat. Meas. 2014. Vol. 71. Pp. 212–216.
- [7] **Bhatt B.C., Soni A., Polymeris G.S., et al.** Optically stimulated luminescence (OSL) and thermally assisted OSL in Eu^{2+} -doped BaSO_4 phosphor // Radiat. Meas. 2014. Vol. 64. Pp. 35–43.
- [8] **Manam J., Das S.** Preparation, characterization and thermally stimulated luminescence studies of undoped, Cu and Mn doped SrSO_4 compounds // Opt. Mater. 2009. Vol. 31. Pp. 1231–1241.
- [9] **Kerikmäe M., Danilkin M., Jaek I., et al.** OSL and TSL interrelations in $\text{SrSO}_4\text{:Eu}$ // Radiat. Meas. 2010. Vol. 45. Pp. 559–561.
- [10] **Ingle N.B., Omanwar S.K., Muthal P.L., et al.** Synthesis of $\text{CaSO}_4\text{:Dy}$, $\text{CaSO}_4\text{:Eu}^{3+}$ and $\text{CaSO}_4\text{:Eu}^{2+}$ phosphors // Radiat. Meas. 2008. Vol. 43. Pp. 1191–1197.
- [11] **Bajaj N.S., Omanwar S.K.** Combustion synthesis and luminescence characteristics of $\text{NaSr}_4(\text{BO}_3)_3\text{:Tb}^{3+}$ // J. Lumin. 2014. Vol. 148. Pp. 169–173.
- [12] **Bajaj N.S., Omanwar S.K.** Combustion synthesis and luminescence characteristic of rare earth activated LiCaBO_3 // J. Rare Earth. 2012. Vol. 30. Pp. 1005–1008.
- [13] **Mckeever S.W.S.** Thermoluminescence of solids. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. P. 88.
- [14] **Khan Z.S., Ingale N.B., Omanwar S.K.** Synthesis of thermoluminescence $\alpha\text{-Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7\text{:Eu}^{3+}$ bio-nanomaterial // Mater. Lett. 2015. Vol. 158. Pp. 143–146.
- [15] **Khan Z.S., Ingale N.B., Omanwar S.K.** Synthesis and thermoluminescence properties of rare earth-doped NaMgBO_3 phosphor // Environ. Sci. Pollut. Res., DOI 10.1007/s11356-015-4993-6.
- [16] **Mckeever S., Botter-Jensent L., Agersnaplarsent N., Dullert A.** Temperature dependence of OSL decay curves experimental and theoretical aspects // Radiat. Meas. 1997. Vol. 27. Pp. 161–170.
- [17] **Dhabekar B., Menon S.N., Raja E.A., et al.** $\text{LiMgPO}_4\text{:Tb}$, B – a new sensitive OSL phosphor for dosimetry // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2011. Vol. 269. Pp. 1844–1848.
- [18] **Baby T., Nampoori V.P.N.** Fluorescence emission of SrS:Eu^{2+} phosphor – energy level splitting of Eu^{2+} // Solid State Commun. 1992. Vol. 81. Pp. 367–369.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАЛАН Четан Б. – *M.Sc. (физика), сотрудник кафедры физики университета Сант Гадж Баба Амравати, г. Амравати, Индия.*

Amravati, Maharashtra 444602, India
Chetanpalan27@gmail.com

БАДЖАДЖ Нихилеш Сабхашандра – *Ph.D. (физика), доцент кафедры физики университета Сант Гадж Баба Амравати, г. Амравати, Индия.*

Amravati, Maharashtra 444602, India
nsb.0208@yahoo.com

ОМАНВАР Шринивас Керба – *Ph.D., профессор, заведующий кафедрой физики университета Сант Гадж Баба Амравати, г. Амравати, Индия.*

Amravati, Maharashtra 444602, India
Omanwar@rediffmail.com



OPTICAL AND THERMAL PROPERTIES OF PTh-co-PANI-Ti RANDOM COPOLYMER COMPOSITE FOR PHOTOVOLTAIC APPLICATION

In the present work, a polythiophene (PTh)-co-polyaniline (PANI)-titanium (Ti) copolymer has been synthesized as a novel copolymeric composite material for photovoltaic (PV) application. The focus of the study was to evaluate optical and thermal properties of the PTh-co-PANI-Ti copolymer containing different types of monomers. The optical conductivity was determined from the UV-VIS spectra that were used to calculate the extinction coefficients. The structure and morphology of composite was analyzed through field emission-electron microscopy (FESEM). The PTh-co-PANI-Ti copolymer composite exhibited significant photovoltaic (PV) response to light intensity. $J-V$ analysis showed an increase in conversion efficiency from 0.21 to 1.50 of PTh-co-PANI-Ti with illumination light intensity. PV properties demonstrated that the PTh-co-PANI-Ti exhibited the highest power conversion efficiency $\eta = 1.5$, with a short circuit current $I_{sc} = 0.72$ mA, an open circuit voltage $V_{oc} = 0.9$ V and a fill factor $FF = 0.51$. Thermo-gravimetric (TG) and differential thermal (DTA) analyses were carried out for the thermal stability of the PTh-co-PANI-Ti copolymer composite. The results obtained from the characterization of PTh-co-PANI-Ti showed that many properties of PV action are present in as-synthesized material.

POLYMER, OPTICAL PROPERTY, OPTICAL PARAMETER, THERMAL PROPERTY, COMPOSITE.

1. Introduction

Over the last decade, the literature on photovoltaic (PV)-cell technology has developed significantly in the context of design, synthesis, and characterization of the copolymer base of PV systems, but the challenge still remained to achieve efficient charge photogeneration in PV device architectures [1]. Conjugated polymers and their composites exhibit high optoelectronic properties, universally used in low-cost electronic and optical devices [2]. Most of the organic PV cells have been based on the conjugated polymers such as polyaniline (PANI) and polythiophene (PTh) due to their excellent electrical characteristics, thermal and environmental stability and solubility [3, 4]. By using the novel effective fabrication technique of PV cells, i.e., roll-to-roll, ink-jet and doctor-blading, processing have achieved the maximum power conversion efficiency of organic PV, leading to current certified efficiencies up to 10 % [5]. PV properties are directly related

to the material's structure and its band gap [6]. Conjugated polymers generally exhibit a low band gap in the range of 1.5 – 3.0 eV. The amount of absorbed photons from the incident light has been governed by I_{sc} current of PV cell, because of the low excitation of the donor level [7]. Some attempts to increase the charge separation efficiency by increasing the TiO_2 /polymer interfacial area have been reported. PTh and PANI have been synthesized via oxidative polymerization by using FeCl_3 with the high stability in polymer/titanium dioxide (TiO_2) composites [8]. PTh and PANI have nonlinear optical responses because of high sensitive to the oxidation state and doping level [9]. The optical properties can easily be tuned by a simple organic pathway [10]. PV application has been required for fast nonlinear refractive index with response time [11]. More recently, the efficiency of polymeric PV cell has been increased up to about 6.0–7.4% by using low band-gap conjugated polymers as

an electron donors [12], although individual donor or acceptor materials can show good PV and optical properties as single-layer PV cells [13]. Most PV cells based on P₃HT (Poly (3-hexylthiophene-2,5-diyl)) have a limited absorption range in the UV region which absorbs photons only in the visible region [14].

The present work is an attempt to report the optical and PV properties of PTh-*co*-PANI-Ti composite. An indium-tin-oxide (ITO)-coated glass plate was used as a light transparent conducting electrode for fabrication of the PV cells. The prepared samples were characterized through field emission-electron microscopy (FESEM), ultraviolet (UV)–visible (VIS) optical spectroscopy and the thermogravimetric (TG) and the differential thermal analyses (DTA).

2. Experimental

Thiophene, aniline and titanium chloride (TiCl₄) were purchased from SD fine, India. AR grade were used as starting chemicals, without further purification. The TiCl₄ was used as an oxidizing agent to initiate the chemical polymerization. The random copolymer of PTh-*co*-PANI-Ti was synthesized by taking a 1:1:1 molar ratio of aniline, thiophene and TiCl₄. In a typical synthesis process, both monomer solutions were added in a beaker under rigorous magnetic stirring. As soon as TiCl₄ was added in that solution, it started the polymerization reaction with the change in the colour of PTh and PANI solution instantaneously and therefore the solution became dark brown.

In the fabrication of a PV cell, ITO-coated glass substrate was cleaned ultrasonically in a mixture of detergent, deionized water, acetone and ethanol for 90 min. The doctor blade technique was used for the deposition of the active layer of PTh-*co*-PANI-Ti composite on ITO substrates. During the fabrication of PV cell, aluminum foil with a thickness of 0.22 μm was used for the metallic contact. This foil was placed onto the active layer of the composite. In this way, the PV cell in the ITO/ PTh-*co*-PANI-Ti/Al architecture was fabricated to obtain PV response at room temperature under an incandescent light bulb with the light intensity of 100, 200, 300 mW/cm². The photovoltaic response was taken for three times

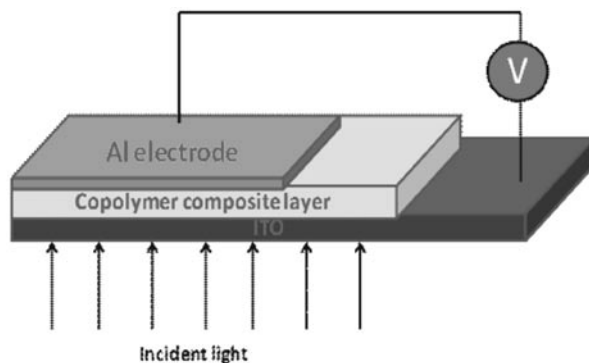


Fig. 1. Side view of PV cell in the ITO/ PTh-*co*-PANI-Ti/Al architecture

for reproducibility of our PV cell. A side view of the as-fabricated PV cell is shown in Fig. 1.

Material characterization. The physical and chemical and also thermal properties of as-synthesized samples were characterized through FESEM, UV-VIS and TG-DTA. The UV-VIS analysis was performed using a Perkin Elmer UV spectrophotometer in the range between 190 and 1000 nm. The structure, the morphology and the grain size of the samples were obtained by FESEM (JEOL JSM-6360).

Fig. 2 depicts a FESEM micrograph and the result of the energy-dispersive X-ray (EDX) analysis of the PTh-*co*-PANI/Ti composite. Fig. 2, *a* demonstrates that the SEM image of the synthesized PTh-*co*-PANI-Ti belongs to composites. The PTh-*co*-PANI-Ti composite exhibits very rough, micro-fibrillar porous structure and all particles on the surface are inhomogeneous in nature. FESEM images clearly indicate the agglomeration of particles in the as-synthesized PTh-*co*-PANI/Ti composite. The micrograph clearly shows that the as-synthesized copolymer system acquires fibril nature, which can be observed in the most of the micrograph picture. Similarly, some petals were observed in that micrograph which were attributed to a higher degree of polymerization. It is probable that, due to a high degree of polymerization, the fibril nature of polymeric system was lapped or reduced to a petal shape. The average size of fibril structure ranges between 0.1 and 0.3 μm. Fig. 2, *b* shows the EDX spectrum of PTh-*co*-PANI-Ti. There is a sharp peak of Ti, so it is confirmed that Ti was doped during the polymerization. The

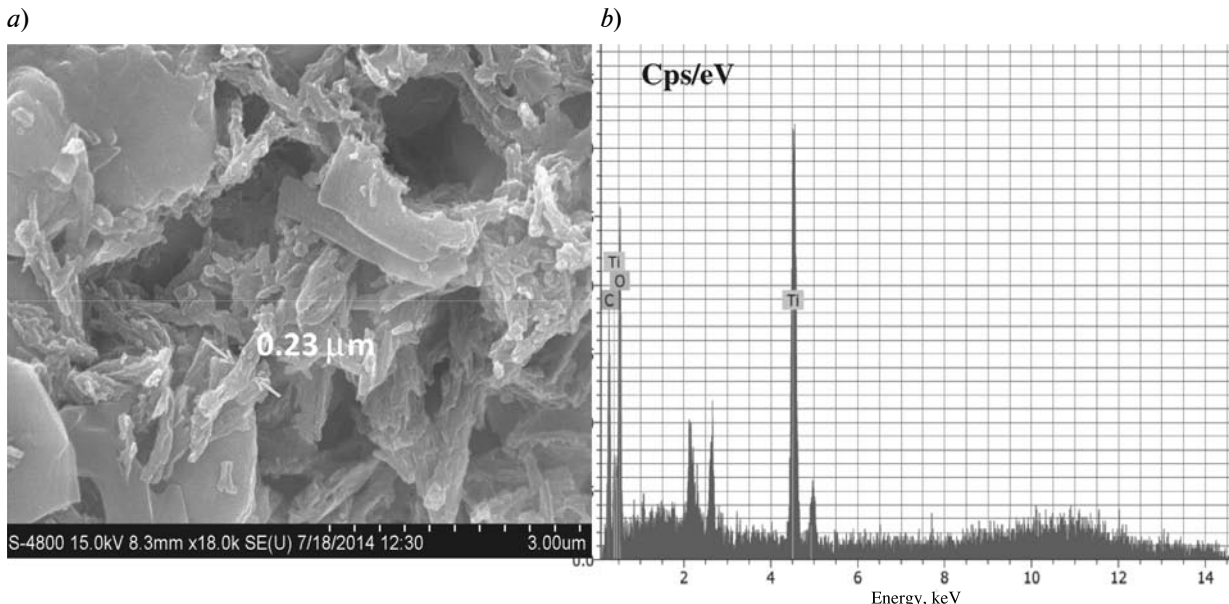


Fig. 2. FESEM image (a) and EDX spectrum (b) of the PTh-co-PANI / Ti composite

rough and inhomogeneous surface morphology of the as-synthesized PTh-co-PANI-Ti enhancing the optical and PV action in the as-fabricated PV cell may be due to the presence of Ti [15]. The micrograph clearly shows that the as-synthesized copolymer system acquires a fibril nature, which can be observed in the most of the micrograph picture.

The analysis of the UV-VIS spectra of the PTh-co-PANI / Ti composite system shown in Fig. 3 was carried out with a view to explore their optical properties. Fig. 3 shows the strongest optical absorption in the low-wavelength region appearing at ~255 nm. This may be due to $\pi \rightarrow \pi^*$ transition of the polymer backbone, the absorption tail being observed towards the higher wavelength values. As to the low wavelength edge in the absorption spectrum, the as-synthesized PTh-co-PANI/Ti composite shows the photoinduced charge-carrier confinement effects in the UV region. The PV action of the material was depending upon its optical conductivity, absorption coefficient and direct (or indirect) band gap [16].

The relation between the absorption coefficient α and the incident photon energy $h\nu$ can be expressed as

$$\alpha = \frac{A(h\nu - E_g)^n}{h\nu}, \quad (1)$$

where A is the constant and E_g is the band gap of the material. The exponent n depends on the type of the transition.

The optical conductivity can be calculated from the following formula:

$$\sigma = \frac{\alpha n c}{4\pi}, \quad (2)$$

where c is the speed of light, α is the absorption coefficient, n is the refractive index.

The extinction coefficient can be determined using the formula

$$k = \frac{\alpha \lambda}{4\pi}, \quad (3)$$

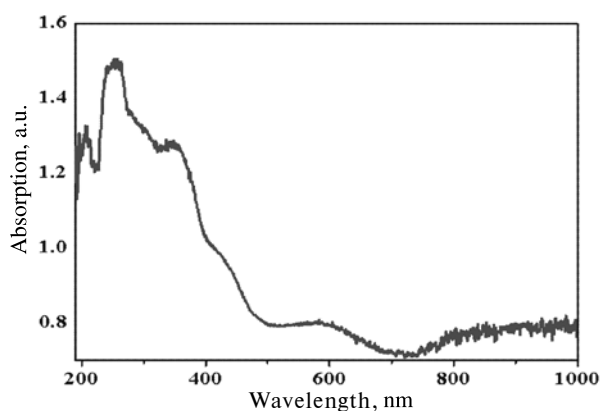


Fig. 3. UV-VIS spectrum of the PTh-co-PANI / Ti composite

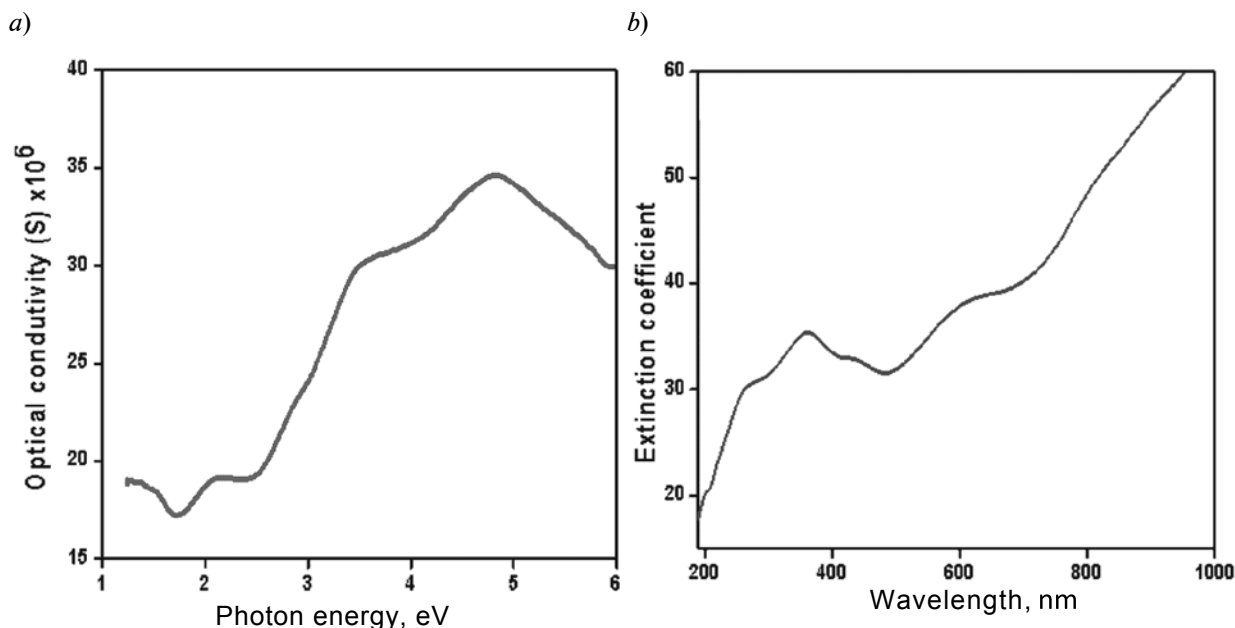


Fig. 4. The plots of photoconductivity versus energy (a) and extinction coefficients versus wavelengths (b)

where λ is the wavelength of light [17].

Fig. 4, a shows the variation of optical conductivity calculated from Eq. (2) with the incident photon energy of the as-synthesized PTh-co-PANI/Ti composite. Fig. 4, a clearly indicates that increased optical conductivity at high photon energies is due to optical conduction. Up to 2.5 eV, the optical conductivity is constant but beyond that it suddenly grows with photon energy. This may be assigned to the maximum optical absorption taking place in the UV region and lower absorption in the visible region (as displayed in UV spectrum) [18].

Fig. 4, b shows the plots of the extinction coefficient values versus photon wavelengths. The extinction coefficient continually increases with incident photon wavelength, but in the region from 350 to 500 nm the presence of a valley may be due to reflection of light from the surface of the as-synthesized of PTh-co-PANI/Ti composite.

Fig. 5 shows the J - V characteristics of PV cell fabricated from the as-synthesized PTh-co-PANI / Ti composite. These characteristics were measured under three illumination intensities (mW/cm^2): of 100, 200 and 300 using the incandescent light bulb. The various PV parameters such as I_{sc} , V_{oc} , J_{max} , V_{max} were

estimated from the J - V characteristics curve. The power conversion efficiency η calculated from Eq. 4 and the fill factor (FF) calculated from Eq. 5 are listed in Table. These are the following:

$$\eta = \frac{(J_{sc} \cdot V_{oc}) \cdot FF}{P_{in}}, \quad (4)$$

where P_{in} is the input power;

$$FF = \frac{Im(ax) \cdot V_{max}}{I_{sc} \cdot V_{oc}}. \quad (5)$$

At a low light intensity ($100 \text{ mW}/\text{cm}^2$) of incident light, the cell efficiency was 0.21% but for a high-intensity light bulb ($300 \text{ mW}/\text{cm}^2$) the cell efficiency grew up to 1.5 %. Both the open-circuit voltage and the fill factor are in the ranges from 0.75 to 0.90 V and from 0.51 to 0.57, respectively. However, at the light intensity of $200 \text{ mW}/\text{cm}^2$, the efficiency was found to be 0.70 %. On the other hand, photocurrent density increased up to the value of $0.72 \text{ mA}/\text{cm}^2$. The higher performance at lower intensity shows that the PV cell system is able to convert light energy efficiently as less photons are left unutilized. The increase in J_{sc} and PCE implies that a high intensity of incident light may be due to a higher carrier mobility [19].



Table

Parameters of the PV cell

Light intensity, mW/cm ²	V_{oc} , V	I_{sc} , mA	FF	η , %
100	0.75	0.11	0.54	0.21
200	0.84	0.32	0.57	0.70
300	0.90	0.72	0.51	1.50

Notations: V_{oc} is the open circuit voltage, I_{sc} is the short circuit current, FF is the fill factor, η is the power conversion efficiency.

The thermal decomposition of the PTh-*co*-PANI-Ti composite shows a three-step weight loss for the as-synthesized sample (see curve 1 in Fig. 6). The first weight loss of 10.09 % from 40 to 210 °C may be due to the loss of water molecules which are present in the composite. A second weight loss of 51.32 % ranging from 240 to 435 °C may be associated with the loss of small fragments of molecular weight which are present in the composite. A third weight loss is observed in the range from 450 °C to 700 °C, which may correspond to thermal degradation of the polymer.

Thermogravimetric analysis indicates the increase in thermal stability of the polymer composite compared to pure polymer [20]. The DTA curve of PTh-*co*-PANI-Ti shown in Fig. 6

(see curve 2) exhibits an endothermic peak around 172 °C due to the loss of surrounding water molecules. An exothermic peak at 347.08 °C is due to the decomposition of polymer composite.

Conclusions

In the present work, we have successfully synthesized a random copolymer between PTh and PANI. The as-synthesized copolymer was successfully employed for PV application. The power performance of the as-fabricated PV cells was enhanced by using light intensity. The short-circuit current increased from $J_{sc} = 0.11$ mA/cm² for the reference cell to 0.72 mA/cm² for the best PTh-*co*-PANI-Ti PV cell. The current gain gives a rise of the

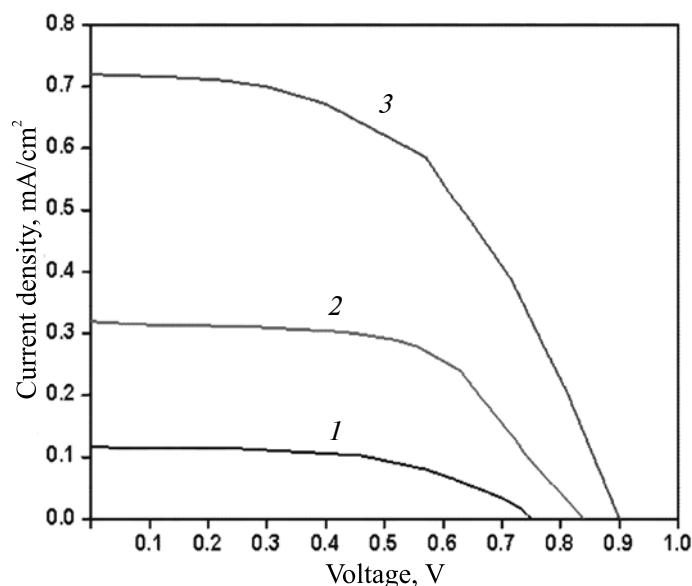


Fig. 5. J - V characteristics of the as-fabricated ITO/PTh-*co*-PANI-Ti / Al system at different values of light intensity, mW/cm²: 100 (1), 200 (2), 300 (3)

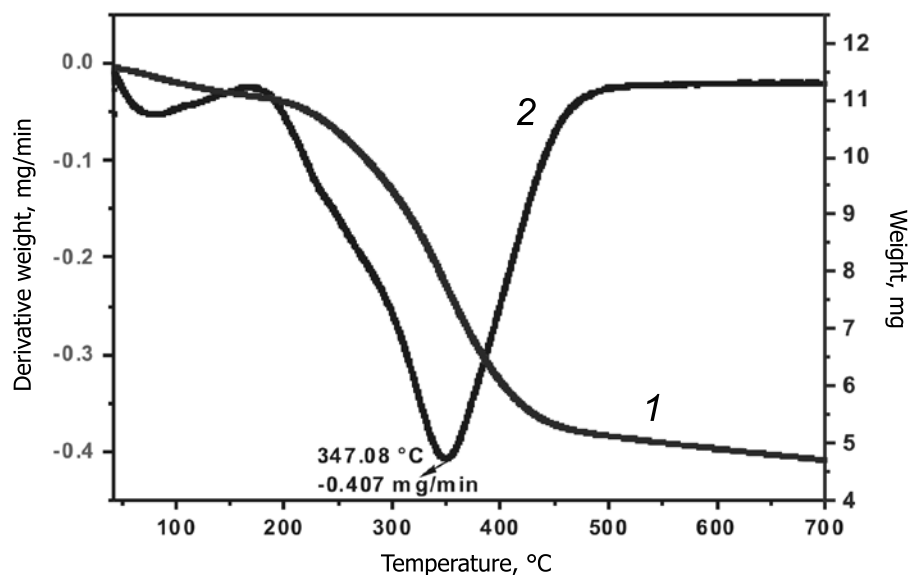


Fig. 6. TG (1) and DTA (2) curves of PTh-co-PANI-Ti. An exothermic peak with the corresponding DW value is shown

conversion efficiency from $\eta = 0.21\%$ to 1.50% . This enhancement is explained by light scattering from the surface of the PTh-co-PANI-Ti composite active layer. The copolymer composite absorbed light in a spectral range from the UV region to near 300 nm. In view of the characterization we carried out, we can conclude that material design strategies provide

us with efficient pathways for obtaining polymer composites with altered optical and thermal properties.

Acknowledgments

The authors are thankful to the Head of the Department of Physics, Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati.

REFERENCES

- [1] C. Guo, Y.H. Lin, M.D. Witman, et al., Conjugated block copolymer heterojunctions with near 3% efficiency through microphase separation, *Nano Lett.* 13 (2013) 2957–2963.
- [2] S.R. Takpire, S.A. Waghuley, Synthesis of copolymer in PTh-co-PANI-Ti system for photovoltaic application, *Mater. Lett.*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.matlet.2015.03.002>.
- [3] S.S. Pandey, K. Rikitake, W. Takashima, K. Kaneto, Photovoltaic properties in poly(3-alkylthiophene) based heterojunction cells, *Curr. Appl. Phys.* 3 (2003) 107–113.
- [4] S.M. Lee, S.B. Lee, K.H. Kim, et al., Syntheses and photovoltaic properties of polymeric sensitizers using thiophene-based copolymer derivatives for dye-sensitized solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 95 (2011) 306–309.
- [5] D. Tonelli, Y. Vlamidis, Novel regioregular polythiophenes containing side-chain porphyrin groups for polymeric photovoltaic cells, *Mater. Chem. Phys.* 146 (2014) 464–471.
- [6] A. Azazi, A. Mabrouk, K. Alimi, Theoretical investigation on the photophysical properties of low-band-gap copolymers for photovoltaic devices, *Comput. Theor. Chem.* 978 (2011) 7–15.
- [7] R. Kroon, M. Lenes, J.C. Hummelen, et al., Small bandgap polymers for organic solar cells, *Polym. Rev.*, 48 (2008) 531–582.
- [8] Z. Han, J. Zhang, X. Yang, et al., Synthesis and photoelectric property of poly(3-methoxythiophene)/titanium dioxide complexes, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 94 (2010) 755–760.
- [9] A. Sezer, U. Gurudas, B. Collins, et al., Nonlinear optical properties of conducting polyaniline and polyaniline-Ag composite thin films, *Chem. Phys. Lett.* 477 (2009) 164–168.
- [10] A. Drury, S. Chaure, M. Kroll, et al., Fabrication and characterization of silver/polyaniline composite nanowires in porous anodic alumina, *J. Chem. Mater.* 19(2007) 4252.
- [11] G.S. Maciel, J.G. Bezerra, N. Rakov, et al., Third-order nonlinear optical properties of undoped polyaniline solutions and films probed at 532 nm, *J. Opt. Soc. Am. B* 18 (2001) 1099.



- [12] S. Saravanana, M.R. Anantharamana, S. Venkatachalamb, D.K. Avasthi, Studies on the optical band gap and cluster size of the polyaniline thin films irradiated with swift heavy Si ions, *Vacuum*. 82 (2008) 56–60.
- [13] M. Namvara, S.B. Ghorashid, A. Behjata, H.R. Zare, Investigation of optical and chemical properties of poly(3-methylthiophene) and polypyrrole for solar cell fabrication, *Optik – Int. J. Light Electron Opt.* (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijleo.2012.08.096>
- [14] J.A. Mikroyannidis, D.V. Tsagkournos, P. Balraju, G.D. Sharma, Efficient bulk heterojunction solar cells using an alternating phenylenevinylene copolymer with dithenyl(thienothiadiazole) segments as donor and PCBM or modified PCBM as acceptor, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. 95 (2011) 3025–3035.
- [15] S.R. Takpire, S.A. Waghuley, Photovoltaic study of chemically derived titanium-doped polythiophene composites, *J. Elec. Mater.* DOI 10.1007/s11664-015-3704-x.
- [16] H.S. Abdulla, A.I. Abbo, Optical and electrical properties of thin films of polyaniline and polypyrrole, *Int. J. Electrochem. Sci.* 7 (2012) 10666–10678.
- [17] K.R. Nemade, S.A. Waghuley, UV–VIS spectroscopic study of one pot synthesized strontium oxide quantum dots, *Results Phys.* 3 (2013) 52–54.
- [18] P. Routh, S. Das, A. Shit, et al., Graphene quantum dots from a facile sono-fenton reaction and its hybrid with a polythiophene graft copolymer toward photovoltaic application, *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 5 (2013) 12672–12680.
- [19] Q. Yanga, D. Yang, S. Zhao, et al., The improved performance of solution-processed SQ:PC71BM photovoltaic devices via MoO₃ as the anode modification layer, *Appl. Surf. Sci.* 284 (2013) 849–854.
- [20] M.D. Bedre, R. Deshpande, B. Salimath, V. Abbaraju, Preparation and characterization of polyaniline-co3o4 nanocomposites via interfacial polymerization, *Am. J. Mater. Sci.* 2 (2012) 39–43.

THE AUTHORS

WAGHULEY Sandeep A.

Sant Gadge Baba Amravati University
Amravati, Maharashtra 444602, India
sandeepwaghuley@sgbau.ac.in

TAKPIRE Sanjay R.

Babasaheb Naik College of Engineering & Technology
Yeotmal Dist., Maharashtra, 445215, India
sanjay_takpire@rediffmail.com

Такпире С.Р., Уагхули С.А. ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА СТАТИСТИЧЕСКОГО СОПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА ПТ-СО-ПАНИ-Ti, ПЕРСПЕКТИВНОГО ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВАХ.

Впервые синтезирован новый сополимер политиофен(ПТ)-со-полианилин(ПАНИ)-титан (Ti) – композитный материал, предназначенный для применения в фотоэлектрических устройствах. Главная цель исследования состояла в оценке оптических и тепловых свойств сополимера в зависимости от вида содержащегося в нем мономера. Фотопроводимость измерялась по оптическим спектрам видимой и УФ-области, чтобы рассчитать соответствующие коэффициенты экстинкции. Структура и морфология композита изучалась методом сканирующей автоэмиссионной электронной микроскопии (FESEM). Объект продемонстрировал существенную чувствительность к интенсивности светового излучения. Из анализа вольтамперных характеристик сополимера установлено, что эффективность фотообразования энергии падающего на объект света в электрический ток составляет от 0,21 до 1,50. Изучение фотоэлектрических свойств материала показало, что изучаемый сополимер проявляет наивысшую эффективность преобразования энергии $\eta = 1,5$, при этом ток короткого замыкания составлял 0,72 мА, холостое напряжение – 0,9 В, а фактор заполнения – 0,51. Для определения термостабильности сополимерного композита были также проведены термовесиметрический анализ и дифференциальный термоанализ. Результаты, полученные при исследовании вновь синтезированного материала, показали, что он обладает свойствами, характерными для фотоэлектрика.

ПОЛИМЕР, ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, ОПТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ, ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА. КОМПОЗИТ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Guo C., Lin Y.H., Witman M.D., et al. Conjugated block copolymer photovoltaics with near 3% efficiency through microphase separation // Nano Lett. 2013. Vol. 13. Pp. 2957–2963.
- [2] Takpire S.R., Waghuley S.A. Synthesis of copolymer in PTh-co-PANi-Ti system for photovoltaic application, Mater. Lett., <http://dx.doi.org/10.1016/j.matlet.2015.03.002>.
- [3] Pandey S.S., Rikitake K., Takashima W., Kaneto K. Photovoltaic properties in poly(3-alkylthiophene) based heterojunction cells // Curr. Appl. Phys. 2003. Vol. 3. Pp. 107–113.
- [4] Lee S.M., Lee S.B., Kim K.H., et al., Syntheses and photovoltaic properties of polymeric sensitizers using thiophene-based copolymer derivatives for dye-sensitized solar cells // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 2011. Vol. 95. Pp. 306–309.
- [5] Tonelli D., Vlamidis Y. Novel regioregular polythiophenes containing side-chain porphyrin groups for polymeric photovoltaic cells // Mater. Chem. Phys. 2014. Vol. 146. Pp. 464–471.
- [6] Azazi A., Mabrouk A., Alimi K. Theoretical investigation on the photophysical properties of low-band-gap copolymers for photovoltaic devices // Comput. Theor. Chem. 2011. Vol. 978. Pp. 7–15.
- [7] Kroon R., Lenes M., Hummelen J.C., et al. Small bandgap polymers for organic solar cells // Polym. Rev. 2008. Vol. 48. Pp. 531–582.
- [8] Han Z., Zhang J., Yang X., et al. Synthesis and photoelectric property of poly(3-methoxythiophene)/titanium dioxide complexes // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 2010. Vol. 94. Pp. 755–760.
- [9] Sezer A., Gurudas U., Collins B., et al. Nonlinear optical properties of conducting polyaniline and polyaniline-Ag composite thin films // Chem. Phys. Lett. 2009. Vol. 477. Pp. 164–168.
- [10] Drury A., Chaure S., Kroll M., et al. Fabrication and characterization of silver/polyaniline composite nanowires in porous anodic alumina // J. Chem. Mater. 2007. Vol. 19. P. 4252.
- [11] Maciel G.S., Bezerra J.G., Rakov N., et al. Third-order nonlinear optical properties of undoped polyaniline solutions and films probed at 532 nm // J. Opt. Soc. Am. 2001. Vol. B 18. P. 1099.
- [12] Saravanana S., Anantharamana M.R., Venkatachalamb S., Avasthi D.K. Studies on the optical band gap and cluster size of the polyaniline thin films irradiated with swift heavy Si ions // Vacuum. 2008. Vol. 82. Pp. 56–60.
- [13] Namvara M., Ghorashid S.B., Behjata A., Zare H.R. Investigation of optical and chemical properties of poly(3-methylthiophene) and polypyrrole for solar cell fabrication // Optik – Int. J. Light Electron Opt. 2013. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijleo.2012.08.096>
- [14] Mikroyannidis J.A., Tsagkournos D.V., Balraju P., Sharma G.D. Efficient bulk heterojunction solar cells using an alternating phenylenevinylene copolymer with dithenyl(thienothiadiaazole) segments as donor and PCBM or modified PCBM as acceptor // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 2011. Vol. 95. Pp. 3025–3035.
- [15] Takpire S.R., Waghuley S.A. Photovoltaic study of chemically derived titanium-doped polythiophene composites // J. Elec. Mater. DOI 10.1007/s11664-015-3704-x.
- [16] Abdulla H.S., Abbo A.I. Optical and electrical properties of thin films of polyaniline and polypyrrole // Int. J. Electrochem. Sci. 2012. Vol. 7. Pp. 10666–10678.
- [17] Nemade K.R., Waghuley S.A. UV–VIS spectroscopic study of one pot synthesized strontium oxide quantum dots // Results Phys. 2013. Vol. 3. Pp. 52–54.
- [18] Routh P., Das S., Shit A., et al. Graphene quantum dots from a facile sono-fenton reaction and its hybrid with a polythiophene graft copolymer toward photovoltaic application // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2013. Vol. 5. Pp. 12672–12680.
- [19] Yanga Q., Yang D., Zhao S., et al. The improved performance of solution-processed SQ:PC71BM photovoltaic devices via MoO₃ as the anode modification layer // Appl. Surf. Sci. 2013. Vol. 284. Pp. 849–854.
- [20] Bedre M.D., Deshpande R., Salimath B., Abbaraju V. Preparation and characterization of polyaniline-Co₃O₄ nanocomposites via interfacial polymerization // Am. J. Mater. Sci. 2012. Vol. 2. Pp. 39–43.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

УАГХУЛИ Сандип Анандрао – Ph.D., доцент кафедры физики университета Сант Гадж Баба Амравати, г. Амравати, Индия.

Amravati, Maharashtra 444602, India
sandeepwaghuley@sgbau.ac.in

ТАКПИРЕ Санджей Р. – доцент кафедры физики Инженерного колледжа Бабасахей Найк, г. Явот-мал, Индия.

Yeotmal Dist., Maharashtra, 445215, India
sanjay_takpire@rediffmail.com



DOI: 10.5862/JPM.230.12

UDC: 547.4 + 661.122

V.V. Dhapte, P.P. Mehta

Bharati Vidyapeeth University, Poona College of Pharmacy, India

ADVANCES IN HYDROTROPIC SOLUTIONS: AN UPDATED REVIEW

Approximately a century ago, in 1916, the term 'hydrotropy' was coined by the scientist Carl A. Neuberg to address anionic organic salts which considerably augmented the aqueous solubility of poorly soluble solutes. Currently hydrotropic solutions possess high industrial demand due to their unique features, such as easy availability, good recovery, absence of fire hazards, high separation factors without any solutes emulsification problem and eco-friendly nature. The present review takes the readers through a concise overview, geometrical features of hydrotropic agents, hypothetical mechanisms and their different advances towards drug delivery. Moreover, this review would provide an insight into the future perspectives concerned with drug delivery and hydrotropism.

HYDROTROPY, MESOSCALE SOLUBILIZATION, DRUG CARRIER, GREEN CHEMISTRY.

1. Introduction

The current main problem in the pharmaceutical industry is related to strategies that augment the aqueous solubility of drugs, as almost 70 % of the newly discovered drug candidates suffer from poor aqueous solubility [1]. Solubility is one of the prime substance features to accomplish the desired pharmacological response. The therapeutic effectiveness of a drug depends upon the bioavailability and ultimately is attributed to the solubility of drug moiety [2]. Presently, numerous formulation technologies are available to enhance solubility as well as dissolution profile to enhance oral bioavailability [3]. In addition to these technologies, 'hydrotropy' is one of the recognized techniques available for resolving solubility issues. This review will elaborate various hypothetical and investigational mechanisms, geometrical features and applications of hydrotropic agents in the pharmaceutical field, which will aid the researchers in exploring hydrotropy for progress in drug delivery.

2. Hydrotropy and hydrotropic agents

In 1916, the term 'hydrotropy' was coined by the scientist Carl A. Neuberg [4]. Hydrotropes with an amphiphilic molecular structure possess the ability to increase the solubility of sparingly

soluble organic molecules in water [5]. It is a molecular phenomenon whereby adding a second solute (hydrotrope) helps to increase the aqueous solubility of poorly soluble solutes [6]. Simply, the presence of a large quantity of one solute enhances the solubility of another solute [7]. Hydrotropes are stated as ionic organic salts which help to increase or decrease the solubility of solute in a given solvent via 'salt in' or 'salt out' effects, respectively.

Salts which show a 'salt in' of non-electrolytes are called 'hydrotropic salts', and the phenomenon is known as 'hydrotropism'. They do not exhibit any colloidal properties but they improve solubility by forming weak interactions with solute molecules [8]. A hydrotropic molecule interacts with a less water-soluble molecule via a weak Van der Waals interaction, such as a π - π or attractive dipole-dipole interaction [9].

Hydrotropes contain both hydrophobic and hydrophilic fractions. In comparison to surfactant, they contain a very small hydrophobic fraction [10]. The efficiency of hydrotropic solubilization depends on the balance between hydrophobic and hydrophilic parts of the hydrotrope [11]. The larger is the hydrophobic part of an additive, the better is the hydrotropic efficiency; the presence of the charge on the hydrophilic part is less important [12]. Hydrotropes can be anionic, cationic

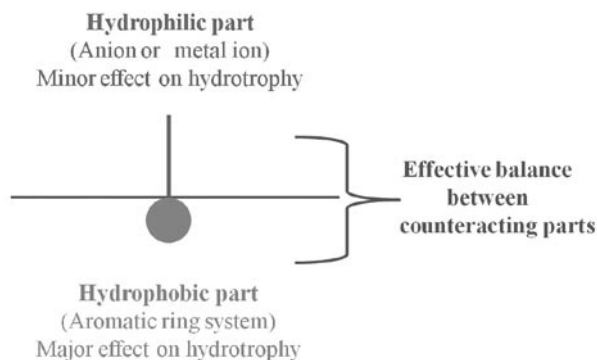


Fig. 1. The internal effective structure of a hydrotrope

Table 1

Examples of hydrotropic agents

Type	Example
Aromatic anionic	Sodium benzoate, sodium salicylate, sodium benzene sulphonate, sodium benzene di-sulphonate, sodium cinnamate, sodium 3-hydroxy-2-naphthoate, Sodium para- toluene sulphonate, sodium cumene sulphonate, nicotinamide, N,N-diethylnicotinamide, N,N-dimethyl benzamide (see Fig. 2)
Aromatic cationic	Paraaminobenzoic acid hydrochloride, procaine hydrochloride and caffeine (see Fig. 2).
Aliphatic and linear compound	Sodium alkanoate, urea and N,N-dimethyl urea (see Fig. 2).

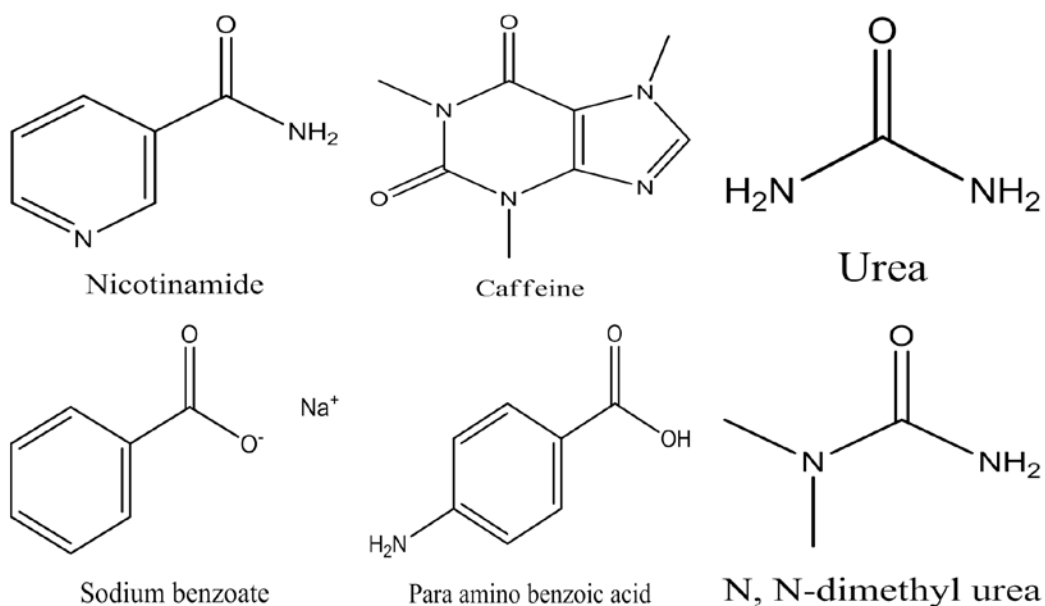


Fig. 2. Chemical formulae of the commonly used hydrotropic agents



or neutral, organic or inorganic, and liquids or solids in nature (Fig. 1). These are freely soluble organic compounds which enhance the aqueous solubility of organic substances by forming stack-type aggregation [13, 14]. A few examples of hydrotropic agents are given in Table 1 and in Fig. 2 [15, 16].

3. Mechanism of hydrotropism

The enhancement of water-solubility by the hydrotrope is based on the molecular self-association of the hydrotrope and on the association of hydrotrope molecules with the solute. Although they are widely used in various industrial applications, only sporadic information on the mechanisms of hydrotropism is available. Various hypotheses and research efforts are being made to clarify the mechanisms of hydrotropism. The available proposed mechanisms can be abridged according to three designs [17]:

- (a) Self-aggregation potential,
- (b) Structure-breaker and structure-maker,
- (c) Ability to form micelle-like structures.

These unique geometrical features and different association patterns of hydrotrope assemblies distinguish them from other solubilizers [18, 19].

Self-aggregation potential. Minimum hydrotropic concentration (MHC) is a critical concentration at which hydrotrope molecules start to aggregate, i.e., self-aggregation potential [6]. The solubilization power of hydrotropes is governed by their self-aggregation potential [11]. This potential depends upon their amphiphilic features and the nature of a solute molecule [18, 20]. They mainly show the volume-fraction-dependent solubilization potential [21]. Hydrotropes strongly interact with the solute to generate the complexes, and these complexes could then lead to higher aqueous solubility. These outcomes have evolved from the fluorescence emissions methods [9], crystallography analysis, molecular dynamics replication and thermodynamic solubility experiments [22–24]. Apart from these, they may act as bridging agents by reducing the Gibbs energy to increase the solubility of a solute [23]. Simply, the structure of the hydrotrope-water mixture around the drug molecule is the true key toward understanding the origin of the self-

aggregation potential [25].

Structure-breaker and structure-maker.

An electrostatic force of the donor-acceptor molecule plays a vital role in the hydrotropic solubilization; hence, they are also termed as a structure-breaker and a structure-maker [26, 27]. Solutes which are capable both of hydrogen donation and acceptance help to increase solubility. Solutropic agents, such as urea, exert their solubilizing effect by changing the nature of the solvent, specifically by altering the solvent's ability to participate in structure formation or its ability of engaging in structure formation via intermolecular hydrogen bonding [28]. Structure-breaker hydrotropes are known as chaotropes while structure-maker ones are known as kosmotropes [29]. Kosmotropes reduce the critical micelle concentration (CMC) by increasing the hydrophobic interaction which decreases the cloud point. Basically, a kosmotrope influences the cloud point in two ways, i.e., helps (*i*) to form bigger micelles and (*ii*) to decrease hydration. In case of amphiphilic drugs, promazine hydrochloride (PMZ) and promethazine, cyclodextrin act as water structure-makers and reduce the cloud point [30].

Ability to form micelle-like structures. This mechanism is based on the self-association of hydrotropes with solutes into a micellar arrangement [31]. Basically, they form stable mixed micelles with a solute molecule decreasing the electrostatic repulsion between the head groups [32]. Hydrotropes, such as alkyl-benzene sulfonates, lower alkanolates and alkyl sulphates, exhibit self-association with solutes and form micelles. Aromatic anionic hydrotrope agents, i.e. nicotinamide, improve the solubility of riboflavin via a self-association mechanism [33]. In case of PMZ, anionic hydrotropic agents, such as sodium salicylate, form stable mixed micelles by decreasing the electrostatic repulsion between the head groups of PMZ [32].

Fluctuation theory of solutions. Moreover, some researchers also illustrate fluctuation theory of solutions (FTS) to determine the mechanism of hydrotropic solubilization. FTS has recognized two chief factors of hydrotrope-induced solubilization:

- (i) Hydrotrope-solute interaction;

(ii) Water activity depression.

The former is conquered by hydrotrope-solute association while the latter is improved by ionic dissociation and hindered by the self-aggregation of the hydrotropes [34].

Apart from above-mentioned mechanism, the nature and the concentration are the drawing forces for the solubilizing potential of hydrotropes. An aromatic hydrotropic agent with a planar structure interacts with solute molecules via inducing stacking aggregation mechanisms [35, 36]. Caffeine exhibits parallel stacking in aqueous solutions to solubilize the riboflavin [37]. Anionic hydrotropic agents at low concentrations increase but, at higher concentrations, decrease the cloud point. Cationic and non-ionic hydrotropes show a steep rise in the cloud point of amphiphilic drugs. The extent of the cloud-point variation for using different hydrotropes does variously depend on their nature and structure [38]. Hydrotropes in high concentrations (0.1 – 0.8 M) form aggregates and decrease the cloud point of amphiphilic drugs while in lower concentrations they increase the cloud point of amphiphilic drugs [39]. The concentration of hydrotropes plays an important role in the solubilization mechanism of drug molecules. Sodium benzoate and sodium salicylate, when employed to enhance the aqueous solubility of nifedipine, illustrated the complexation type of interaction at a low concentration and aggregation at a high one [40]. The hydrotropic solubilization of nimesulide exhibits weak ionic interactions at a lower hydrotrope concentration and molecular aggregation at a higher one [41]. Dexibuprofen, when combined with hydrotropic agents and investigated by the differential scanning calorimetry (DSC) and the infrared (IR) spectroscopy, demonstrated intermolecular interactions between the drug and the hydrotropic agents, which increased solubility and dissolution rate of the drug [42].

4. Application of hydrotropes

Hydrotropes have many realistic applications in both the biomedical and the engineering fields. The uses involve the development of pharmaceutical formulations, food stuffs, detergent solutions, solute separation processes, paint industry, coatings, plastic additives,

selective separation and alterations in reaction kinetics. In this connection, various applications related to development of pharmaceuticals are discussed.

Hydrotropes as drug carriers. These have a unique potential to act as carriers for active pharmaceutical ingredients. They have the ability to generate dynamic, non-covalent assemblies, i.e. clusters in aqueous solutions. In the presence of hydrophobic compounds, these clusters are stabilized by the formation of long-lived, highly stable mesoscopic droplets due to a phenomenon known as ‘mesoscale solubilization’. Such materials can help in processing various products ranging from pharmaceuticals, cosmetics and agrochemicals [43]. Subtle changes in surfactant geometry lead to a marked effect on the macroscopic rheological behaviour of the system. These micellar solutions act as a template for tissue engineering and as a modifier of the drug delivery [44]. Additionally, hydrotropes are of considerable importance in various applications, such as oil/water (o/w) microemulsion stabilizers, viscosity modifiers, cleaning agents, solubilizers in formulation development [45 – 48]. As they act at the molecular level, hydrotropes provide better efficacy in the ‘bottom-up’ techniques than the ‘top-down’ ones [49]. Considering these functionalities, formulation scientists are fabricating several drug delivery systems based on the hydrotropic approach in order to enhance the therapeutic efficacy of critical drug molecules.

Solid dispersions (SD) are the most popular ways of improving the drug release of poorly soluble drugs. It is a molecular mixture of poor water-soluble drugs in hydrophilic carriers wherein the drug release profile is driven by the polymer properties. It helps to increase solubility and dissolution profile of poor water-soluble drugs. Commonly used polymers in preparation of SD are povidone, cyclodextrin, starch, hydroxy propyl methylcellulose, ethyl cellulose, hydroxypropylcellulose, polyethyleneglycols and silica [50, 51]. A single hydrotrope or a blend of them has been effectively used to formulate the SDs. In case of SDs, hydrotropes enhance solubility as well as dissolution kinetics due to complete amorphization and intermolecular hydrogen bonding with drug molecules (see Table 2).



Table 2

Examples of solid dispersions using hydrotropic agents

Drug	Hydrotropic agent	Key finding	Reference
Norfloxacin	Sodium benzoate	9.56 fold enhancement in aqueous solubility	[52]
Aceclofenac	Urea 20 % and sodium citrate 10 %	1.7 fold improvement in vitro dissolution	[53]
Theophylline	Urea 5 % and sodium citrate 10 %	142.26 times improvement in aqueous solubility	[54]
Diclofenac sodium	Urea 20 % and sodium citrate 10 %	250 times improvement in aqueous solubility	[55]
Lurasidone hydrochloride	Nicotinamide, sodium benzoate and sodium citrate	Improvement of drug release	[56]
Pizotifen malate	Povidone (Kollidon 12)	Improvement in aqueous solubility	[57]

Transdermal formulations. Transdermal administration of drugs provides the benefits of achieving a remedial effect without the risks of impending side effects that may occur after oral administration. The selection of a suitable drug carrier in transdermal formulation is very important since it can affect percutaneous absorption [58].

A 5-Fluorouracil transdermal formulation was prepared using polyglycerol fatty acid monoesters (PGMC) as a hydrotrope. Mean particle size of the solution consisting of PGMC was approximately 14 nm. The hydrotropic transdermal formulation enhanced skin permeation of 5-FU due to the ability of the hydrotrope to form aggregates [59]. Specifically, in the topical formulation, the value of the distribution coefficient ($\log D$) of a compound played a vital role in solubilization. It showed a crucial impact on the solubility enhancement factor (SEF). This factor is a ratio of the solubility of a substance in ternary mixture to its solubility in pure solvent under identical temperature conditions. All compounds with $\log D$ values between 2.0 and 4.5 showed a SEF more than 5 in 40 % aqueous solutions of urea while with a $\log D$ value below 2 or above 5, SEF was less than 5. In some cases such as diclofenac and prednicarbate, SEF achieved a value that was more than 5 at 5 % urea and

more than 250 at 20 % urea [60]. Paraben-containing semisolid topical formulations were prepared with nicotinamide which helped to reduce the stratum corneum vehicle partition coefficient. Nicotinamide potentiated the paraben dissolution in aqueous media (solutions, gels) and reduced their partitioning in the oily phase, thereby also reducing the toxicological risk [61].

Parenteral formulation can be the administration via various routes, such as intravenous, intramuscular, intra-arterial, subcutaneous and intradermal. Currently, parenteral products are the key element for therapeutic ailments in hospitalized patients. These products provide various advantages, such as a lower dosing frequency, and a rapid onset of action along with good bioavailability. In addition to these conventional parenteral products, novel parenteral delivery systems, like liposomes, nanoparticles, implants, patches are also available for controlled, sustained and active targeted drug delivery [62].

An aceclofenac aqueous injection was prepared using a mixed hydrotrope (20 % urea and 10 % sodium citrate) technique via lyophilization. It showed better solubility performance as compared to the pure drug. The enhancement in the solubility of aceclofenac was more than 250 folds and

additionally it also exhibited better physical and chemical stability [13]. Aqueous injectable indomethacin formulation was developed using sodium *p*-hydroxy benzoate, sodium benzoate, urea and nicotinamide as hydrotropes. The hydrotropic solubilization of indomethacin at a lower hydrotrope concentration was attributed to weak ionic interactions while that at higher hydrotrope concentration was due to molecular aggregation. Indomethacin exhibited highest and lowest solubility in sodium *p*-hydroxy benzoate and urea, respectively. Moreover, the prepared formulation showed better physical and chemical stability over a period of six months [63]. An injectable nifedipine formulation was prepared by a mixed hydrotrope technique (30 % sodium benzoate and 30 % sodium salicylate). It showed a better aqueous solubility profile and stability over a period of one month [64]. A temazepam aqueous injection was prepared using sodium salicylate and nicotinamide as hydrotropes by the lyophilization method. Solubilization was enhanced due to an increase in hydrogen bonding between the drug and hydrotrope mixtures [65].

Miscellaneous. 2-Hydroxypropyl-beta-cyclodextrin (2-HP-beta-CD) was used to wrap methyltestosterone (MeT) moiety in the inclusion complex of MeT-2-HP-beta-CD. The intermolecular hydrogen bonding between MeT and 2-HP-beta-CD helped to enhance the solubility of MeT. The prepared MeT-2-HP-beta-CD complex also showed 7-fold improvement in the oral bioavailability of MeT [66]. Paclitaxel-beta-cyclodextrin functionalized hyperbranched polyglycerol (HPG) micelles were prepared with an objective of solubility enhancement. The prepared micelles showed a multimolecular spherical nature with the particle size of 200 to 300 nm and good dispersity. It showed a burst release followed by continuous extended release. Furthermore, MTT analysis showed good biocompatibility and a promising hydrophobic drug delivery system [67]. Greseofulvin suspensions were prepared using the aqueous phase of sodium benzoate. The particles of the prepared suspension ranged in size from 10 to 20 μm . It showed a 70 % drug release at the end of 45 min [68]. Furosemide floating microspheres were prepared with

Eudragit RSPO and niacinamide by the solvent evaporation method. The optimized formulation exhibited a 98.2 % encapsulation efficiency and 145 nm particle size in the average. Surface morphology displayed a hollow spherical structure with a smooth outer surface. Enhanced drug solubility was due to complete amorphization and intermolecular hydrogen bonding between the drug and the hydrotropes. Moreover, it illustrated sustained release in acidic environment and stability up to one month [69]. Starch gels were prepared without heat treatment or chemical modification by using sodium salicylate as a gelling agent. Release patterns of the gels were studied using riboflavin as a prototype drug. Riboflavin showed consistent diffusion-controlled kinetics. Pattern of the drug release depended on the initial loading levels and the starch content of the gels. Thus, hydrotrope-gelled starch proved to be a better vehicle for topical drug delivery [70].

Titrimetric and spectrophotometric estimations. The analysis of poorly aqueous soluble drugs is commonly carried out by the spectrophotometric method. It involved the use of various organic solvents, like acetone, acetonitrile, benzene, carbon tetrachloride, diethylether, ethanol, methanol and toluene. The main shortcomings related to these organic solvents were their volatile nature, toxicity, flammability and cost. To overcome such difficulties, hydrotropic solutions were used. Hydrotropic agents used in titrimetric and/or spectrophotometric estimations are listed in Table 3.

Green chemistry. This is a scientific field that has arisen in the 1990s. It studies enhancements of chemical processes that can have a beneficial impact on the environment.

Separation of mixture. Hydrotropic solutions possess high industrial demand due to their easy availability, good recovery, absence of fire hazards and high separation factors without any solutes emulsification problem [105–107]. It helps to enhance the solubility of various organic solutes such as acids, alcohols, aldehydes, esters, fats, hydrocarbons and ketones [108]. The concentration and hydrophobic parameters (the surface area, the molar volume of the



Table 3

Examples of titrimetric and spectrophotometric estimations for which hydrotropic agents are used

Drug	Dosage form	Hydrotropic agent	Increase in solubility, times	Reference
<i>Titrimetric analysis</i>				
Aspirin	Tablets	0.5M ibuprofen sodium	05	[71]
Aceclofenac	Bulk drug and tablets	0.5M ibuprofen sodium	120	[72]
		2.5 M sodium salicylate	400	[73]
Furosemide		2 M sodium benzoate	90	[74]
Famotidine	Bulk drug	2M sodium salicylate	25	[75]
Ibuprofen	Bulk drug and tablets	2 M sodium benzoate	80	[76]
Naproxen	Tablets	0.5M ibuprofen sodium	350	[77]
Salicylic acid	Bulk drug	0.5 M ibuprofen sodium	12	[78]
		2.0 M sodium salicylate	06	
Salbutamol sulphate	Bulk drug	2M nicotinamide	17	[79]
Theophylline	Bulk drug	2M sodium	18	[80]
<i>Spectrophotometric analysis</i>				
Amlodipine besylate	Bulk drug and tablets	Urea	07	[81]
Amlodipine besylate	Bulk drug and tablets	2M sodium acetate	75	[82]
Atenolol HCl	Tablets	1M metformin hydrochloride	03	[83]
Aceclofenac	Bulk drug and tablets	2.5 M sodium salicylate	400	[84]
Atorvastatin	Tablets	2M Urea	07	[85]
Acetazolamide	Bulk drug	7.5 M N,N-dimethyl urea	02	[86]
		5.5 M sodium acetate	1.8	
Cefadroxil		6M urea	10	[87]
Diclofenac sodium	Tablets	7.5M N, N dimethyl urea	11	[88]
Metronidazole and Furazolidone	Tablets	Sodium acetate and 8 M urea solution (50:50%V/V)	28	[89]
Furazolidone	Tablets	2 M sodium acetate, 8 M urea, 2 M niacinamide and 2 M sodium benzoate (25:25:25:25 % V/V)	32	[90]
Hydrochlorothiazide	Tablets	2M Nicotinamide	43	[91]
Indomethacin	Capsule	2 M niacinamide	05	[92]
Ketoprofen	Tablets	2M potassium acetate	210	[93]
Lovastatin	Tablets	4M sodium acetate	06	[94]
Losarton	Tablets	Sodium chloride	63	[95]

to be continued

The end of Table 3

Metronidazole	Tablets	Sodium benzoate	05	[96]
Naproxen	Tablets	2 M sodium benzoate	120	[97]
Naproxen	Tablets	0.5 M ibuprofen sodium	350	[98]
Nalidixic acid	Tablets	Sodium benzoate	98	[96]
Ornidazole	Tablets	0.5M ibuprofen sodium	08	[99]
Ornidazole	Tablets	10 M urea	10	[100]
Rosiglitazone maleate	Bulk drug and tablets	6M urea	14	[101]
Simvastatin	Bulk drug and tablets	Sodium chloride	90	[102]
Tinidazole	Tablets	1 M lignocaine hydrochloride	06	[103]
Tenfovir disoproxil fumarate	Tablets	Sodium benzoate	121	[104]
Tinidazole	Tablets	Sodium benzoate	06	[96]

hydrophobic parts) of hydrotropes appear to be important in solute separations [109]. The influence of a chain length of a hydrotropic agent helps to improve solute recovery (Fig. 3).

The addition of the short chain of cationic hydrotropic agents to sodium dodecyl sulfate (SDS) phase helped to enhance oil recovery [110]. Hydrotropes separate the close-boiling

isomeric components from their binary mixtures. They are also used to extract various bioactive components from the plant material (see Table 4).

In addition to extractive separation, hydrotropes are also useful in improving enzymatic hydrolysis efficiency. Hydrotropic pre-treatment helps to augment enzymatic

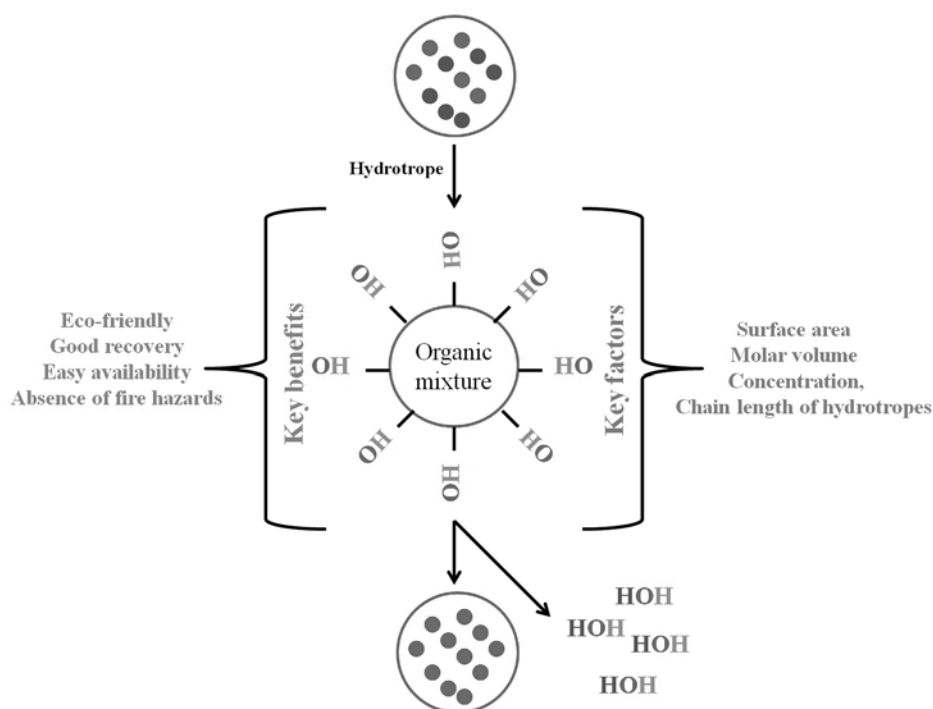


Fig. 3. Hydrotropic mechanism of separation



Table 4

Examples of mixture separations for which hydrotropic agents are used

Mixture	Hydrotrope	Isolated compound	Reference
Citrus aurantium L.	Sodium salicylate and sodium cumene sulphonate	Limonoids	[111]
Turmeric	Sodium cumene sulfonate	Curcuminoids	[112]
Rauwolfia vomitoria	Sodium cumene sulfonate	Reserpine	[113]
Black pepper	Butyl benzene sulfonate and sodium dodecyl sulfate	Piperine	[114]
Sugarcane bagasse	Alky benzene sulfonates	Ligno-cellulosic fibers (without breaking of the cellulosic material)	[115]
6-aminopenicillanic acid (6-APA) reaction mixture	Sodium butyl monoglycol sulphate	6-APA	[116]

hydrolysis efficiency of common reed and sugar cane bagasse to produce fermentable sugar [117, 118]. In case of enzymatic hydrolysis of polysaccharides, it significantly increases the glucose yield. [119]. Olefinic compounds, like sodium cinnamate (Na-CIN), exhibit the photoswitchable recovery of solute under exposure to UV irradiation. Various organic solutes, such as cinnamic acid, aspartic acid, curcumin, thymol, benzocaine and natural compounds, like forskolin and curcumin, are easily recovered under UV irradiation with the help of Na-CIN [120]. Hydrotropic solubilization helps to facilitate the aqueous solubility of rapamycin, a poorly water-soluble immunosuppressive drug, up to a 1000 times [121]. In extractive isolation process, hydrotropes reduce the use of harmful organic

solvents and keep the process environment-friendly.

Green synthesis. Hydrotropes provide a simple, efficient and green platform for various industrial organic transformations. Moreover, being economic, non-toxic, non-flammable and eco-friendly, hydrotropic solutions possess surplus physical and chemical features required as alternate green solvents for organic reactions. Within the outline of green chemistry, the aqueous hydrotropic method offers several advantages, such as trouble-free handling, cleaner reaction profile, high conversion rate and short reaction time, making it a useful option for rapid synthesis. Another important characteristic of the hydrotropic medium is its simple recovery from the reaction mixture and its recyclability. Furthermore, easy recovery of

Table 5

Examples of synthesis for which hydrotropic agents are used

Reaction media	Hydrotropic solution	Substrate	Reference
Octahydro-quinazolinone	50% aqueous sodium <i>p</i> -toluene sulfonate	Microwave irradiation	[122]
B-amino carbonyl compounds	50% aqueous sodium <i>p</i> -toluene sulfonate	Ultrasound irradiation	[123]
Hautsch esters	Aqueous sodium butylmono-glycol sulphate	Domestic microwave	[124]
Aza-Micheal reaction	Glycerol	—	[125]

products from hydrotropic solutions makes this protocol an attractive green chemistry approach (see Table 5).

5. The perspectives for hydrotropy

The progress in the studies of hydrotropes has boosted their use in various practical implementations. Specifically, the utilization of hydrotropic compounds has been increasingly recognized in formulation development. Various experimental studies have confirmed their solubility potential along with a non-toxic, non-flammable and eco-friendly nature. However, many challenges remain with respect

to their structure-based mechanism and toxicity profiling since their crucial side effects on normal cells during active targeting are yet to be assessed. When progress in hydrotropy, as well as novel drug delivery approaches catch up with the challenge, hydrotropic mechanisms, stability in biological solutions, biocompatibility and enhanced efficacy along with delivery techniques will be one step closer to reality. This technology is expected to transform the advances towards enhanced therapeutic delivery of poorly aqueous soluble drugs as well as critical moieties with narrow therapeutic index.

REFERENCES

- [1] **P. Khadka, J. Ro, H. Kim, et al.**, Pharmaceutical particle technologies: an approach to improve drug solubility, dissolution and bioavailability, *Asian Journal of Pharmaceutical sciences*. 9 (2014) 304–316.
- [2] **D. Brahmkar, S. Jaiswal**, *Biopharmaceutics and pharmacokinetics: a treatise*, third ed., Vallabh prakashan, India, 2011.
- [3] **V. Vemula, V. Lagishetty, S. Lingala**, Solubility enhancement techniques, *Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res.* 5 (2010) 41–51.
- [4] **C. Neuberg**, Hydrotropic phenomena, *Biochem. Z.* 76 (1916) 107.
- [5] **T. Hodgdon, E. Kaler**, Hydrotropic solutions, *Curr. Opin. Colloid. In.* 12 (2007) 121–128.
- [6] **A. Saleh, L. El-Khordagui**, Hydrotropic agents: a new definition, *Int. J. Pharm.* 24 (1985) 231–238.
- [7] **R. Maheshwari, A. Archana, R. Amit, et al.**, Eco-friendly spectrophotometric estimation of atenolol tablets using metformin hydrochloride as hydrotropic solubilising agent, *Journal of Global Pharma Technology.* 2 (2010) 93–96.
- [8] **V. Kumar, C. Raja, C. Jayakumar**, A review on solubility enhancement using hydrotropic phenomena, *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 6 (2014) 1–7.
- [9] **M. Neumann, C. Schmitt, K. Prieto, et al.**, The photophysical determination of the minimum hydrotrope concentration of aromatic hydrotropes, *J. Colloid. Interface. Sci.* 315 (2007) 810–813.
- [10] **N. Kapadiya, I. Singhvi, K. Mehta, et al.**, Hydrotropy: a promising tool for solubility enhancement: a review, *Int. J. Drug Dev. Res.* 3 (2011) 26–33.
- [11] **J. Kim, S. Kim, M. Papp, et al.**, Hydrotropic solubilization of poorly water-soluble drugs, *J. Pharm. Sci.* 99 (2010) 3955–3965.
- [12] **P. Bauduin, A. Renoncourt, A. Kopf, et al.**, Unified concept of solubilization in water by hydrotropes and co-solvents, *Langmuir.* 21 (2005) 6769–6775.
- [13] **R. Maheshwari, A. Indurkha**, Formulation and evaluation of aceclofenac injection made by mixed hydrotropic solubilization technique, *Iran. J. Pharm. Res.* 9 (2010) 233–242.
- [14] **A. Saleh, L. El-Khordagui**, Hydrotropic agents: a new definition, *Int. J. Pharm.* 24 (1985) 231–238.
- [15] **A. Patil, S. Devtalu, M. Bari, S. Barhate**, A review on novel solubility enhancement technique hydrotropy, *Indo-American Journal of Pharm Research.* 3 (2013) 4670–4679.
- [16] **M. Sajid, V. Choudhary**, Solubility enhancement methods with importance of hydrotropy, *J. Drug Deliv. Ther.* 2 (2012) 96–101.
- [17] **K. Szabo, P. Wang, B. Peles-Lemli, et al.**, Structure of aggregate of hydrotropic p-toluene sulfonate and hydroxyacetophenone isomers, *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects.* 422 (2013) 143–147.
- [18] **E. Friberg, C. Brancewicz**, O/W microemulsions and hydrotropes: the coupling action of a hydrotrope, *Langmuir.* 10 (1994) 2945–2949.
- [19] **M. Hatzopoulos, J. Eastoe, J. Peter, et al.**, Are hydrotropes distinct from surfactants? *Langmuir.* 27 (2011) 12346–12353.
- [20] **K. Lai**, *Liquid detergents*, second ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 2006.
- [21] **G. Verma, V. Aswal, G. Fritz-Popovski, et al.**, Dilution induced thickening in hydrotrope-rich rod-like micelles, *J. Colloid. Interface. Sci.* 359 (2011) 163–170.
- [22] **W. de Paula, A. Denadai, M. Santoro, et al.**, Supramolecular interactions between losartan and hydroxypropyl- β -CD: ESI mass-spectrometry, NMR techniques, phase solubility, isothermal titra-



tion calorimetry and anti-hypertensive studies, *Int. J. Pharm.* 404 (2011) 116–123.

[23] **R. Da Silva, M. Spitzer, L. Da Silva, et al.** Investigations on the mechanism of aqueous solubility increase caused by some hydrotropes, *Thermochimica Acta.* 328 (1999) 161–167.

[24] **V. Gaikar, P. Pathak,** Selective solubilization of isomers in hydrotrope solution o-p-chlorobenzoic acids and o-p-nitro anilines, *Sep. Sci. Technol.* 34 (1999) 439–459.

[25] **S. Shimizu, N. Matubayasi,** Hydrotrope: monomer-micelle equilibrium and minimum hydrotrope concentration, *J. Phys. Chem. B.* 118 (2014) 10515–10524.

[26] **A. Badwan, L. El-Khordagui, A. Saleh, S. Khalil,** The solubility of benzodiazepines in sodium salicylate solution and a proposed mechanism for hydrotropic solubilization, *Int. J. Pharm.* 13 (1983) 67–74.

[27] **G. Ferreira, D. Perigo, M. Politi, S. Schreier,** Effect of anions from the hofmeister series and urea on the binding of the charged and uncharged forms of the local anesthetic tetracaine to zwitterionic micelles, *Photochem. Photobiol.* 63 (1996) 755–761.

[28] **R. Coffman, D. Kildsig,** Effect of nicotinamide and urea on the solubility of riboflavin in various solvents, *J. Pharm. Sci.* 85 (1996) 951–954.

[29] **A. Khanam, M. Sheikh, I. Khan, Kabir-ud-Din,** Aggregational behavior of alkanediyl- α - ω -bis (tetradecyl dimethyl ammonium) dibromide series with ionic and non-ionic hydrotropes at different temperatures, *J. Ind. Eng. Chem.* 20 (2014) 3453–3460.

[30] **M. Rub, N. Azum, D. Kumar, et al.,** Clouding phenomenon of amphiphilic drug promazine hydrochloride solutions: Influence of pharmaceutical excipients, *J. Ind. Eng. Chem.* 21(2015) 1119–1126.

[31] **S. Lee, K. Huh, J. Lee, et al.,** Hydrotropic polymeric micelles for enhanced paclitaxel solubility: in vitro and in vivo characterization, *Biomacromolecules.* 8 (2007) 202–208.

[32] **A. Malik, M. Abdullah, A. Naved, Kabir-ud-Din,** Investigation of micellar and phase separation phenomenon of phenothiazine drug promazine hydrochloride with anionic hydrotropes, *J. Ind. Eng. Chem.* 20 (2014) 2023–2034.

[33] **S. Schreier, S. Malheiros, E. de Paula,** Surface active drugs: self-association and interaction with membranes and surfactants physicochemical and biological aspects, *Biochimica et Biophysica Acta.* 1508 (2000) 210–234.

[34] **J. Booth, S. Abbott, S. Shimizu,** Mechanism of hydrophobic drug solubilization by small

molecule hydrotropes, *J. Phys. Chem. B.* 116 (2012) 14915–14921.

[35] **S. Kumar, N. Gandhi,** Association model of hydrotrope for the effect of hydrotropes on solubility and mass transfer coefficient of acetylsalicylic acid, *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 4 (2012) 600–605.

[36] **V. Kumar, C. Jayakumar, C. Raja, N. Gandhi,** Hydrotropic aggregation behavior of butyl stearate, *Chemical and Materials Engineering.* 1 (2013) 1–7.

[37] **Y. Cui,** Parallel stacking of caffeine with riboflavin in aqueous solutions: the potential mechanism for hydrotropic solubilization of riboflavin, *Int. J. Pharm.* 397 (2010) 36–43.

[38] **A. Malik, A. Asiri, N. Azum, et al.,** Amphiphilic antidepressant drug amitriptyline hydrochloride under the influence of ionic and non-ionic hydrotropes; micellization and phase separation, *J. Ind. Eng. Chem.* 19 (2013) 1774–1780.

[39] **Z. Andleeb, A. Malik, Kabir-ud-Din,** Effects of pharmaceutical excipients on cloud points of amphiphilic drugs, *J. Colloid. Interf. Sci.* 361 (2011) 42–48.

[40] **N. Jain, V. Patel, L. Taneja,** Hydrotropic solubilization of nifedipine, *Pharmazie.* 43 (1988) 194–196.

[41] **S. Agrawal, S. Pancholi, N. Jain, G. Agrawal,** Hydrotropic solubilization of nimesulide for parenteral administration, *Int. J. Pharm.* 274 (2004) 149–155.

[42] **B. El-Houssieny, E. El-Dein, H. El-Mes-siry,** Enhancement of solubility of dexibuprofen applying mixed hydrotropic solubilization technique, *Drug. Discov. Ther.* 8 (2014) 178–184.

[43] **D. Subramanian, M. Anisimov,** Phase behavior and mesoscale solubilization in aqueous solutions of hydrotropes, *Fluid. Phase. Equilibria.* 362 (2014) 170–176.

[44] **L. Magid, Z. Han, Z. Li, P. Butler,** Evaluation of ion effects on surfactant aggregation from improved molecular thermodynamic modeling, *Langmuir.* 16 (2000) 149.

[45] **A. Saleh, S. Khalil, L. El-Khordagui,** Solubility and stability of diazepam in sodium salicylate solution, *Int. J. Pharm.* 5 (1980) 161–164.

[46] **R. Guo, M. Compo, S. Friberg, K. Morris,** The coupling action of a hydrotrope and structure transition from lamellar liquid crystal, *J. Disper. Sci. Technol.* 17 (1996) 493–507.

[47] **V. Gaikar, P. Pathak,** Selective solubilization of isomers in hydrotrope solutions-o/p-chlorobenzoic acids and o-/p-nitroanilines, *Sep. Sci. Technol.* 34 (1999) 439.

[48] **N. Heldt, J. Zhao, S. Friberg, et al.,** Controlling the size of vesicles prepared from egg lecithin using a hydrotrope, *Tetrahedron.* 56 (2000)

6985–6990.

[49] **C. Guo, J. Wang, F. Cao, et al.**, Lyotropic liquid crystal systems in drug delivery, *Drug. Discov. Today*. 15 (2010) 1032–1040.

[50] **T. Vasconcelos, B. Sarmento, P. Costa**, Solid dispersions as strategy to improve oral bioavailability of poor water soluble drugs, *Drug. Discov. Today*. 12 (2007) 1068–1075.

[51] **R. Kamble, P. Palve, P. Mehta**, Preparation and evaluation of amorphous olmesartan medoxomil with porous silica microparticles using spray-drying technique, *Journal of Advanced Pharmacy Education & Research*. 4 (2014) 65–71.

[52] **K. Girishpai, S. Divya, M. Reddy, et al.**, Solubility enhancement of norfloxacin by hydrotropy technique, *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 6 (2014) 395–397.

[53] **R. Maheshwari, A. Indurkha**, Novel application of mixed hydrotropic solubilization technique in the formulation and evaluation of hydrotropic solid dispersion of aceclofenac, *Asian Journal of Pharmaceutics*. 4 (2010) 235–238.

[54] **C. Jayakumar, A. Morais, N. Arunodhaya, N. Gandhi**, Solubility enhancement of theophylline drug using different solubilization techniques, *International Journal of Pharmaceutical and Clinical Science*. 2 (2012) 7–10.

[55] **M. Gupta, V. Joshi, L. Amipara, et al.**, Development and evaluation of diclofenac sodium solid dispersion by mixed hydrotropic technique, *International journal of pharmaceutical research and development*. 3 (2011) 90–96.

[56] **J. Madan, K. Pawar, K. Dua**, Solubility enhancement studies on lurasidone hydrochloride using mixed hydrotropy, *Int. J. Pharm. Investig.* 5 (2015) 114–120.

[57] **M. Margarit, M. Marin, M. Contreras**, Solubility of solid dispersions of pizotifen malate and povidone, *Drug. Dev. Ind. Pharm.* 27 (2001) 517–522.

[58] **H. Piao, N. Kamiya, A. Hirata, et al.**, A novel solid-in-oil nanosuspension for transdermal delivery of diclofenac sodium, *Pharmaceut. Res.* 25 (2008) 896–901.

[59] **K. Takahashi, M. Komai, N. Kinoshita**, Application of hydrotropy to transdermal formulations: hydrotropic solubilization of polyol fatty acid monoesters in water and enhancement effect on skin permeation of 5-FU, *J. Pharm. Pharmacol.* 63 (2011) 1008–1014.

[60] **M. Herbig, D. Evers**, Correlation of hydrotropic solubilization by urea with log D of drug molecules and utilization of this effect for topical formulations. *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 85 (2013) 158–160.

[61] **S. Nicoli, F. Zani, S. Bilzi, et al.**, Associa-

tion of nicotinamide with parabens: effect on solubility, partition and transdermal permeation, *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 69 (2008) 613–621.

[62] **N. Gulati, H. Gupta**, Parenteral drug delivery: a review, *Recent. Pat. Drug. Deliv. Formul.* 5 (2011) 133–145.

[63] **A. Jain**, Solubilization of indomethacin using hydrotropes for aqueous injection, *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 68 (2008) 701–714.

[64] **N. Jain, V. Patel, L. Taneja**, Formulation and evaluation of nifedipine injection, *Pharmazie*. 43 (1988) 254–255.

[65] **A. Woolfson, D. McCafferty, A. Launchbury**, Stabilisation of hydrotropic temazepam parenteral formulations by lyophilisation, *Int. J. Pharm.* 34 (1986) 17–22.

[66] **B. Muller, E. Albers**, Effect of hydrotropic substances on the complexation of sparingly soluble drugs with cyclodextrin derivatives and the influence of cyclodextrin complexation on the pharmacokinetics of the drugs, *J. Pharm. Sci.* 80 (1991) 599–604.

[67] **X. Zhange, X. Zhange, Z. Wu, et al.**, A hydrotropic β -cyclodextrin grafted hyperbranched polyglycerol co-polymer for hydrophobic drug delivery, *Acta. Biomaterialia*. 7 (2011) 585–592.

[68] **A. Shete, A. Yadav, A. Dabke, S. Sakhare**, Formulation and evaluation of hydrotropic solubilization based suspensions of griseofulvin. *International Journal of Pharma Sciences and Research*. 1 (2010) 51–57.

[69] **M. Rathod, S. Agarwal**, Development and evaluation of furosemide microspheres made by mixed solvency concept, *International Journal of Pharmaceutical Erudition*. 2 (2013) 22–31.

[70] **L. El-Khordagui**, Hydrotrope-gelled starch: study of some physicochemical properties, *Int. J. Pharm.* 74 (1991) 25–32.

[71] **R. Maheshwari, M. Saxena, M. Gahlot, et al.**, Novel application of hydrotropic solubilizing additives in the estimation of aspirin in tablets, *Indian. J. Pharm. Sci.* 72 (2010) 649–651.

[72] **R. Maheshwari, P. Manchandani, D. Arif, et al.**, A novel method for quantitative determination of aceclofenac in bulk drug and tablet using ibuprofen sodium as hydrotropic solubilising agents, *Journal of applied chemical research*. 5 (2008) 63–68.

[73] **R. Maheshwari, S. Moondra**, A novel method for quantitative determination of aceclofenac in bulk drug and tablets using sodium salicylate as hydrotropic solubilising agent, *J. Adv. Pharma. Tech. & Res.* 1 (2010) 78–82.

[74] **R. Maheshwari**, Analysis of furosemide by application of hydrotropic solubilisation phenomenon, *The Indian Pharmacist*. 4 (2005) 55–58.



- [75] **C. Jayakumar, A. Morais, G. Rajasekhar, N. Gandhi**, Quantitative analysis of famotidine bulk sample using sodium salicylate hydrotrope, *International Journal of Institutional Pharmacy and Life Sciences*. 2 (2012) 98–103.
- [76] **R. Maheshwari, S. Chaturvedi, N. Jain**, Novel application of hydrotropic solubilisation in the analysis of some nsoids and their solid dosage forms, *Indian. J. Pharm. Sci.* 69 (2007)101–106.
- [77] **R. Maheshwari, G. Wanare, N. Chahar, et al.**, Quantitative estimation of naproxen in tablets using ibuprofen sodium as hydrotropic agent, *Indian. J. Pharm. Sci.* 71 (2009) 335–337.
- [78] **R. Maheshwari, V. Chavada, S. Varghese, K. Shahoo**, Analysis of bulk sample of salicylic acid by application of hydrotropic solubilisation method, *Indian. J. Pharm. Sci.* 70 (2008) 821–823.
- [79] **N. Sundari, T. Radhika, V. Saranya, N. Gandhi**, Quantitative analysis of salbutamol bulk sample using nicotinamide hydrotrope, *International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Science Research*. 2 (2012) 16 –19.
- [80] **C. Jayakumar, D. Kumar, D. Nesakumar, N. Gandhi**, Quantitative analysis of theophylline bulk sample using sodium salicylate hydrotrope, *Int. J. Pharm. Sci.* 2 (2010) 80–81.
- [81] **S. Bernard, M. Mathew, K. Senthikumar**, Spectrophotometric method of estimation of amlodipine besylate using hydrotropic solubilization, *J. Applied. Pharm. Sci.* 1 (2011) 177–180.
- [82] **N. Jain, R. Jain, A. Jain, et al.**, Spectrophotometric method development and validation for quantitative estimation of amlodipine besylate in bulk drug and their dosage forms by using hydrotropic agent, *Eurasian J. Anal. Chem.* 5 (2010) 212–217.
- [83] **R. Maheshwari, A. Agrawal, A. Rathore, M. Agarwal**, Eco-friendly spectrophotometric estimation of atenolol tablets using metformin hydrochloride as hydrotropic solubilizing agent, *Journal of Global Pharma Technology*. 2 (2010) 93–96.
- [84] **R. Maheshwari, S. Moondra**, A novel method for quantitative determination of aceclofenac in bulk drug and tablets using sodium salicylate as a hydrotropic solubilising agent, *J. Adv. Pharm. Technol. Res.* 1 (2010) 78–82.
- [85] **S. Jadhav, M. Bhatia, S. Thamake, S. Pishawikar**, Spectrophotometric methods for estimation of atorvastatin calcium form tablet dosage forms, *Int. J. PharmTech. Res.* 2 (2010) 1948–1953.
- [86] **M. Chhajed, A. Chhajed, A. Shrivastava, et al.**, New quantitative estimation of acetazolamide bulk sample using hydrotropic solubilising agents. *World Journal of Pharmaceutical Research*. 1 (2012) 50–57.
- [87] **R. Shukla, A. Patel, M. Soni, V. Modi**, Quantitative spectrophotometric estimation of Cefadroxil using hydrotropic solubilization technique, *Asian. J. Pharm.* 2 (2008) 146–147.
- [88] **R. Maheshwari, V. Mathur, Y. Satrawala, R. Sing**, Eco-friendly spectrophotometric estimation of diclofenac sodium in tablets using N,N-dimethyl urea as hydrotropic solubilising agent, *International Research Journal of Pharmacy*. 1 (2010) 157–160.
- [89] **R. Jain , N. Jain, D. Jain, et al.**, Novel UV spectrophotometer methods for quantitative estimation of metronidazole and furazolidone using mixed hydrotrope solubilization, *Arabian Journal of Chemistry*. doi:10.1016/j.arabjc.2013.09.003.
- [90] **N. Jain, R. Jain, D. Jain, et al.**, Novel UV spectrophotometric method for quantitative estimation of furazolidone using mixed hydrotropic agent, *Pak. J. Pharm. Sci.* 26 (2013) 159–162.
- [91] **R. Maheshwari, R. Shukla**, Novel method for spectrophotometric analysis of hydrochlorothiazide tablets using niacinamide as hydrotropic solubilising agent, *Asian. J. Pharm.* 2 (2008) 68–69.
- [92] **R. Maheshwari, A. Rathore, A. Agrawal, M. Gupta**, Spectrophotometric estimation of indomethacin capsules with niacinamide as hydrotropic solubilising agent, *Pharm. Methods*. 2 (2011) 184–188.
- [93] **S. Pandey, R. Maheshwari**, A novel spectrophotometric method for the estimation of ketoprofen in tablet dosage form using hydrotropic solubilisation phenomenon, *World. Appl. Sci. J.* 11 (2010) 1524–1527.
- [94] **D. Patil**, Spectroscopic determination of lovastatin by hydrotropic solubilization technique, *International Journal of Pharmaceutical and Chemical Sciences*. 1 (2012) 1142–1144.
- [95] **P. Sable, G. Chaulang, A. Bhosale**, Novel spectrophotometric estimation of izetemib, losartan and simvastatin using hydrotropic solubilising agents, *Int. J. Chemtech. Res.* 1 (2009) 1393–1397.
- [96] **R. Maheshwari, S. Chaturvedi, N. Jain**, Novel spectrophotometric estimation of some poorly soluble drugs using hydrotropic solubilising agents, *Ind. J. Pharma. Sci.* 68 (2006) 195–198.
- [97] **R. Maheshwari, A. Indurkha, S. Jawade, S. Jagwani**, Spectrophotometric estimation of naproxen tablets employing sodium benzoate as hydrotropic additive, *The Indian Pharmacist*. 8 (2009) 75–77.
- [98] **R. Maheshwari, G. Wanare, N. Chahar, et al.**, Quantitative estimation of naproxen in tablets using ibuprofen sodium as hydrotropic agent, *Indian. J. Pharm. Sci.* 71 (2009) 335–337.
- [99] **R. Maheshwari, S. Bishnoi, D. Kumar, M. Krishnan**, Quantitative spectrophotometric determination of ornidazole tablet formulations using ibuprofen sodium as hydrotropic solubilizing

agent, *Dig. J. Nanomater. Bios.* 5 (2010) 97–100.

[100] **R. Maheshwari, V. Srivastav, R. Prajapat, et al.**, New spectrophotometric estimation of ornidazole tablets employing urea as a hydrotropic solubilizing additive, *Indian. J. Pharm. Sci.* 72 (2010) 258–261.

[101] **A. Sherje, K. Desai**, Spectrophotometric determination of poorly water soluble drug rosiglitazone using hydrotropic solubilization technique, *Indian. J. Pharm. Sci.* 73 (2011) 579–582.

[102] **V. Chavhan, N. Naghbhidkar, M. Shukla, V. Singh**, UV spectrophotometric method development and validation for estimation of simvastatin in bulk and tablet dosage form using mixed hydrotropy solubilisation technique, *An International Journal of Advances in Pharmaceutical Sciences.* 5 (2014) 1740–1750.

[103] **R. Maheshwari, M. Rajput, S. Sinha**, Eco-friendly spectrophotometric estimation of tinidazole in tablets using lignocaine HCL as a hydrotropic solubilising agent, *Asian Journal of Pharmaceutics.* 3 (2009) 319–321.

[104] **M. Sharma, S. Sharma, A. Sharma**, Hydrotropic solubilization phenomenon spectrophotometric estimation of tenfovir disoproxil fumerate tablet, *J. Chemical. Pharm. Res.* 2 (2010) 411–415.

[105] **V. Gaikar, M. Sharma**, Separations with hydrotropes, *Sep. Technol.* 3 (1993) 2–11.

[106] **V.G. Gaikar, M.M. Sharma**, Note: extractive separations with hydrotropes, *Solvent. Extr. Ion. Exc.* 4 (1986) 839–846.

[107] **R. Perry**, *Perry's Chemical Engineers Handbook*, 7th ed., McGraw- Hill, New York, 1997.

[108] **M. Bhat, V. Gaikar**, Characterization of interaction between butyl benzene sulfonates and cetyl trimethyl ammonium bromide in a mixed aggregate systems, *Langmuir.* 5 (1999) 4740–4751.

[109] **M. Agarwal, W. Gaikar**, Extractive separations using hydrotropes, *Sep. Technol.* 2 (1992) 79–84.

[110] **K. Kanan, M. Al-Jabari, I. Kayali**, Phase behavioral changes in SDS association structures induced by cationic hydrotropes, *Arabian Journal of Chemistry.* <http://dx.doi.org/10.1016/j.arabjc.2012.08.003>

[111] **D. Dandekar, G. Jayaprakasha, B. Patil**, Hydrotropic extraction of bioactive limonin from sour orange (*Citrus aurantium* L.) seeds, *Food. Chem.* 109 (2008) 515–520.

[112] **D. Dandekar, V. Gaikar**, Hydrotropic extraction of curcuminoids from turmeric, *Separ. Sci. Technol.* 38 (2003) 1185–1215.

[113] **R. Sharma, V. Gaikar**, Hydrotropic

extraction of reserpine from rauwolfia vomitoria roots, *Separ. Sci. Technol.* 47 (2012) 827–833.

[114] **K. Padalkar, V. Gaikar**, Extraction of piperine from piper nigrum (black pepper) by aqueous solutions of surfactant and surfactant + hydrotrope mixtures, *Separ. Sci. Technol.* 43 (2008) 3097–3118.

[115] **K. Ansari, V. Gaikar**, Green hydrotropic extraction technology for delignification of sugarcane bagasse by using alky benzene sulfonates as hydrotropes, *Chem. Eng. Sci.* 115 (2014) 1157–1166.

[116] **N. Tavare, V. Jadhav**, Separation through crystallization and hydrotropy: the 6-aminopenicillanic acid (6-APA) and phenoxyacetic acid (PAA) system, *J. Cryst. Growth.* 198–199 (1999) 1320–1325.

[117] **H. Mou, E. Heikkila, P. Fardim**, Topochemistry of alkaline, alkaline-peroxide and hydrotropic pre-treatments of common reed to enhance enzymatic hydrolysis efficiency, *Bioresour. Technology.* 150 (2013) 36–41.

[118] **H. Mou, E. Heikkila, P. Fardim**, Topochemistry of environmentally friendly pre-treatments to enhance enzymatic hydrolysis of sugar cane bagasse to fermentable sugar, *J. Agric. Food. Chem.* 62 (2014) 3619–3625.

[119] **H. Mou, E. Orblin, K. Kruus, P. Fardim**, Topochemical pre-treatment of wood biomass to enhance enzymatic hydrolysis of polysaccharides to sugars, *Bioresour. Technol.* 142 (2013) 540–545.

[120] **L. Devendra, V. Gaikar**, Is sodium cinnamate a photo switchable hydrotrope? *J. Mol. Liq.* 165 (2012) 71–77.

[121] **P. Simamora, J. Alvarez, S. Yalkowsky**, Solubilization of rapamycin, *Int. J. Pharm.* 213 (2001) 25–29.

[122] **S. Kamble, A. Kumbhar, S. Jadhav, R. Salunkhe**, Microwave assisted attractive and rapid process for synthesis of octahydroquinazolinone in aqueous hydrotropic solutions, *Procedia Materials Science.* 6 (2014) 1850–1856.

[123] **S. Kamble, A. Kumbhar, G. Rashinkar, et al.**, Ultrasound promoted efficient and green synthesis of b-amino carbonyl compounds in aqueous hydrotropic medium, *Ultrasonics. Sonochemistry.* 19 (2012) 812–815.

[124] **B. Khadilkar, V. Gaikar, A. Chitnavis**, Aqueous hydrotrope solution as a safer medium for microwave enhanced hantzsch dihydropyridine ester synthesis, *Tetrahedron. Letters.* 30 (1995) 8083–8086.

[125] **S. Kamble, A. Kumbhar, S. Jadhav, R. Salunkhe**, Aza-Micheal reaction in glycerol as a sustainable hydrotropic medium, *Materials Today: Proceedings.* 2 (2015) 1792–1798.



THE AUTHORS

DHAPTE Vividha Vishwas

Bharati Vidyapeeth University, Poona College of Pharmacy
Erandwane, Kothrude, Pune 411038, Maharashtra, India
vividhapte@gmail.com

МЕНТА Piyush Pradeep

Bharati Vidyapeeth University, Poona College of Pharmacy
Erandwane, Kothrude, Pune 411038, Maharashtra, India
piyu053@mail.com

Дханте В.В., Мехта П.П. ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ ДОСТИЖЕНИЙ В ИССЛЕДОВАНИИ ГИДРОТРОПНЫХ РАСТВОРОВ.

Около столетия тому назад, в 1916 году, термин «гидротропия» был введен ученым Карлом Нойбергом для наименования солей с органическими анионами, которые значительно повышают растворимость в воде слаборастворимых веществ. В настоящее время гидротропные растворы пользуются большим спросом со стороны промышленности благодаря их уникальным свойствам, таким как доступность, простота утилизации, отсутствие пожароопасности, высокий коэффициент разделения без каких-либо веществ с проблемами эмульгирования, а также экологичность. Настоящий обзор знакомит читателей с кратким описанием, структурными свойствами гидротропных веществ, предположительными механизмами доставки лекарственных средств в организме, а также с подтверждениями этих механизмов. Данный обзор должен создать правильное представление о перспективах лекарственной доставки и гидротропизма.

ГИДРОТРОПИЯ, МЕЗОМАСШТАБНАЯ СОЛЮБИЛИЗАЦИЯ, НОСИТЕЛЬ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ, «ЗЕЛЕНАЯ ХИМИЯ».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Khadka P., Ro J., Kim H., et al.** Pharmaceutical particle technologies: an approach to improve drug solubility, dissolution and bioavailability // *Asian Journal of Pharmaceutical sciences*. 2014. Vol. 9. Pp. 304–316.
- [2] **Brahmankar D., Jaiswal S.** Biopharmaceutics and pharmacokinetics: a treatise, 3d ed. India: Vallabh prakashan, 2011.
- [3] **Vemula V., Lagishetty V., Lingala S.** Solubility enhancement techniques // *Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res.* Vol. 5. 2010. Pp. 41–51.
- [4] **Neuberg C.** Hydrotropic phenomena // *Biochem. Z.* 1916. Vol. 76. P. 107.
- [5] **Hodgdon T., Kaler E.** Hydrotropic solutions // *Curr. Opin. Colloid. In.* 2007. Vol. 12. Pp. 121–128.
- [6] **Saleh A., El-Khordagui L.** Hydrotropic agents: a new definition // *Int. J. Pharm.* 1985. Vol. 24. Pp. 231–238.
- [7] **Maheshwari R., Archana A., Amit R., et al.** Eco-friendly spectrophotometric estimation of atenolol tablets using metformin hydrochloride as hydrotropic solubilising agent // *Journal of Global Pharma Technology*. 2010. Vol. 2. Pp. 93–96.
- [8] **Kumar V., Raja C., Jayakumar C.** A review on solubility enhancement using hydrotropic phenomena // *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 2014. Vol. 6. Pp. 1–7.
- [9] **Neumann M., Schmitt C., Prieto K., et al.** The photophysical determination of the minimum hydrotrope concentration of aromatic hydrotropes // *J. Colloid. Interface. Sci.* 2007. Vol. 315. Pp. 810–813.
- [10] **Kapadiya N., Singhvi I., Mehta K., et al.** Hydrotropy: a promising tool for solubility enhancement: a review // *Int. J. Drug Dev. Res.* 2011. Vol. 3. Pp. 26–33.
- [11] **Kim J., Kim S., Papp M., et al.** Hydrotropic solubilization of poorly water-soluble drugs // *J. Pharm. Sci.* 2010. Vol. 99. Pp. 3955–3965.
- [12] **Bauduin P., Renoncourt A., Kopf A., et al.** Unified concept of solubilization in water by hydrotropes and co-solvents // *Langmuir*. 2005. Vol. 21. Pp. 6769–6775.
- [13] **Maheshwari R., Indurkha A.** Formulation and evaluation of aceclofenac injection made by mixed hydrotropic solubilization technique // *Iran. J. Pharm. Res.* 2010. Vol. 9. Pp. 233–242.
- [14] **Saleh A., El-Khordagui L.** Hydrotropic agents: a new definition // *Int. J. Pharm.* 1985. Vol. 24. Pp. 231–238.
- [15] **Patil A., Devtalu S., Bari M., Barhate S.**

A review on novel solubility enhancement technique hydrotropy // *Indo-American Journal of Pharm Research*. 2013. Vol. 3. Pp. 4670–4679.

[16] **Sajid M., Choudhary V.** Solubility enhancement methods with importance of hydrotropy // *J. Drug Deliv. Ther.* 2012. Vol. 2. Pp. 96–101.

[17] **Szabo K., Wang P., Peles-Lemli B., et al.** Structure of aggregate of hydrotropic p-toluene sulfonate and hydroxyacetophenone isomers // *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*. 2013. Vol. 422. Pp. 143–147.

[18] **Friberg E., Brancewicz C.** O/W microemulsions and hydrotropes: the coupling action of a hydrotrope // *Langmuir*. 1994. Vol. 10. Pp. 2945–2949.

[19] **Hatzopoulos M., Eastoe J., Peter J., et al.** Are hydrotropes distinct from surfactants? // *Langmuir*. 2011. Vol. 27. Pp. 12346–12353.

[20] **Lai K.** *Liquid detergents*, second ed. CRC Press, Boca Raton, FL, 2006.

[21] **Verma G., Aswal V., Fritz-Popovski G., et al.** Dilution induced thickening in hydrotrope-rich rod-like micelles // *J. Colloid. Interface. Sci.* 2011. Vol. 359. Pp. 163–170.

[22] **De Paula W., Denadai A., Santoro M., et al.** Supramolecular interactions between losartan and hydroxypropyl- β -CD: ESI mass-spectrometry, NMR techniques, phase solubility, isothermal titration calorimetry and anti-hypertensive studies // *Int. J. Pharm.* 2011. Vol. 404. Pp. 116–123.

[23] **Da Silva R., Spitzer M., Da Silva L., et al.** Investigations on the mechanism of aqueous solubility increase caused by some hydrotropes // *Thermochimica Acta*. 1999. Vol. 328. Pp. 161–167.

[24] **Gaikar V., Pathak P.** Selective solubilization of isomers in hydrotrope solution o-p-chlorobenzoic acids and o-p-nitro anilines // *Sep. Sci. Technol.* 1999. Vol. 34. Pp. 439–459.

[25] **Shimizu S., Matubayasi N.** Hydrotropy: monomer-micelle equilibrium and minimum hydrotrope concentration // *J. Phys. Chem. B*. 2014. Vol. 118. Pp. 10515–10524.

[26] **Badwan A., El-Khordagui L., Saleh A., Khalil S.** The solubility of benzodiazepines in sodium salicylate solution and a proposed mechanism for hydrotropic solubilization // *Int. J. Pharm.* 1983. Vol. 13. Pp. 67–74.

[27] **Ferreira G., Perigo D., Politi M., Schreier S.** Effect of anions from the Hofmeister series and urea on the binding of the charged and uncharged forms of the local anesthetic tetracaine to zwitterionic micelles // *Photochem. Photobiol.* 1996. Vol. 63. Pp. 755–761.

[28] **Coffman R., Kildsig D.** Effect of

nicotinamide and urea on the solubility of riboflavin in various solvents // *J. Pharm. Sci.* 1996. Vol. 85. Pp. 951–954.

[29] **Khanam A., Sheikh M., Khan I., Kabir-ud-Din** Aggregational behavior of alkanediyl- α - ω -bis (tetradecyl dimethyl ammonium) dibromide series with ionic and non-ionic hydrotropes at different temperatures // *J. Ind. Eng. Chem.* 2014. Vol. 20. Pp. 3453–3460.

[30] **Rub M., Azum N., Kumar D., et al.** Clouding phenomenon of amphiphilic drug promazine hydrochloride solutions: Influence of pharmaceutical excipients // *J. Ind. Eng. Chem.* 2015. Vol. 21. Pp. 1119–1126.

[31] **Lee S., Huh K., Lee J., et al.** Hydrotropic polymeric micelles for enhanced paclitaxel solubility: in vitro and in vivo characterization, *Biomacromolecules*. 8 (2007) 202–208.

[32] **Malik A., Abdullah M., Naved A., Kabir-ud-Din.** Investigation of micellar and phase separation phenomenon of phenothiazine drug promazine hydrochloride with anionic hydrotropes // *J. Ind. Eng. Chem.* 2014. Vol. 20. Pp. 2023–2034.

[33] **Schreier S., Malheiros S., de Paula E.** Surface active drugs: self-association and interaction with membranes and surfactants physicochemical and biological aspects // *Biochimica et Biophysica Acta*. 2000. Vol. 1508. Pp. 210–234.

[34] **Booth J., Abbott S., Shimizu S.** Mechanism of hydrophobic drug solubilization by small molecule hydrotropes // *J. Phys. Chem. B*. 2012. Vol. 116. Pp. 14915–14921.

[35] **Kumar S., Gandhi N.** Association model of hydrotropy for the effect of hydrotropes on solubility and mass transfer coefficient of acetylsalicylic acid // *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 2012. Vol. 4. Pp. 600–605.

[36] **Kumar V., Jayakumar C., Raja C., Gandhi N.** Hydrotropic aggregation behavior of butyl stearate // *Chemical and Materials Engineering*. 2013. Vol. 1. Pp. 1–7.

[37] **Cui Y.** Parallel stacking of caffeine with riboflavin in aqueous solutions: the potential mechanism for hydrotropic solubilization of riboflavin // *Int. J. Pharm.* 2010. Vol. 397. Pp. 36–43.

[38] **Malik A., Asiri A., Azum N., et al.** Amphiphilic antidepressant drug amitriptyline hydrochloride under the influence of ionic and non-ionic hydrotropes; micellization and phase separation // *J. Ind. Eng. Chem.* 2013. Vol. 19. Pp. 1774–1780.

[39] **Andleeb Z., Malik A., Kabir-ud-Din.** Effects of pharmaceutical excipients on cloud points of amphiphilic drugs // *J. Colloid. Interf. Sci.* 2011. Vol. 361. Pp. 42–48.



- [40] **Jain N., Patel V., Taneja L.** Hydrotropic solubilization of nifedipine // *Pharmazie*. 1988. Vol. 43. Pp. 194–196.
- [41] **Agrawal S., Pancholi S., Jain N., Agrawal G.** Hydrotropic solubilization of nimesulide for parenteral administration // *Int. J. Pharm.* 2004. Vol. 274. Pp. 149–155.
- [42] **El-Houssieny B., El-Dein E., El-Messiry H.** Enhancement of solubility of dexibuprofen applying mixed hydrotropic solubilization technique // *Drug. Discov. Ther.* 2014. Vol. 8. Pp. 178–184.
- [43] **Subramanian D., Anisimov M.** Phase behavior and mesoscale solubilization in aqueous solutions of hydrotropes // *Fluid. Phase. Equilibria*. 2014. Vol. 362. Pp. 170–176.
- [44] **Magid L., Han Z., Li Z., P. Butler P.** Evaluation of ion effects on surfactant aggregation from improved molecular thermodynamic modeling // *Langmuir*. 2000. Vol. 16. Pp. 149.
- [45] **Saleh A., Khalil S., EI-Khordagui L.** Solubility and stability of diazepam in sodium salicylate solution // *Int. J. Pharm.* 1980. Vol. 5. Pp. 161–164.
- [46] **Guo R., Compo M., Friberg S., Morris K.** The coupling action of a hydrotrope and structure transition from lamellar liquid crystal // *J. Disper. Sci. Technol.* 1996. Vol. 17. Pp. 493–507.
- [47] **Gaikar V., Pathak P.** Selective solubilization of isomers in hydrotrope solutions- o/p- chlorobenzoic acids and o-/p-nitroanilines // *Separ. Sci. Technol.* 1999. Vol. 34. Pp. 439.
- [48] **Heldt N., Zhao J., Friberg S., et al.** Controlling the size of vesicles prepared from egg lecithin using a hydrotrope // *Tetrahedron*. 2000. Vol. 56. Pp. 6985–6990.
- [49] **Guo C., Wang J., Cao F., et al.** Lyotropic liquid crystal systems in drug delivery // *Drug. Discov. Today*. 2010. Vol. 15. Pp. 1032–1040.
- [50] **Vasconcelos T., Sarmiento B., Costa P.** Solid dispersions as strategy to improve oral bioavailability of poor water soluble drugs//*Drug. Discov. Today*. 2007. Vol. 12. Pp. 1068–1075.
- [51] **Kamble R., Palve P., Mehta P.** Preparation and evaluation of amorphous olmesartan medoxomil with porous silica microparticles using spray-drying technique // *Journal of Advanced Pharmacy Education & Research*. 2014. Vol. 4. Pp. 65–71.
- [52] **Girishpai K., Divya S., Reddy M., et al.** Solubility enhancement of norfloxacin by hydrotropy technique // *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* 2014. Vol. 6. Pp. 395–397.
- [53] **Maheshwari R., Indurkha A.** Novel application of mixed hydrotropic solubilization technique in the formulation and evaluation of hydrotropic solid dispersion of aceclofenac // *Asian Journal of Pharmaceutics*. 2010. Vol. 4. Pp. 235–238.
- [54] **Jayakumar C., Morais A., Arunodhaya N., Gandhi N.** Solubility enhancement of theophylline drug using different solubilization techniques // *International Journal of Pharmaceutical and Clinical Science*. 2012. Vol. 2. Pp. 7–10.
- [55] **Gupta M., Joshi V., Amipara L., et al.** Development and evaluation of diclofenac sodium solid dispersion by mixed hydrotropic technique // *International journal of pharmaceutical research and development*. 2011. Vol. 3. Pp. 90–96.
- [56] **Madan J., Pawar K., Dua K.** Solubility enhancement studies on lurasidone hydrochloride using mixed hydrotropy // *Int. J. Pharm. Investig.* 2015. Vol. 5. Pp. 114–120.
- [57] **Margarit M., Marin M., Contreras M.** Solubility of solid dispersions of pizotifen malate and povidone // *Drug. Dev. Ind. Pharm.* 2001. Vol. 27. Pp. 517–522.
- [58] **Piao H., Kamiya N., Hirata A., et al.** A novel solid-in-oil nanosuspension for transdermal delivery of diclofenac sodium // *Pharmaceut. Res.* 2008. Vol. 25. Pp. 896–901.
- [59] **Takahashi K., Komai M., Kinoshita N.** Application of hydrotropy to transdermal formulations: hydrotropic solubilization of polyol fatty acid monoesters in water and enhancement effect on skin permeation of 5-FU // *J. Pharm. Pharmacol.* 2011. Vol. 63. Pp. 1008–1014.
- [60] **Herbig M., Evers D.** Correlation of hydrotropic solubilization by urea with log D of drug molecules and utilization of this effect for topical formulations // *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 2013. Vol. 85. Pp. 158–160.
- [61] **Nicoli S., Zani F., Bilzi S., et al.** Association of nicotinamide with parabens: effect on solubility, partition and transdermal permeation // *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 2008. Vol. 69. Pp. 613–621.
- [62] **Gulati N., Gupta H.** Parenteral drug delivery: a review // *Recent. Pat. Drug. Deliv. Formul.* 2011. Vol. 5. Pp. 133–145.
- [63] **Jain A.** Solubilization of indomethacin using hydrotropes for aqueous injection // *Eur J. Pharm. Biopharm.* 2008. Vol. 68. Pp. 701–714.
- [64] **Jain N., Patel V., Taneja L.** Formulation and evaluation of nifedipine injection // *Pharmazie*. 1988. Vol. 43. Pp. 254–255.
- [65] **Woolfson A., McCafferty D., Launchbury A.** Stabilisation of hydrotropic temazepam parenteral formulations by lyophilisation // *Int. J. Pharm.* 1986. Vol. 34. Pp. 17–22.
- [66] **Muller B., Albers E.** Effect of hydrotropic substances on the complexation of sparingly soluble drugs with cyclodextrin derivatives and the influence of cyclodextrin complexation on the pharmacokinetics of the drugs // *J. Pharm. Sci.*

1991. Vol. 80. Pp. 599–604.

[67] **Zhange X., Zhange X., Wu Z., et al.** A hydrotropic β -cyclodextrin grafted hyperbranched polyglycerol co-polymer for hydrophobic drug delivery // *Acta. Biomaterialia*. 2011. Vol. 7. Pp. 585–592.

[68] **Shete A., Yadav A., Dabke A., Sakhare S.** Formulation and evaluation of hydrotropic solubilization based suspensions of griseofulvin // *International Journal of Pharma Sciences and Research*. 2010. Vol. 1. Pp. 51–57.

[69] **Rathod M., Agarwal S.** Development and evaluation of furosemide microspheres made by mixed solvency concept // *International Journal of Pharmaceutical Erudition*. 2013. Vol. 2. Pp. 22–31.

[70] **El-Khordagui L.** Hydrotrope-gelled starch: study of some physicochemical properties // *Int. J. Pharm.* 1991. Vol. 74. Pp. 25–32.

[71] **Maheshwari R., Saxena M., Gahlot M., et al.** Novel application of hydrotropic solubilizing additives in the estimation of aspirin in tablets // *Indian. J. Pharm. Sci.* 2010. Vol. 72. Pp. 649–651.

[72] **Maheshwari R., Manchandani P., Arif D., et al.** A novel method for quantitative determination of aceclofenac in bulk drug and tablet using ibuprofen sodium as hydrotropic solubilising agents // *Journal of applied chemical research*. 2008. Vol. 5. Pp. 63–68.

[73] **Maheshwari R., Moondra S.** A novel method for quantitative determination of aceclofenac in bulk drug and tablets using sodium salicylate as hydrotropic solubilising agent // *J. Adv. Pharma. Tech. & Res.* 2010. Vol. 1. Pp. 78–82.

[74] **Maheshwari R.** Analysis of furosemide by application of hydrotropic solubilisation phenomenon // *The Indian Pharmacist*. 2005. Vol. 4. Pp. 55–58.

[75] **Jayakumar C., Morais A., Rajasekhar G., Gandhi N.** Quantitative analysis of famotidine bulk sample using sodium salicylate hydrotrope // *International Journal of Institutional Pharmacy and Life Sciences*. 2012. Vol. 2. Pp. 98–103.

[76] **Maheshwari R., Chaturvedi S., Jain N.** Novel application of hydrotropic solubilisation in the analysis of some nsoids and their solid dosage forms // *Indian. J. Pharm. Sci.* 2007. Vol. 69. Pp. 101–106.

[77] **Maheshwari R., Wanare G., Chahar N., et al.** Quantitative estimation of naproxen in tablets using ibuprofen sodium as hydrotropic agent // *Indian. J. Pharm. Sci.* 2009. Vol. 71. Pp. 335–337.

[78] **Maheshwari R., Chavada V., Varghese S., Shahoo K.** Analysis of bulk sample of salicylic acid by application of hydrotropic solubilisation method // *Indian. J. Pharm. Sci.* 2008. Vol. 70. Pp. 821–823.

[79] **Sundari N., Radhika T., Saranya V., Gandhi N.** Quantitative analysis of salbutamol bulk sample using nicotinamide hydrotrope // *International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Science Research*. 2012. Vol. 2. Pp. 16–19.

[80] **Jayakumar C., Kumar D., Nesakumar D., Gandhi N.** Quantitative analysis of theophylline bulk sample using sodium salicylate hydrotrope // *Int. J. Pharm. Sci.* 2010. Vol. 2. Pp. 80–81.

[81] **Bernard S., Mathew M., Senthilkumar K.** Spectrophotometric method of estimation of amlodipine besylate using hydrotropic solubilization // *J. Applied. Pharm. Sci.* 2011. Vol. 1. Pp. 177–180.

[82] **Jain N., Jain R., Jain A., et al.** Spectrophotometric method development and validation for quantitative estimation of amlodipine besylate in bulk drug and their dosage forms by using hydrotropic agent // *Eurasian J. Anal. Chem.* 2010. Vol. 5. Pp. 212–217.

[83] **Maheshwari R., Agrawal A., Rathore A., Agarwal M.** Eco-friendly spectrophotometric estimation of atenolol tablets using metformin hydrochloride as hydrotropic solubilizing agent // *Journal of Global Pharma Technology*. 2010. Vol. 2. Pp. 93–96.

[84] **Maheshwari R., Moondra S.** A novel method for quantitative determination of aceclofenac in bulk drug and tablets using sodium salicylate as a hydrotropic solubilising agent // *J. Adv. Pharm. Technol. Res.* 2010. Vol. 1. Pp. 78–82.

[85] **Jadhav S., Bhatia M., Thamake S., Pishawikar S.** Spectrophotometric methods for estimation of atorvastatin calcium form tablet dosage forms // *Int. J. PharmTech. Res.* 2010. Vol. 2. Pp. 1948–1953.

[86] **Chhajed M., Chhajed A., Shrivastava A., et al.** New quantitative estimation of acetazolamide bulk sample using hydrotropic solubilising agents // *World Journal of Pharmaceutical Research*. 2012. Vol. 1. Pp. 50–57.

[87] **Shukla R., Patel A., Soni M., Modi V.** Quantitative spectrophotometric estimation of Cefadroxil using hydrotropic solubilization technique // *Asian. J. Pharm.* 2008. Vol. 2. Pp. 146–147.

[88] **Maheshwari R., Mathur V., Satrawala Y., Sing R.** Eco-friendly spectrophotometric estimation of diclofenac sodium in tablets using N, N-dimethyl urea as hydrotropic solubilising agent // *International Research Journal of Pharmacy*. 2010. Vol. 1. Pp. 157–160.

[89] **Jain R., Jain N., Jain D., et al.** Novel UV spectrophotometer methods for quantitative estimation of metronidazole and furazolidone using mixed hydrotrope solubilization // *Arabian Journal of Chemistry*. doi:10.1016/j.arabjc. 2013.09.003.



- [90] **Jain N., Jain R., Jain D., et al.** Novel UV spectrophotometric method for quantitative estimation of furazolidone using mixed hydrotropic agent // *Pak. J. Pharm. Sci.* 2013. Vol. 26. Pp. 159–162.
- [91] **Maheshwari R., Shukla R.** Novel method for spectrophotometric analysis of hydrochlorothiazide tablets using niacinamide as hydrotropic solubilising agent // *Asian. J. Pharm.* 2008. Vol. 2. Pp. 68–69.
- [92] **Maheshwari R., Rathore A., Agrawal A., Gupta M.** Spectrophotometric estimation of indomethacin capsules with niacinamide as hydrotropic solubilising agent // *Pharm. Methods.* 2011. Vol. 2. Pp. 184–188.
- [93] **Pandey S., Maheshwari R.** A novel spectrophotometric method for the estimation of ketoprofen in tablet dosage form using hydrotropic solubilisation phenomenon // *World. Appl. Sci. J.* 2010. Vol. 11. Pp. 1524–1527.
- [94] **Patil D.** Spectroscopic determination of lovastatin by hydrotropic solubilization technique // *International Journal of Pharmaceutical and Chemical Sciences.* 2012. Vol. 1. Pp. 1142–1144.
- [95] **Sable P., Chaulang G., Bhosale A.** Novel spectrophotometric estimation of izetemib, losartan and simvastatin using hydrotropic solubilising agents // *Int. J. Chemtech. Res.* 2009. Vol. 1. Pp. 1393–1397.
- [96] **Maheshwari R., Chaturvedi S., Jain N.** Novel spectrophotometric estimation of some poorly soluble drugs using hydrotropic solubilising agents // *Ind. J. Pharma. Sci.* 2006. Vol. 68. Pp. 195–198.
- [97] **Maheshwari R., Indurkha A., Jawade S., Jagwani S.** Spectrophotometric estimation of naproxen tablets employing sodium benzoate as hydrotropic additive // *The Indian Pharmacist.* 2009. Vol. 8. Pp. 75–77.
- [98] **Maheshwari R., Wanare G., Chahar N., et al.** Quantitative estimation of naproxen in tablets using ibuprofen sodium as hydrotropic agent // *Indian. J. Pharm. Sci.* 2009. Vol. 71. Pp. 335–337.
- [99] **Maheshwari R., Bishnoi S., Kumar D., Krishnan M.** Quantitative spectrophotometric determination of ornidazole tablet formulations using ibuprofen sodium as hydrotropic solubilizing agent // *Dig. J. Nanomater. Bios.* 2010. Vol. 5. Pp. 97–100.
- [100] **Maheshwari R., Srivastav V., Prajapat R., et al.** New spectrophotometric estimation of ornidazole tablets employing urea as a hydrotropic solubilizing additive // *Indian. J. Pharm. Sci.* 2010. Vol. 72. Pp. 258–261.
- [101] **Sherje A., Desai R.** Spectrophotometric determination of poorly water soluble drug rosiglitazone using hydrotropic solubilization technique, *Indian // J. Pharm. Sci.* 2011. Vol. 73. Pp. 579–582.
- [102] **Chavhan V., Naghbhidkar N., Shukla M., Singh V.** UV spectrophotometric method development and validation for estimation of simvastatin in bulk and tablet dosage form using mixed hydrotropy solubilisation technique // *An International Journal of Advances in Pharmaceutical Sciences.* 2014. Vol. 5. Pp. 1740–1750.
- [103] **Maheshwari R., Rajput M., Sinha S.** Eco-friendly spectrophotometric estimation of tinidazole in tablets using lignocaine HCL as a hydrotropic solubilising agent // *Asian Journal of Pharmaceutics.* 2009. Vol. 3. Pp. 319–321.
- [104] **Sharma M., Sharma S., Sharma A.** Hydrotropic solubilization phenomenon spectrophotometric estimation of tenfovir disoproxil fumarate tablet // *J. Chemical. Pharm. Res.* 2010. Vol. 2. Pp. 411–415.
- [105] **Gaikar V., Sharma M.** Separations with hydrotropes // *Sep. Technol.* 1993. Vol. 3. Pp. 2–11.
- [106] **Gaikar V.G., Sharma M.M.** Note: extractive separations with hydrotropes // *Solvent. Extr. Ion. Exc.* 1986. Vol. 4. Pp. 839–846.
- [107] **Perry R.** *Perry's Chemical Engineers Handbook.* 7th ed. New York: McGraw-Hill, 1997.
- [108] **Bhat M., Gaikar V.** Characterization of interaction between butyl benzene sulfonates and cetyl trimethyl ammonium bromide in a mixed aggregate systems // *Langmuir.* 1999. Vol. 5. Pp. 4740–4751.
- [109] **Agarwal M., Gaikar W.** Extractive separations using hydrotropes // *Sep. Technol.* 1992. Vol. 2. Pp. 79–84.
- [110] **Kanan K., Al-Jabari M., Kayali I.** Phase behavioral changes in SDS association structures induced by cationic hydrotropes // *Arabian Journal of Chemistry.* <http://dx.doi.org/10.1016/j.arabjc.2012.08.003>
- [111] **Dandekar D., Jayaprakasha G., Patil B.** Hydrotropic extraction of bioactive limonin from sour orange (*Citrus aurantium* L.) seeds // *Food. Chem.* 2008. Vol. 109. Pp. 515–520.
- [112] **Dandekar D., Gaikar V.** Hydrotropic extraction of curcuminoids from turmeric // *Separ. Sci. Technol.* 2003. Vol. 38. Pp. 1185–1215.
- [113] **Sharma R., Gaikar V.** Hydrotropic extraction of reserpine from rauwolfia vomitoria roots // *Separ. Sci. Technol.* 2012. Vol. 47. Pp. 827–833.
- [114] **Padalkar K., Gaikar V.** Extraction of piperine from piper nigrum (black pepper) by aqueous solutions of surfactant and surfactant + hydro-tropes mixtures // *Separ. Sci. Technol.* 2008. Vol. 43. Pp. 3097–3118.
- [115] **Ansari K., Gaikar V.** Green hydrotropic extraction technology for delignification of sugar-

cane bagasse by using alky benzene sulfonates as hydrotropes // Chem. Eng. Sci. 2014. Vol. 115. Pp. 1157–1166.

[116] **Tavare N., Jadhav V.** Separation through crystallization and hydrotropy: the 6-aminopenicillanic acid (6-APA) and phenoxyacetic acid (PAA) system // J. Cryst. Growth. 1999. Vol. 198–199. Pp. 1320–1325.

[117] **Mou H., Heikkila E., Fardim P.** Topochemistry of alkaline, alkaline-peroxide and hydrotropic pre-treatments of common reed to enhance enzymatic hydrolysis efficiency // Bioresource. Technology. 2013. Vol. 150. Pp. 36–41.

[118] **Mou H., Heikkila E., Fardim P.** Topochemistry of environmentally friendly pre-treatments to enhance enzymatic hydrolysis of sugar cane bagasse to fermentable sugar // J. Agric. Food. Chem. 2014. Vol. 62. Pp. 3619–3625.

[119] **Mou H., Orblin E., Kruus K., Fardim P.** Topochemical pre-treatment of wood biomass to enhance enzymatic hydrolysis of polysaccharides to sugars // Bioresour. Technol. 2013. Vol. 142. Pp. 540–545.

[120] **Devendra L., Gaikar V.** Is sodium cinna-

mate a photo switchable hydrotrope // J. Mol. Liq. 2012. Vol. 165. Pp. 71–77.

[121] **Simamora P., Alvarez J., Yalkowsky S.** Solubilization of rapamycin // Int. J. Pharm. 2001. Vol. 213. Pp. 25–29.

[122] **Kamble S., Kumbhar A., Jadhav S., Sallunkhe R.** Microwave assisted attractive and rapid process for synthesis of octahydroquinazolinone in aqueous hydrotropic solutions // Procedia Materials Science. 2014. Vol. 6. Pp. 1850–1856.

[123] **Kamble S., Kumbhar A., Rashinkar G., et al.** Ultrasound promoted efficient and green synthesis of b-amino carbonyl compounds in aqueous hydrotropic medium // Ultrasonics. Sonochemistry. 2012. Vol. 19. Pp. 812–815.

[124] **Khadilkar B., Gaikar V., Chitnavis A.** Aqueous hydrotrope solution as a safer medium for microwave enhanced hantzsch dihydropyridine ester synthesis // Tetrahedron Letters. 1995. Vol. 30. Pp. 8083–8086.

[125] **Kamble S., Kumbhar A., Jadhav S., Sallunkhe R.** Aza-Michael reaction in glycerol as a sustainable hydrotropic medium // Materials Today: Proceedings. 2015. Vol. 2. Pp. 1792–1798.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДХАПТЕ Вивидха Вишвас – Ph.D., доцент кафедры фармакологии Фармацевтического колледжа г. Пуны при Университете Бхарати, г. Пуна, Индия.
Erandwane, Kothrude, Pune 411038, Maharashtra, India
vividhapte@gmail.com

МЕХТА Пьюш Прадип – мастер фармацевтики, кафедра обеспечения качества Фармацевтического колледжа г. Пуны при Университете Бхарати, г. Пуна, Индия.
Erandwane, Kothrude, Pune 411038, Maharashtra, India
piyu053@mail.com

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА КРИТЕРИЯ МАРКИРОВКИ НА РАБОТУ АДАПТИВНОГО АЛГОРИТМА С АПОСТЕРИОРНЫМ КОНТРОЛЕМ ТОЧНОСТИ

Исследуется влияние выбора критерия маркировки элементов на результат работы адаптивных алгоритмов с апостериорным контролем точности на основе функциональной мажоранты погрешности для плоских задач линейной теории упругости. Реализована мажоранта без ограничения симметрии на свободный тензор, для вычисления которой применяются аппроксимации Равьяра–Тома нулевого порядка. Рассмотрены четыре наиболее широко используемых критерия отбора элементов для их последующего разбиения. Представлены численные результаты для задач плоской деформации, в том числе с различными материалами и геометрией. Проведен подробный анализ результатов.

ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ АПОСТЕРИОРНАЯ ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ, ЛИНЕЙНАЯ УПРУГОСТЬ, АДАПТИВНЫЙ АЛГОРИТМ, АППРОКСИМАЦИЯ РАВЬЯРА–ТОМА.

Введение

В статье рассматриваются функциональные апостериорные оценки погрешности для двумерных задач линейной теории упругости. Впервые такие оценки были численно исследованы в работе [1]. В основе их вывода изначально лежали соотношения теории двойственности вариационного исчисления; такой метод был предложен в статье [2]. Позднее в монографии [3] те же оценки были получены с помощью преобразования интегральных тождеств. В статье [1] также были рассмотрены частные случаи оценки для ряда двумерных задач: плоской деформации, плоского напряженного состояния и осесимметричной.

В литературе имеются два типа функциональных мажорант погрешности для указанных задач: с явным и неявным учетом симметрии входящего в оценку свободного тензора. Оценка второго типа позволяет использовать специальные конечные

элементы, разработанные для смешанных методов. Такой подход был впервые предложен и реализован в работе [4].

Численные исследования функционального подхода для плоских задач линейной теории упругости проводились несколькими авторами. В работе [1], например, приводятся два примера решения задач плоской деформации с адаптацией расчетной сетки в областях сложной формы; при этом используется «симметричная» оценка и, соответственно, непрерывная кусочно-линейная аппроксимация метода конечных элементов. Результаты показали рост индекса эффективности оценки (отношение мажоранты погрешности к оцениваемой норме, оптимальное значение индекса – единица). Как было показано в работе [4], для четырехугольных конечноэлементных сеток переоценка погрешности возрастает: для некоторых задач индекс эффективности примерно на порядок превышает оптимальное значение на сетке, содержащей

всего несколько тысяч узлов. В работах [4, 5] для вычисления функциональных мажорант на вложенных четырехугольных сетках без адаптации применялись аппроксимация Равьяра–Тома нулевого порядка и аппроксимация Арнольда – Боффи – Фалка с двумя дополнительными степенями свободы на каждом элементе. Помимо этого, в работе [6] были исследованы основные теоретические свойства и аспекты практической реализации для обоих типов функциональных апостериорных оценок, а также приведены численные результаты работы адаптивных алгоритмов решения задач плоской деформации. Сформулированы и доказаны теоремы о вычислительных свойствах оценок и соответствующих индикаторов погрешности.

Целью данного исследования является проведение сравнительного анализа различных методов отбора элементов для разбиения (маркировка элементов) и их влияния на результат работы алгоритма адаптации расчетной сетки (адаптивного алгоритма). Тем самым данное исследование продолжает работу [6] и берет за основу некоторые идеи монографии [7].

Постановка задачи

Плоская задача линейной теории упругости в области $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ с границей Γ , непрерывной по Липшицу и состоящей из двух непересекающихся частей Γ_1 и Γ_2 , имеет вид

$$\begin{cases} \sigma = L\varepsilon(u) & \text{в } \Omega, \\ \text{Div}\sigma + f = 0 & \text{в } \Omega, \\ u = u_0 & \text{на } \Gamma_1, \\ \sigma n = F & \text{на } \Gamma_2, \end{cases} \quad (1)$$

где Div – тензорная дивергенция.

Неизвестным является векторное поле перемещений $u(x_1, x_2)$, через которое выражаются тензор деформаций

$$\varepsilon(u) = \frac{1}{2}(\nabla u + (\nabla u)^T)$$

и тензор напряжений σ .

Вектор объемных сил

$$f \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^2) = L_2(\Omega) \times L_2(\Omega),$$

нормальные напряжения $F \in L_2(\Gamma_2, \mathbb{R}^2)$ на

части границы Γ_2 , а также перемещения $u_0 \in W_2^1(\Omega, \mathbb{R}^2)$ на Γ_1 заданы. Пространство Лебега L_2 – это пространство функций, суммируемых с квадратом. Пространство Соболева W_2^1 – пространство функций из L_2 , первые обобщенные производные которых также принадлежат L_2 . Вектор n – единичная нормаль к Γ_2 , L – тензор упругих констант. Предполагается, что для коэффициентов тензора L существуют положительные константы λ_1 и λ_2 , такие что

$$\lambda_1^2 |\varepsilon|^2 \leq L\varepsilon : \varepsilon \leq \lambda_2^2 |\varepsilon|^2 \quad (2)$$

для любого тензора $\varepsilon \in M_{sym}^{2 \times 2}$, где $M_{sym}^{2 \times 2}$ – пространство симметричных тензоров второго ранга размерности два. Также предполагается, что выполнено условие симметрии

$$L_{ijkm} = L_{jikm} = L_{kmij}, \quad L_{ijkm} \in L_\infty(\Omega), \\ i, j, k, m = 1, 2,$$

где пространство Лебега $L_\infty(\Omega)$ состоит из функций, ограниченных почти всюду в Ω .

Решение задачи (1) ищется в обобщенном смысле:

Найти функцию u из $V = u_0 + V_0$, где $V_0 = \{w \in W_2^1(\Omega, \mathbb{R}^2) \mid w = 0 \text{ на } \Gamma_1\}$, удовлетворяющую интегральному соотношению

$$\int_\Omega L\varepsilon(u) : \varepsilon(w) d\Omega = \int_\Omega f \cdot w d\Omega + \int_{\Gamma_2} F \cdot w d\Gamma \quad (3)$$

для любого $w \in V_0$.

Пусть $v \in V$ – некоторое приближенное решение задачи (3). Для контроля точности решения v необходимо иметь верхнюю оценку энергетической нормы

$$\| \| u - v \| \| := \left(\int_\Omega L\varepsilon(u - v) : \varepsilon(u - v) d\Omega \right)^{1/2}.$$

Для задачи (1) в работе [1] была получена функциональная мажоранта погрешности:

$$\| \| u - v \| \| \leq C(\| \text{Div}\tau + f \|_\Omega^2 + \| \tau n - F \|_{\Gamma_2}^2)^{1/2} + \\ + \| \| \tau_{sm} - L\varepsilon(v) \| \|_* + \frac{C_{\Omega\Gamma_1}}{\lambda_1} \| \| \tau_{sk} \|_\Omega, \quad (4)$$

где $\| \dots \|_\Omega$ и $\| \dots \|_{\Gamma_2}$ – нормы в L_2 ; τ – произвольный тензор из Гильбертова пространства

$$H = \left\{ \begin{array}{l} \tau \in L_2(\Omega, M^{2 \times 2}) \mid \\ \text{Div} \tau \in L_2(\Omega, R^2), \\ \tau n \in L_2(\Gamma_2, R^2) \end{array} \right\};$$

τ_{sm}, τ_{sk} – симметричная и кососимметричная части тензора τ , соответственно; $C_{\Omega \Gamma_1}$ – константа из неравенства Корна, которую можно оценить численно.

Вспомогательная норма в мажоранте вычисляется по формуле

$$\|\tau\|_* = \left(\int_{\Omega} L^{-1} \tau : \tau dx \right)^{1/2}.$$

Константа C должна удовлетворять неравенству

$$\int_{\Omega} |w|^2 d\Omega + \int_{\Gamma_2} |w|^2 d\Gamma \leq C^2 \|\tau\|_*^2$$

для любого $w \in V_0$.

Применив дважды к мажоранте (4) неравенство Коши с параметром, можно получить более удобную для вычислений квадратичную структуру мажоранты:

$$\begin{aligned} \|\tau - v\|_*^2 &\leq M^2(v, \tau, \beta_1, \beta_2) := \\ &:= (1 + \beta_1) \|\tau_{sm} - L\varepsilon(v)\|_*^2 + \\ &+ \left(1 + \frac{1}{\beta_1}\right) (1 + \beta_2) C^2 \|\text{Div} \tau + f\|_{\Omega}^2 + \\ &+ \left(1 + \frac{1}{\beta_1}\right) (1 + \beta_2) C^2 \|\tau n - F\|_{\Gamma_2}^2 + \\ &+ \left(1 + \frac{1}{\beta_1}\right) \left(1 + \frac{1}{\beta_2}\right) \left(\frac{C_{\Omega \Gamma_1}}{\lambda_1}\right)^2 \|\tau_{sk}\|_{\Omega}^2, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\beta_1 > 0, \beta_2 > 0$ – произвольные параметры.

Формулы для оптимальных значений β_1 и β_2 при фиксированном τ и константы C приведены в работе [6].

Важно отметить, что мажоранта в неравенстве (5) является точной, так как при подстановке в нее $\tau = \sigma$ и $\beta_1 = 0$ достигается равенство правой и левой части.

В данной работе функциональная мажоранта (5) реализована в предположении об изотропной линейной упругости: тензор упругих констант L зависит от двух параметров материала – модуля Юнга E и

коэффициента Пуассона ν .

Для того чтобы вычислить мажоранту $M(v, \tau, \beta_1, \beta_2)$, необходимо выбрать тип аппроксимации для тензорного поля τ . Используя положительный опыт исследований [4–6], применим аппроксимацию Равьяра – Тома нулевого порядка. В качестве индикатора погрешности для приближенного решения $v = u_h$, полученного на конечноэлементной сетке с характерным размером h , используется первое слагаемое мажоранты на каждом элементе сетки T :

$$\eta_T = \left(\int_T (L^{-1} \tau - \varepsilon(u_h)) : (\tau - L\varepsilon(u_h)) dT \right)^{1/2}.$$

Далее индикатор, основанный на мажоранте, будем обозначать как η_T^{RT} , поскольку при его вычислении используется аппроксимация Равьяра – Тома.

Для оценки качества адаптивных сеток используется «эталонный» индикатор

$$\eta_T^{ref} = \left(\int_T L\varepsilon(u_{ref} - u_h) : \varepsilon(u_{ref} - u_h) dT \right)^{1/2},$$

где u_{ref} – «эталонное» решение (reference solution). В данном качестве выбиралось приближенное решение, полученное на сетке с характерным размером $h/4$; сетка была получена из исходной равномерным разбиением элементов.

С помощью эталонного решения также вычисляется относительная погрешность

$$e = \frac{\|u_h - u_{ref}\|}{\|u_{ref}\|} \cdot 100\%$$

и индекс эффективности мажоранты

$$I_{eff} = \frac{M(u_h, \tau, \beta_1, \beta_2)}{\|u_h - u_{ref}\|},$$

которые используются для контроля качества оценок, получаемых в ходе исследования.

Способы маркировки элементов

При адаптации расчетной сетки необходимо выбрать критерий отбора элементов для разбиения на каждом шаге алгоритма (см., например, монографию [8] и книгу

[9]). С математической точки зрения его можно представить в виде оператора $m(\eta_T)$, переводящего массив значений индикатора погрешности в массив нулей и единиц (0 – элемент не разбивается, 1 – элемент разбивается). Будем называть такой оператор маркером. Использование различных маркеров приводит к различным последовательностям сеток, поэтому итоговые адаптивные сетки могут существенно отличаться. Для сравнительного анализа было выбрано четыре наиболее широко используемых маркера.

1. Маркер $m_1(\eta_T)$ по максимальному значению: разбиваются все элементы, для которых

$$\eta_T > \alpha \max_{i=1..N_i}(\eta_{T_i}),$$

где N_i – число элементов сетки; $\alpha \in (0;1)$ – константа, обычно полагаемая равной 0,5.

2. Маркер $m_2(\eta_T)$ по среднему значению: разбиваются все элементы, для которых

$$\eta_T > \left(\sum_{i=1}^{N_i} \eta_{T_i} \right) / N_i.$$

3. Маркер $m_3(\eta_T)$ дает разбиение заданного количества элементов с наибольшей ошибкой, для чего необходима сортировка элементов по убыванию значения индикатора.

4. Маркер $m_4(\eta_T)$, или «массовый критерий» (bulk criterion): разбиваются первые

k элементов с наибольшей ошибкой, для которых

$$\sum_{i=1}^k \eta_{T_i} \geq \alpha \sum_{i=1}^{N_i} \eta_{T_i} > \sum_{i=1}^{k-1} \eta_{T_i},$$

где $\alpha \in (0;1)$ – некоторая константа. Для этого маркера также необходима сортировка элементов по убыванию значения индикатора.

Для сравнения различных маркеров в монографии [7] было предложено вычислять «точность маркера»:

$$\mu = \left(1 - \frac{\|m(\eta_T) - m(\eta_T^{ref})\|_1}{N_i} \right) \cdot 100 \%,$$

где $\|x\|_1 = \sum_i |x_i|$ – первая норма вектора.

Величина μ позволяет оценить, насколько близко друг к другу количество и расположение отобранных с заданным маркером элементов при использовании индикатора η_T и эталонного индикатора η_T^{ref} .

Примеры работы адаптивных алгоритмов

Рассмотрим несколько примеров, демонстрирующих работу адаптивных алгоритмов с различными маркерами для решения задач плоской деформации, и проанализируем, насколько функциональный подход устойчив к смене критерия маркировки. Во всех случаях адаптация начинается с равномерной сетки с относительно небольшим количеством узлов и заканчивается при до-

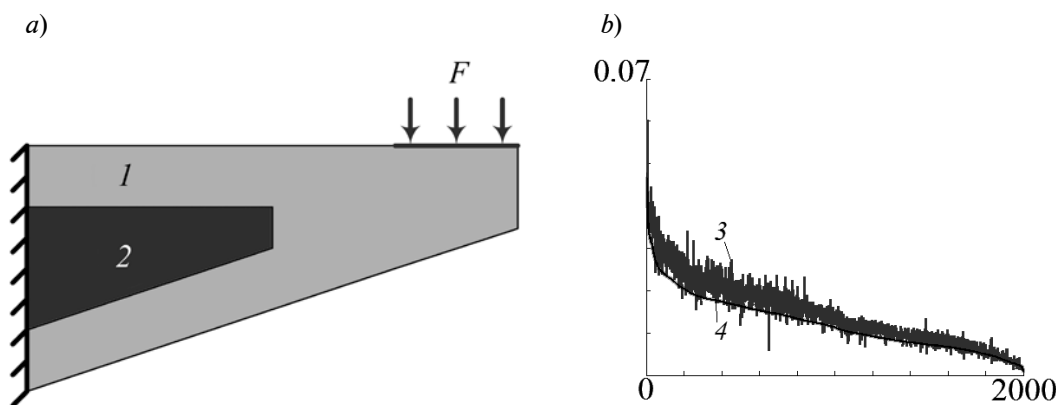


Рис. 1. Нагруженная конструкция (расчетная область) с различными параметрами материала (а) и соответствующий график значений индикаторов погрешности η^{RT} (3) и η^{ref} (4) в зависимости от номера элемента (b). Материалы: бетон (1) и сталь (2).

Иллюстрируется пример 1



стижении заданного уровня относительной погрешности ϵ , равного 3 – 4 %.

Пример 1. Рассмотрим некоторую конструкцию, расчетная область для которой представлена на рис. 1, *a*; она состоит из двух частей с различными параметрами

материала:

бетон	$E = 30$ ГПа,	$\nu = 0,2$;
сталь.....	$E = 210$ ГПа,	$\nu = 0,3$.

Конструкция закреплена по левому краю, на часть верхней границы приложена

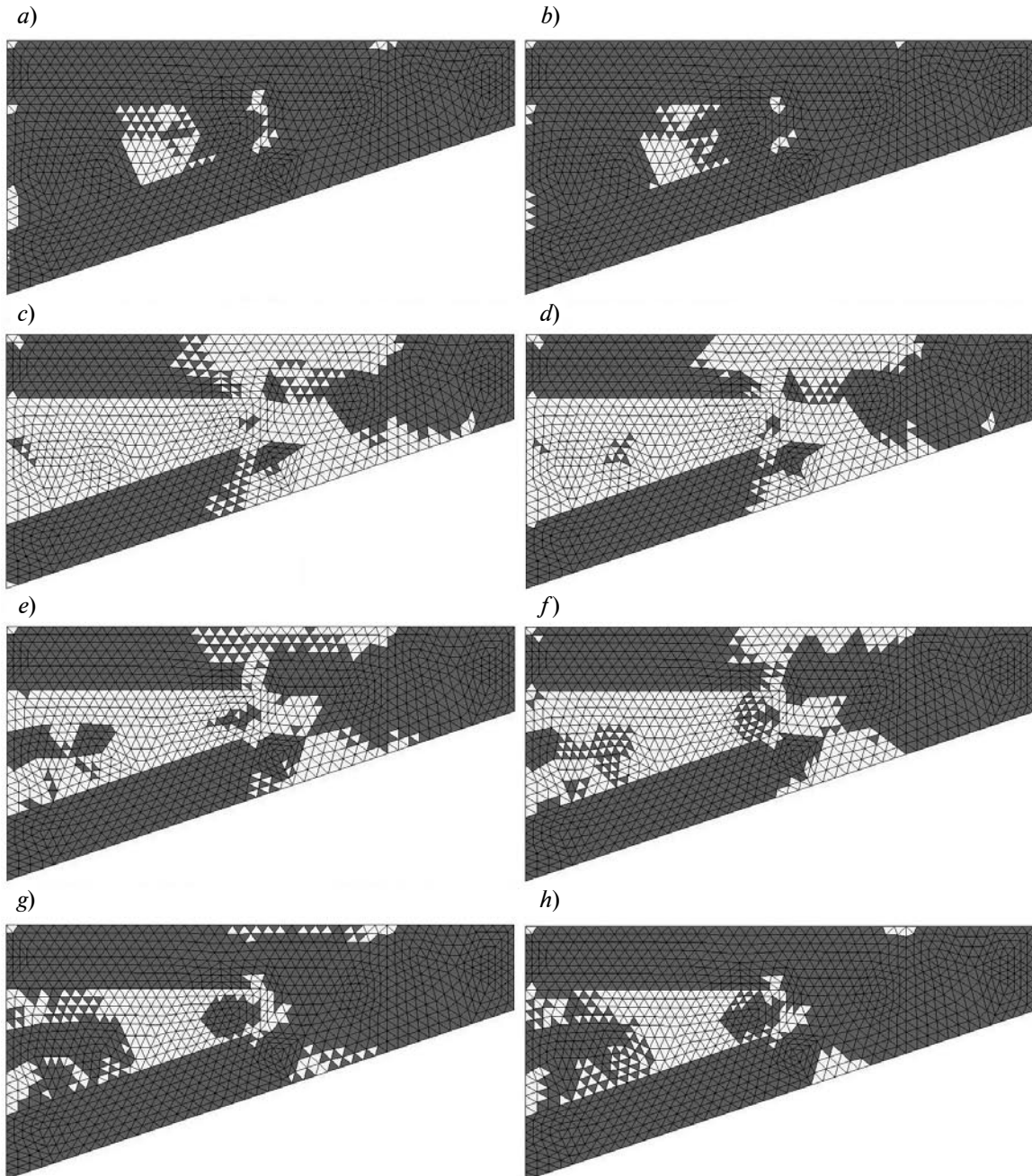


Рис. 2. Элементы области (см. рис. 1, *a*), отобранные для разбиения (обозначены светлым) с помощью различных маркеров: $m_1(\eta_T^{ref})$ (*a*), $m_1(\eta_T^{RT})$ (*b*); $m_2(\eta_T^{ref})$ (*c*), $m_2(\eta_T^{RT})$ (*d*); $m_3(\eta_T^{ref})$ (*e*), $m_3(\eta_T^{RT})$ (*f*); $m_4(\eta_T^{ref})$ (*g*), $m_4(\eta_T^{RT})$ (*h*).
Иллюстрируется пример 1

распределенная нагрузка $F = 10^8 \text{ Н/м}^2$.

На рис. 1, *b* представлен график распределения значений индикаторов погрешности η^{ref} и η^{RT} на равномерной сетке, состоящей из 2000 элементов. Номера элементов по оси абсцисс отсортированы по убыванию величины эталонного индикатора. График демонстрирует, что индикатор, основанный на мажоранте, воспроизводит основные особенности распределения ошибки в области.

На рис. 2 представлена равномерная сетка с элементами, отобранными для разбиения с помощью четырех описанных ранее маркеров, вычисленных по индикатору η^{RT} . Для оценки правильности отбора элементов приводятся аналогичные графики, построенные для эталонного индикатора. Для маркера m_3 здесь и далее используется разбиение 30 % элементов с максимальной ошибкой; для маркера m_4 было выбрано значение параметра $\alpha = 0,3$.

Точность маркеров на равномерной

сетке приведена во втором столбце таблицы. На рис. 3 представлены узлы адаптивных сеток, получившихся на финальном шаге работы алгоритмов (адаптация начиналась с равномерной сетки с 282 узлами). Для сравнения качества сеток была построена «эталонная сетка» с помощью индикатора η^{ref} . На каждом шаге алгоритма адаптации разбивалось 25 элементов с наибольшей ошибкой. Для достижения желаемой погрешности $e \leq 3 \%$ на эталонной сетке понадобилось 105 шагов адаптации. Данная процедура была использована исключительно для вычислительного эксперимента, поскольку в реальных расчетах она слишком трудозатратна.

Количество узлов сетки N_n , относительная погрешность e и индекс эффективности мажоранты I_{eff} для каждого маркера на финальных адаптивных сетках представлены в таблице, где за N_s обозначено число шагов адаптивного алгоритма, критерий остановки $e \leq 3 \%$.

Таблица

Результаты работы адаптивных алгоритмов

Маркер	$\mu, \%$	N_s	N_n	$e, \%$	I_{eff}
<i>Пример 1 (эталонная сетка содержит 10334 узла, $e = 3,00 \%$)</i>					
m_1	97,85	8	12204	2,83	1,43
m_2	97,70	6	30007	1,89	1,43
m_3	92,80	6	12277	2,86	1,43
m_4	93,40	9	16880	2,47	1,43
<i>Пример 2 (эталонная сетка содержит 6039 узлов, $e = 3,00 \%$)</i>					
m_1	99,79	9	10670	2,83	1,37
m_2	77,50	5	22205	1,02	1,41
m_3	88,75	5	12420	2,76	1,37
m_4	86,25	8	13701	2,47	1,40
<i>Пример 3 (эталонная сетка содержит 10430 узлов, $e = 3,99 \%$)</i>					
m_1	99,57	15	14499	3,54	1,65
m_2	91,28	6	41566	3,95	1,95
m_3	79,65	6	36096	4,00	1,94
m_4	79,65	8	15493	3,77	1,76

Обозначения: μ – точность маркера; N_s – число шагов адаптивного алгоритма; N_n – количество узлов сетки; e – относительная погрешность; I_{eff} – индекс эффективности мажоранты

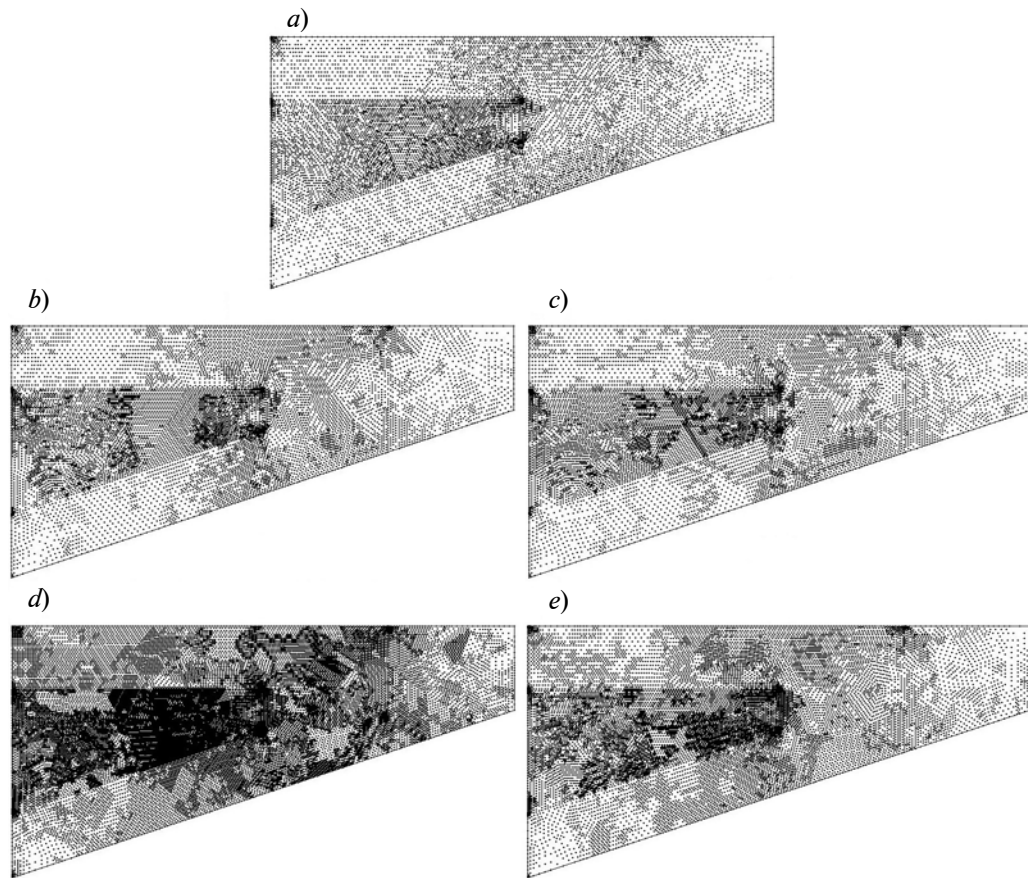


Рис. 3. Финальные конечноэлементные сетки, полученные при помощи маркеров m_1 (b), m_2 (d), m_3 (c), m_4 (e), а также эталонная сетка (a).
Иллюстрируется пример 1

Отметим, что индекс эффективности вычисляемой мажоранты практически не зависит от способа маркировки элементов, т. е. точность глобальной оценки остается неизменной. Также из таблицы видно, что маркер m_2 приводит к избыточному разбиению сетки: для него в три раза больше узлов, чем в эталонной сетке. Наибольшее количество шагов алгоритма для данного примера получается при использовании маркера m_4 .

Пример 2. Рассмотрим другую конструкцию, расчетная область для которой приведена на рис. 4, a; она состоит из трех частей, закреплена по левому краю, на правый край приложена распределенная нагрузка $F = 10^7$ Н/м². На рис. 4, c-f представлены узлы адаптивных сеток на финальном шаге работы алгоритмов, полученных с различными маркерами. Узлы эталонной сетки

изображены на рис. 4, b. Точность маркеров на равномерной сетке с 1344 элементами приведена во втором столбце таблицы. На рис. 5 представлена равномерная сетка с элементами, отобранными для разбиения с помощью маркеров, вычисленных по индикаторам η^{RT} и η^{ref} .

Количество узлов, относительная погрешность и индекс эффективности мажоранты для каждого маркера на финальных адаптивных сетках представлены в таблице в соответствующих графах. Критерий остановки адаптивного алгоритма — $e \leq 3\%$. Как и в предыдущем примере, маркер m_2 приводит к избыточному разбиению сетки. Наибольшее количество шагов алгоритма для данного примера возникает при использовании маркера m_1 , но полученная сетка по количеству узлов наиболее близка к эталонной.

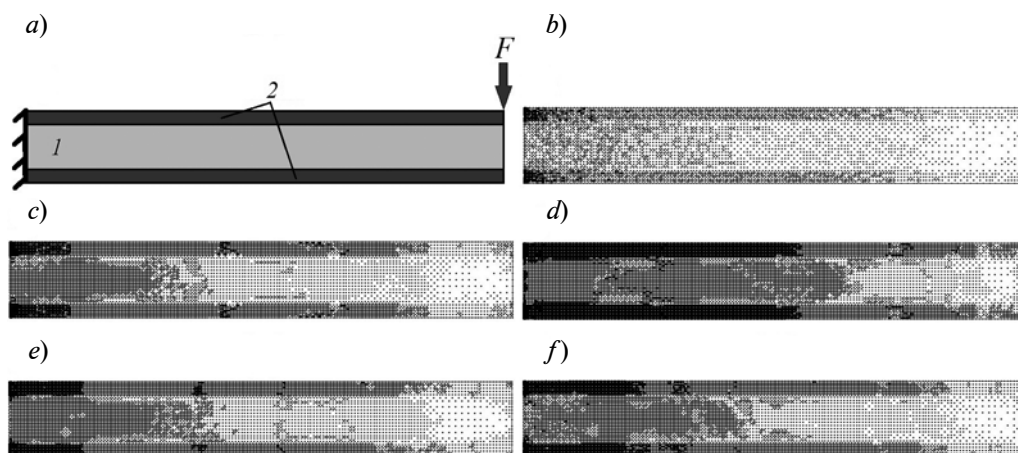


Рис. 4. Нагруженная конструкция (расчетная область) с различными параметрами материала (а) и финальные конечноэлементные сетки, полученные при помощи маркеров m_1 (с), m_2 (d), m_3 (e), m_4 (f), а также эталонная сетка (b). Материалы: бетон (1) и сталь (2).
Иллюстрируется пример 2

Пример 3. Рассмотрим закрепленную бетонную конструкцию с отверстиями. Соответствующая область представлена на рис. 6, а. Тело полностью состоит из бетона, имеются два квадратных отверстия, по границе которых и в середине нижней стороны оно закреплено. Сверху приложена распределенная нагрузка $F = 10^8 \text{ Н/м}^2$. На рис. 6 также приведены узлы эталонной сетки и сеток, получившихся в результате адаптации с различными маркерами. На

рис. 7 представлены элементы, отобранные для разбиения на равномерной сетке с помощью маркеров, рассчитанных по индикаторам η^{RT} и η^{ref} . В таблице приводится точность маркеров на равномерной сетке и данные для адаптивных сеток, узлы которых приведены на рис. 6. Критерий останковки адаптивного алгоритма $e \leq 4 \%$.

Из рис. 6, 7 и таблицы видно, что второй и третий маркер приводят к сеткам с значительно большим количеством узлов

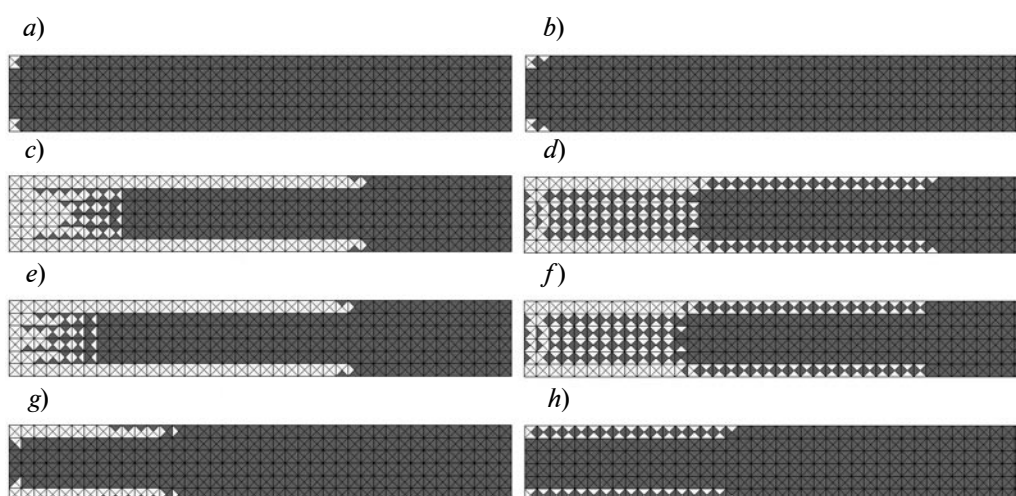


Рис. 5. Элементы области (см. рис. 4, а), отобранные для разбиения (обозначены светлым) с помощью различных маркеров: $m_1(\eta_T^{\text{ref}})$ (a), $m_1(\eta_T^{\text{RT}})$ (b); $m_2(\eta_T^{\text{ref}})$ (c), $m_2(\eta_T^{\text{RT}})$ (d); $m_3(\eta_T^{\text{ref}})$ (e), $m_3(\eta_T^{\text{RT}})$ (f); $m_4(\eta_T^{\text{ref}})$ (g), $m_4(\eta_T^{\text{RT}})$ (h).
Иллюстрируется пример 2

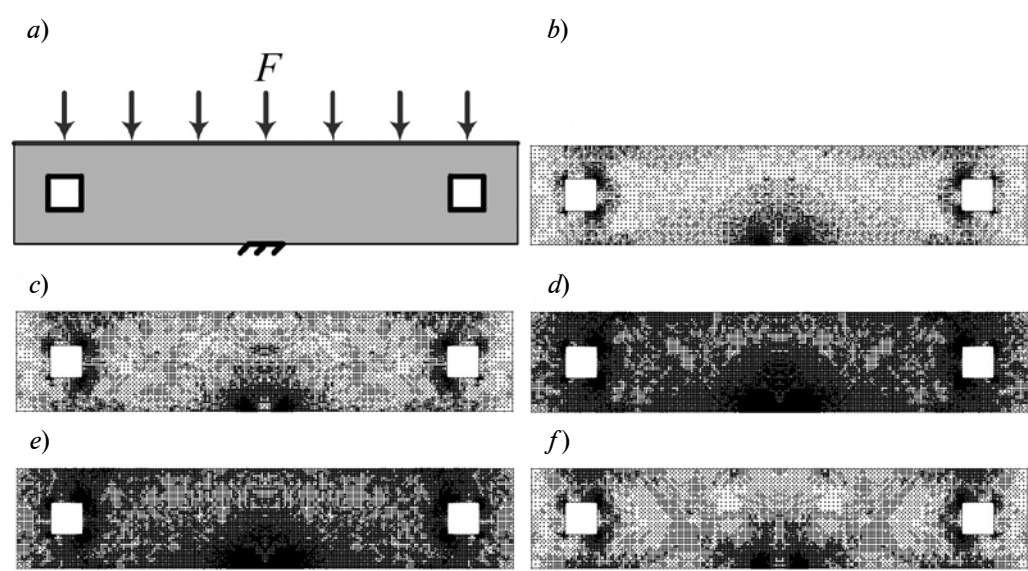


Рис. 6. Нагруженная конструкция (расчетная область) из бетона с отверстиями (a) и финальные конечноэлементные сетки, полученные при помощи маркеров m_1 (c), m_2 (d), m_3 (e), m_4 (f), а также эталонная сетка (b).
Иллюстрируется пример 3

при том же уровне относительной погрешности, по сравнению с маркерами m_1 и m_4 , однако характерные зоны сгущения узлов сетки совпадают для всех маркеров. Как и в предыдущих примерах, с помощью маркера m_1 на каждом шаге выбирается небольшое количество элементов, из-за чего

количество шагов адаптации увеличивается (см. третий столбец таблицы, Пример 3).

Заключение

В ходе исследования было рассмотрено четыре наиболее широко используемых критерия маркировки элементов, которые

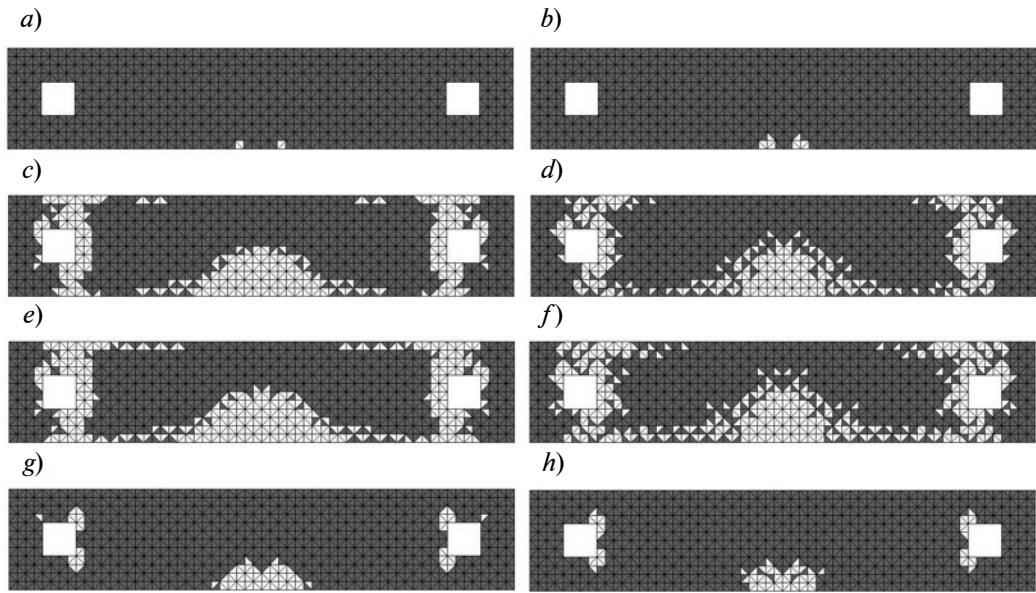


Рис. 7. Элементы области (см. рис. 6, a), отобранные для разбиения (обозначены светлым) с помощью различных маркеров: $m_1(\eta_T^{ref})$ (a), $m_1(\eta_T^{RT})$ (b); $m_2(\eta_T^{ref})$ (c), $m_2(\eta_T^{RT})$ (d); $m_3(\eta_T^{ref})$ (e), $m_3(\eta_T^{RT})$ (f); $m_4(\eta_T^{ref})$ (g), $m_4(\eta_T^{RT})$ (h).
Иллюстрируется пример 3

применялись в адаптивных алгоритмах решения задач плоской деформации, в том числе с различными материалами и геометрией.

Результаты показали, что для выбора критерия отбора элементов необходимо использовать как графические методы сравнения (итоговые сетки, графики отобранных элементов), так и количественные (количество шагов алгоритма, точность маркера, число узлов адаптивной сетки). Использование какого-либо критерия в отдельности не позволяет в полной мере получить представление о качестве маркера.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что основные зоны сгущения узлов итоговой адаптивной сетки не зависят от выбора маркера. Получаемая с помощью маркера m_1 сетка оказывается наиболее близкой к эталонной по количеству узлов, но при этом необходимо больше шагов адаптации, чем при использовании

других критериев маркировки. Во всех рассмотренных примерах использование маркера m_2 приводило к сеткам с избыточным количеством узлов, поэтому использование этого критерия нецелесообразно. Результаты для маркера m_3 и «массового критерия» m_4 зависят от выбранной задачи. Из приведенных в данной статье примеров и других, рассмотренных в ходе исследования задач, не удалось установить постоянного преимущества какого-либо из этих критериев.

Стоит отметить, что для маркеров m_1 и m_4 количество узлов итоговой сетки и число шагов алгоритма зависит от параметра α , а для маркера m_3 – от числа разбиваемых за один раз элементов. Подбор этих параметров для конкретной задачи может улучшить качество получаемых адаптивных сеток.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант номер 14-01-31273mol_a).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Muzalevsky A., Repin S.** On two-sided error estimates for approximate solutions of problems in the linear theory of elasticity // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2003. Vol. 18. No. 1. Pp. 65–85.

[2] **Repin S.I., Xanthis L.S.** A posteriori error estimation for elastoplastic problems based on duality theory // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 1996. Vol. 138. No. 1-4. Pp. 317–339.

[3] **Repin S.I.** A posteriori estimates for partial differential equations: Radon series on computational and applied mathematics, de Gruyter, Berlin, 2008.

[4] **Фролов М.Е.** Применение функциональных оценок погрешности со смешанными аппроксимациями к плоским задачам линейной теории упругости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2013. Т. 53. № 7. С. 1178–1191.

[5] **Фролов М.Е.** О реализации контроля точности решений плоских задач теории упругости

при помощи смешанных конечных элементов // Вычислительная механика сплошных сред. 2014. Т. 7. № 1. С. 73–81.

[6] **Чурилова М.А., Фролов М.Е.** Functional a posteriori error estimates for linear elasticity: computational properties and adaptive algorithms // Университетский научный журнал. 2014. № 10. С. 23–36.

[7] **Mali O., Neittaanmäki P., Repin S.** Accuracy Verification Methods. Theory and algorithms, Computational Methods in Applied Sciences, Springer, Dordrecht, 2014.

[8] **Verfürth R.** A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques. Chichester: John Wiley & Sons, Stuttgart: B.G. Teubner, 1996.

[9] **Bertoluzza S., Nochetto R.H., Quarteroni A., et al.** Multiscale and Adaptivity: Modeling, Numerics and Applications, C.I.M.E. Summer School. Cetraro, Italy 2009. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag 2012.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ЧУРИЛОВА Мария Александровна – кандидат физико-математических наук, ведущий программист суперкомпьютерного центра «Политехнический» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
m_churilova@mail.ru



Churilova M.A. THE SENSITIVITY OF THE ADAPTIVE ALGORITHM WITH A POSTERIORI ERROR CONTROL TO MARKING CRITERIA.

The aim of this work is to compare different marking strategies, their influence on the work of adaptive algorithms with a posteriori error control for plane elasticity problems. The error control was performed using functional error majorant. Implemented adaptive algorithms were based on the functional error majorant with no symmetry limitation on free tensor, computed using the zero-order Raviart-Thomas approximations on triangular meshes. The four most commonly used element marking criteria were used in adaptation. Numerical results for several plane strain problems have been presented, including the case of different materials and geometry. A comprehensive analysis of obtained results was given.

A POSTERIORI ERROR ESTIMATE, LINEAR ELASTICITY, ADAPTIVE ALGORITHM, RAVIART-THOMAS APPROXIMATION.

REFERENCES

- [1] **A. Muzalevsky, S. Repin**, On two-sided error estimates for approximate solutions of problems in the linear theory of elasticity, *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 18(1) (2003) 65–85.
- [2] **S. Repin, L.S. Xanthis**, A posteriori error estimation for elastoplastic problems based on duality theory, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 138 (1-4) (1996) 317–339.
- [3] **S.I. Repin**, A posteriori estimates for partial differential equations: Radon series on computational and applied mathematics, de Gruyter, Berlin, 2008.
- [4] **M. Frolov**, Application of functional error estimates with mixed approximations to plane problems of linear elasticity, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 53(7) (2013) 1000–1012.
- [5] **M. Frolov**, Implementation of error control for solving plane problems in linear elasticity by mixed finite elements, *Computational continuum mechanics*, 7(1) (2014) 73–81.
- [6] **M.A. Churilova, M.E. Frolov**, Functional a posteriori error estimates for linear elasticity: computational properties and adaptive algorithms, *Humanities & Science University Journal*, 10 (2014) 23–36.
- [7] **O. Mali, P. Neittaanmäki, S. Repin**, Accuracy Verification Methods. Theory and algorithms, *Computational Methods in Applied Sciences*, Springer, Dordrecht, 2014.
- [8] **R. Verfürth**, A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques, Chichester: John Wiley & Sons, Stuttgart: B.G. Teubner, 1996.
- [9] **S. Bertoluzza, R.H. Nochetto, A. Quarteroni, et al.** Multiscale and Adaptivity: Modeling, Numerics and Applications, C.I.M.E. Summer School, Cetraro, Italy 2009, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.

THE AUTHOR

CHURILOVA Maria A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

m_churilova@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.230.14

УДК: 539.12:537.63:537.868

Н.С. Акинцов, Г.Ф. Копытов, А.А. Мартынов

Кубанский государственный университет, г. Краснодар РФ

СПЕКТРАЛЬНО-УГЛОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПЛОСКОЙ МОНОХРОМАТИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЕ

На основе решения релятивистского уравнения движения заряженной частицы, которое было получено А.А. Рухадзе с сотр., рассмотрена классическая теория излучения релятивистского заряда, линейно ускоренного сверхмощным лазерным импульсом, с ультрарелятивистской интенсивностью. Решения, приведенные указанными авторами, были использованы для исследования спектрально-угловых характеристик излучения заряженной частицы в вакууме без учета тормозного излучения. Подробно проанализировано взаимодействие заряженной частицы со сверхкоротким лазерным импульсом большой амплитуды, когда необходимо релятивистское рассмотрение. Получены формулы для средней мощности излучения релятивистской заряженной частицы в зависимости от начальных данных, амплитуды электромагнитной волны, интенсивности волны и ее поляризации. Приведена зависимость средней мощности излучения заряда от интенсивности электромагнитной волны. Для случая, когда лазерный импульс можно представить плоской монохроматической волной, получены аналитические выражения для характеристик излучения и найдены фазово-угловые распределения релятивистской интенсивности и мощности излучения. Получены Фурье-образ напряженности электрического поля излучения и спектральная плотность излучения частицы в поле плоской монохроматической волны для различных типов поляризации (линейной и круговой).

ПЛОСКАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ВОЛНА, МОЩНОСТЬ ИЗЛУЧЕНИЯ, ИНТЕНСИВНОСТЬ ИЗЛУЧЕНИЯ, УЛЬТРАКОРОТКИЙ ЛАЗЕРНЫЙ ИМПУЛЬС.

Введение

В настоящей работе рассматривается взаимодействие заряженной частицы со сверхкоротким лазерным импульсом интенсивности $I = 10^7$ Вт·см⁻² в вакууме, без учета тормозного излучения. На основе уравнения Ньютона, с применением силы Лоренца в ряде работ [1 – 4] анализируется движение заряда в поле короткого лазерного импульса. Волновой фронт считают плоским, и в первом приближении он соответствует плоской монохроматической электромагнитной волне.

В работах [2 – 4] приведены вычисления средних энергетических и кинетических характеристик заряженной частицы для различных поляризаций. В работе [1] было показано, что период колебания частицы отличен от периода поля плоской волны и произведено усреднение по периоду колебания частицы. На этой основе представляет интерес расчет спектрально-угловых характеристик излучения, а также их усреднение по периоду колебаний частицы. Речь идет о таких характеристиках, как средняя мощность, полная мощ-

ность и интенсивность излучения заряда, угловое и фазово-угловое распределение интенсивности излучения. При этом следует вычислить Фурье-образ напряженности электрического поля излучения частицы и оценить модуль ее спектральной плотности для различных поляризаций (линейной и круговой).

Постановка задачи

Будем считать, что на заряженную частицу q с массой m действует высокочастотная сила Лоренца; тогда уравнение движения заряда имеет вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}[\mathbf{V} \times \mathbf{H}], \quad (1)$$

где \mathbf{p} – импульс частицы; \mathbf{E} , \mathbf{H} – электрическая и магнитная напряженности лазерного поля; q – заряд частицы.

Уравнение (1) дополняется начальными условиями для скорости и координаты частицы:

$$\mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0, \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0. \quad (2)$$

Релятивистский фактор γ связан с интенсивностью электромагнитного поля I следующим соотношением:

$$\gamma = \sqrt{1 + I / I_{rel}},$$

где релятивистская интенсивность I_{rel} ($\text{Вт} \cdot \text{см}^{-2}$) определяется выражением [5]:

$$I_{rel} = m^2 c^3 \omega^2 / 8\pi q^2 = 1,37 \cdot 10^{18} \lambda^{-2}. \quad (3)$$

Здесь λ , мкм – длина волны; ω , с^{-1} – частота сверхмощного ультракороткого лазерного излучения (частота несущей волны).

Выберем систему координат так, чтобы лазерный импульс распространялся вдоль оси z . При этом его фазовый фронт будем считать плоским, а поверхность постоянной фазы перпендикулярной оси z . В этом случае компоненты векторов электрического (\mathbf{E}) и магнитного (\mathbf{H}) полей для плоской монохроматической электромагнитной волны определяются выражениями [6]:

$$\begin{cases} E_x = H_y = b_x \cos \Phi, \\ E_y = -H_x = f b_y \sin \Phi, \\ E_z = H_z = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где оси x и y совпадают с направлением полуосей эллипса поляризации волны b_x и b_y , причем

$$b_x \geq b_y \geq 0; \quad \Phi = \omega \xi; \quad \xi = t - z/c;$$

ω – частота несущей волны; $f = \pm 1$ – параметр поляризации: верхний знак для E_y соответствует правой поляризации, а нижний – левой [7, 8].

Интенсивность излучения заряженной частицы в поле плоской монохроматической электромагнитной волны

Умножая уравнение (1) векторно на вектор \mathbf{H} , получим вектор Умова – Пойнтинга в следующем виде:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}] = \frac{c}{4\pi q} [\mathbf{F} \times \mathbf{H}] - \frac{1}{4\pi} [[\mathbf{V} \times \mathbf{H}] \times \mathbf{H}], \quad (5)$$

где $\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$.

В покомпонентной форме вектор (5) принимает вид

$$S_x(t) = -\frac{c}{4\pi q} H_y F_z + \frac{1}{4\pi} H_y (V_x H_y - V_y H_x), \quad (6)$$

$$S_y(t) = \frac{c}{4\pi q} H_x F_z + \frac{1}{4\pi} H_x (V_y H_x - V_x H_y), \quad (7)$$

$$S_z(t) = \frac{c}{4\pi q} (E_x F_x + E_y F_y) + \frac{1}{4\pi} V_z (H_x^2 + H_y^2). \quad (8)$$

Сила Лоренца, действующая на частицу, в покомпонентной форме имеет следующий вид [1]:

$$F_x = \frac{q b_x}{(1 + g)} \cos \Phi', \quad (9)$$

$$F_y = \frac{f q b_y}{(1 + g)} \sin \Phi', \quad (10)$$

$$F_z = \frac{\omega \gamma}{(1 + g)} \left(\frac{q}{\gamma^2 \omega} (\chi_x b_x \cos \Phi' + f \chi_y b_y \sin \Phi') + \frac{q^2}{2\gamma^2 \omega^2} (b_x^2 - b_y^2) \sin(2\Phi') \right). \quad (11)$$

Поскольку из выражения (11) следу-

ет, что в поле плоской монохроматической волны в начальный момент времени $t = 0$ продольная составляющая импульса $p_{\parallel} = \text{const}$ (т. е. без учета тормозного излучения частица не ускоряется и не замедляется), в данном случае выполняется теорема Лоусона – Вудворда.

Подставляя выражения (9) – (11) и значения скорости из работы [1] в формулы (6) – (8), получаем компоненты вектора Умова – Пойнтинга в следующем виде:

$$S_x = 0, S_y = 0, S_z(t) = \frac{c}{4\pi} (b_x^2 \cos^2 \Phi' + b_y^2 \sin^2 \Phi'). \quad (12)$$

Для случая циркулярно-поляризованной электромагнитной волны $b_x = b_y = b / \sqrt{2}$ получаем модуль вектора в виде

$$|\mathbf{S}(t)| = \sqrt{S_x^2(t) + S_y^2(t) + S_z^2(t)} = I_{cir}. \quad (13)$$

Оценим усредненную по периоду колебаний частицы интенсивность ее излучения в поле плоской монохроматической электромагнитной волны [1]:

$$I_{rad} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} |\mathbf{S}(t)| dt = \frac{\omega}{2\pi(1+h)} \int_{\Phi(t)}^{\Phi(t)+2\pi} |\mathbf{S}(t)| \frac{1+g}{\omega} d\Phi' = I_{cir}. \quad (14)$$

Из выражения (14) видно, что для частицы в поле циркулярно-поляризованной электромагнитной волны интенсивность ее излучения равна интенсивности волны круговой поляризации.

Для случая линейной поляризации $b_x = b, b_y = 0$ имеем:

$$|\mathbf{S}(t)| = \sqrt{S_x^2(t) + S_y^2(t) + S_z^2(t)} = I_{lin} \cos^2 \Phi'. \quad (15)$$

Интенсивность излучения в волне линейной поляризации имеет следующий вид:

$$I_{rad} = \frac{I_{lin}}{\left(2 + \frac{\mu}{2} + \mu \sin^2 \Phi_0\right)} \times \left(1 + \frac{\mu}{2} \sin^2 \Phi_0 + \frac{\mu}{8}\right), \quad (16)$$

где

$$\mu = \left(\frac{qb}{mc\omega}\right)^2 = \frac{2q^2}{\pi m^2 c^5} I_{lin} \lambda^2 = \frac{q^2}{\pi m^2 c^5} I_{cir} \lambda^2 = \frac{I_{lin}}{I_{rel}} = \frac{I_{cir}}{2I_{rel}}. \quad (17)$$

Минимальное значение интенсивности излучения соответствует фазе $\Phi_0 = 0$ или π и определяется формулой

$$I_{rad} = \frac{I_{lin}}{4} \left(\frac{8 + \mu}{4 + \mu}\right). \quad (18)$$

Максимальное значение интенсивности излучения получается при фазе $\Phi_0 = \frac{\pi}{2}$ или $\frac{3\pi}{2}$ и имеет вид

$$I_{rad} = \frac{I_{lin}}{4} \left(\frac{8 + 5\mu}{4 + 3\mu}\right). \quad (19)$$

Средняя интенсивность излучения заряженной частицы, усредненная по начальной фазе Φ_0 , в поле плоской монохроматической волны линейной поляризации имеет вид

$$\bar{I}_{rad} = \frac{I_{lin}}{4} \left(2 - \frac{\mu}{\sqrt{3\mu^2 + 16\mu + 16}}\right). \quad (20)$$

На рис. 1 показана зависимость интенсивности излучения заряда от интенсивности плоской монохроматической электромагнитной волны для случаев линейной и круговой поляризации. Из формул (18) – (20) видно, что для малых значений интенсивности для линейной поляризации $I \leq 10^5$ ТВт·см⁻² интенсивность излучения частицы приблизительно равна интенсивности плоской монохроматической электромагнитной волны ($I_{lin} \approx I_{rad}$).

При превышении релятивистского значения (3), т. е. когда интенсивность I_{lin} линейно-поляризованной электромагнитной волны равна или превышает значение $1,37 \cdot 10^6$ ТВт·см⁻², получаем релятивистскую интенсивность излучения. Видно, что для случая круговой поляризации ее интенсивность равна интенсивности излучения заряженной частицы ($I_{rad} = I_{cir}$).

Дифференцируя выражение (16) по Φ_0 , получаем фазовое распределение интенсивности излучения:

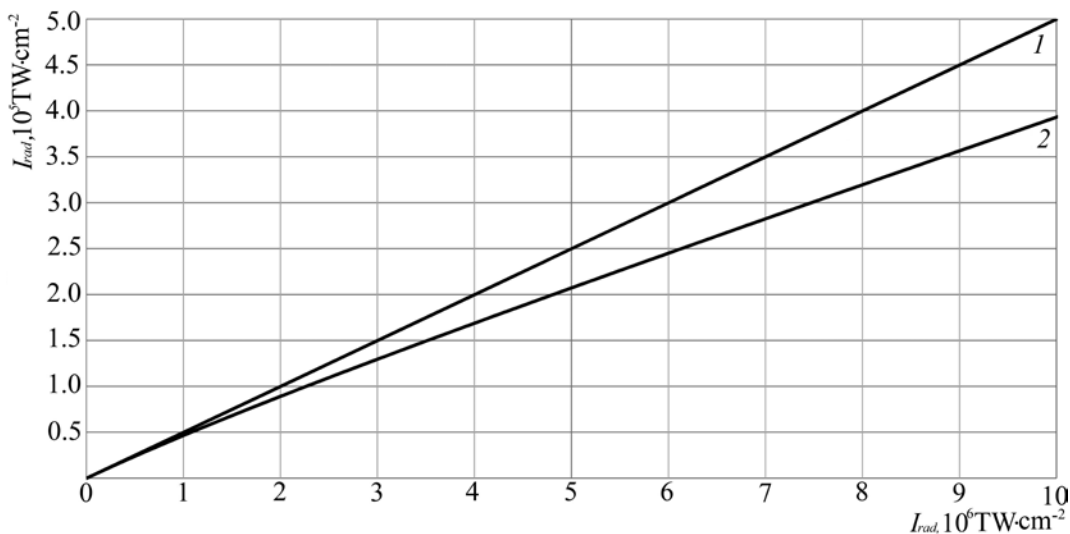


Рис. 1. Зависимости интенсивности излучения заряда от интенсивностей плоских монохроматических электромагнитных волн круговой (1) и линейной (2) поляризации (формулы (14) и (20) соответственно)

$$\frac{dI_{rad}}{d\Phi_0} = I_{lin} \frac{\mu^2 \sin \Phi_0 \cos \Phi_0}{(2\mu \sin^2 \Phi_0 + \mu + 4)^2} \cdot \quad (21)$$

лучения $dI_{rad} / d\Phi_0$ для значения $I_{lin} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ на фазовой плоскости.

На рис. 2 приведено изображение фазового распределения интенсивности из-

лучения при бесконечном увеличении интенсивности ($I_{lin} \rightarrow \infty$) фазовое распределение

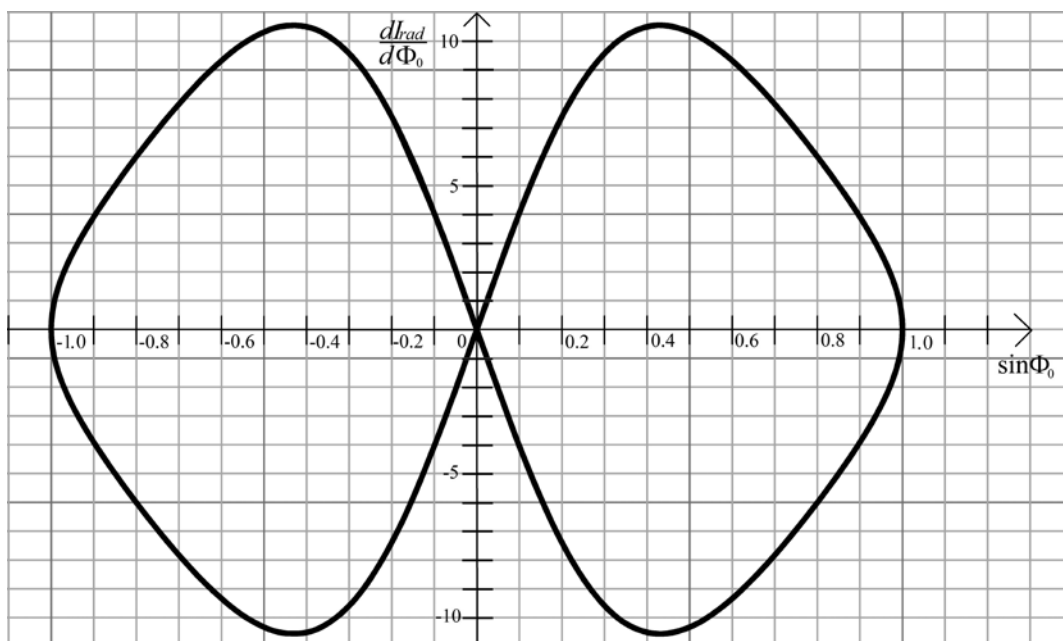


Рис. 2. Фазовое распределение интенсивности излучения $dI_{rad}/d\Phi_0$ ($10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$) по начальной фазе волны Φ_0

интенсивности излучения для значений $\sin \Phi_0 = 0, +1$ и -1 соответствует значению $dI_{rad} / d\Phi_0 = 0$.

Мгновенное угловое распределение интенсивности излучения имеет вид

$$\frac{dI_{rad}}{d\Omega} = \frac{I_{lin}}{2\pi} \frac{\mu^2 \sin \Phi_0}{(2\mu \sin^2 \Phi_0 + \mu + 4)^2}. \quad (22)$$

Дифференцируя распределение (22) по Φ_0 , получаем фазово-угловое распределение интенсивности излучения от начальной фазы волны:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 I_{rad}}{d\Phi_0 d\Omega} &= \frac{I_{lin}}{2\pi} \frac{\mu^2 \cos \Phi_0}{(2\mu \sin^2 \Phi_0 + \mu + 4)^2} - \\ &- \frac{I_{lin}}{\pi} \frac{4\mu^3 \sin^2 \Phi_0 \cos \Phi_0}{(2\mu \sin^2 \Phi_0 + \mu + 4)^3}. \end{aligned} \quad (23)$$

Для интенсивности линейно-поляризованной волны $I_{lin} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ получаем фазово-угловое распределение интенсивности излучения заряда в единицу телесного угла на фазовой плоскости (рис. 3).

Из формулы (23) следует, что при $I_{lin} \rightarrow \infty$ фазово-угловое распределение интенсивности излучения для значений

$\sin \Phi_0 = \pm 1$ соответствует нулю; для интенсивности $I_{lin} \leq 10^6 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ это распределение при $\sin \Phi_0 = 0$ отлично от нуля и соответствует нерелятивистскому излучению заряда; и, наконец, для $I_{lin} \geq 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ оно при $\sin \Phi_0 = 0$ оказывается нулевым (см. рис. 3).

Мощность излучения заряда в поле плоской монохроматической электромагнитной волны

Мощность dP , переносимая через элемент поверхности dF , равна модулю вектора плотности потока энергии и определяется формулой [9]:

$$\frac{dP}{dF} = |\mathbf{S}(t)|. \quad (24)$$

Введем телесный угол Ω ; тогда формула (19) принимает вид

$$\frac{dP}{d\Omega} = r^2 |\mathbf{S}(t)|, \quad (25)$$

где $r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$ — расстояние от частицы в пространстве до ее исходной позиции.

Как известно, релятивистское уравнение

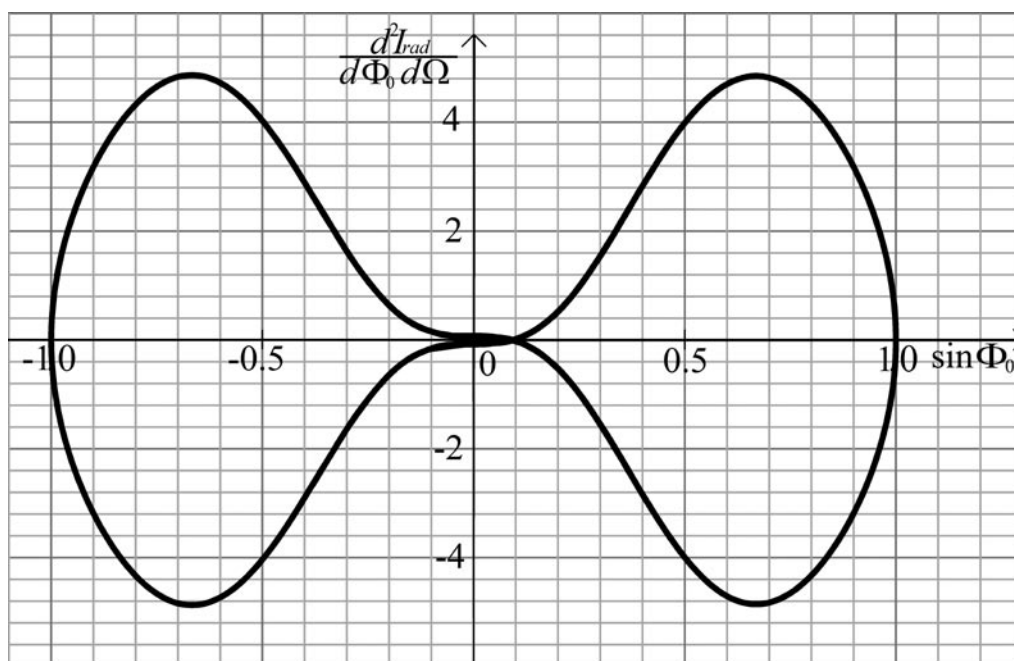


Рис. 3. Фазово-угловое распределение интенсивности излучения заряда $d^2 I_{rad} / d\Phi_0 d\Omega$ ($10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$) по начальной фазе волны Φ_0

движения, без учета силы радиационного трения, для заряженной частицы в поле плоской монохроматической электромагнитной волны имеет точное аналитическое решение [1]. Рассмотрим случаи круговой и линейной поляризации волны.

Круговая поляризация. Подставляя координаты частицы, представленные в работе [1], и компоненты вектора Умова – Пойтинга (13) в формулу (25), для круговой поляризации получаем следующее равенство:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\Omega} = & I_{cir} \left(\left(\frac{\chi_x^2 + \chi_y^2}{\gamma^2} + h^2 \right) \frac{\Phi^2}{k^2} - \right. \\ & - 2\Phi \frac{(1+h)qb}{\sqrt{2\gamma^2\omega k^2}} (\chi_x \cos \Phi + f\chi_y \sin \Phi) + \\ & + 2 \left(\frac{C_x\chi_x + C_y\chi_y}{\gamma} + hC_z \right) \frac{\Phi}{k} + \frac{q^2b^2}{2\gamma^2\omega^2k^2} \times \\ & \times \left(1 + \frac{1}{\gamma^2} (\chi_x \cos \Phi + f\chi_y \sin \Phi)^2 \right) + C_x^2 + \\ & \left. + C_y^2 + C_z^2 - 2 \frac{qb}{\sqrt{2\gamma\omega k}} (C_x \cos \Phi + fC_y \sin \Phi) \right), \end{aligned} \quad (26)$$

где $k = 2\pi / \lambda$ – волновое число; C_x, C_y, C_z – постоянные, которые определяются

формулами

$$\begin{aligned} C_x = & -\frac{\chi_x}{\gamma k} \Phi_0 + \frac{qb}{\sqrt{2\gamma\omega k}} \cos \Phi_0, \\ C_y = & -\frac{\chi_y}{\gamma k} \Phi_0 + f \frac{qb}{\sqrt{2\gamma\omega k}} \sin \Phi_0, \\ C_z = & -\frac{h}{k} \Phi_0 + \frac{qb}{\sqrt{2\gamma^2\omega k}} \times \\ & \times (\chi_x \cos \Phi_0 + f\chi_y \sin \Phi_0). \end{aligned} \quad (27)$$

Дифференцируя равенство (26) по Φ , получаем фазово-угловое распределение для круговой поляризации:

$$\begin{aligned} \frac{d^2P}{d\Phi d\Omega} = & I_{cir} \left(2 \left(\frac{\chi_x^2 + \chi_y^2}{\gamma^2} + h^2 \right) \frac{\Phi}{k^2} - \right. \\ & - 2\Phi \frac{(1+h)qb}{\sqrt{2\gamma^2\omega k^2}} (f\chi_y \cos \Phi + \chi_x \sin \Phi) - \\ & - 2 \frac{(1+h)qb}{\sqrt{2\gamma^2\omega k^2}} (\chi_x \cos \Phi + f\chi_y \sin \Phi) + \\ & + 2 \left(\frac{C_x\chi_x + C_y\chi_y}{\gamma} + hC_z \right) \frac{1}{k} + \\ & \left. + \frac{q^2b^2}{2\gamma^4\omega^2k^2} (f\chi_y \cos \Phi - \chi_x \sin \Phi) \times \right) \end{aligned} \quad (28)$$

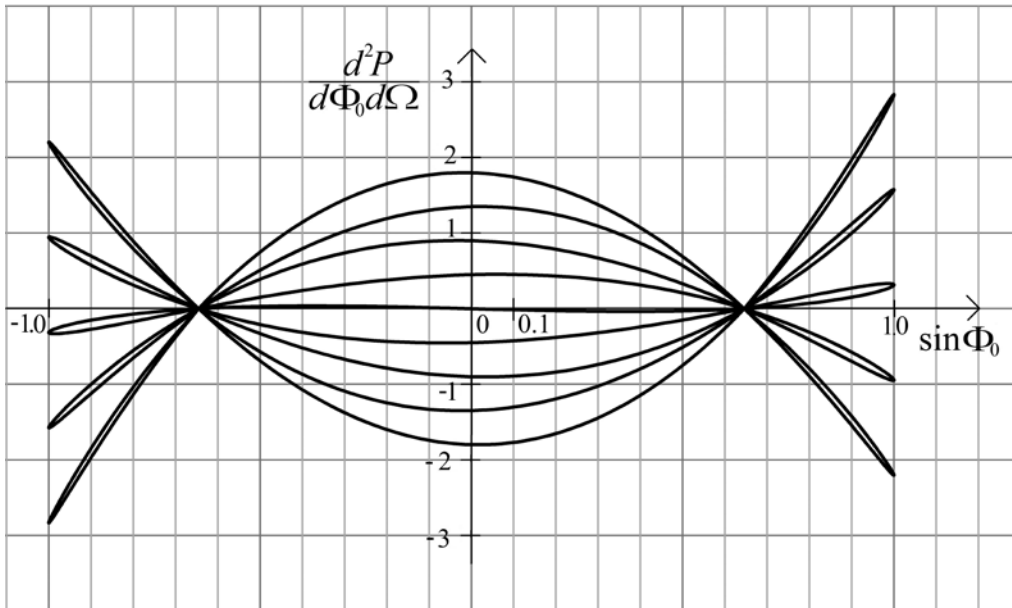


Рис. 4. График зависимости фазово-углового распределения мощности излучения заряда $d^2P/d\Phi_0 d\Omega$ (0,01 ТВт) от начальной фазы волны Φ_0

$$\begin{aligned} & \times (\chi_x \cos \Phi + f\chi_y \sin \Phi) - \\ & - 2 \frac{qb}{\sqrt{2}\gamma\omega k} (fC_y \cos \Phi - C_x \sin \Phi) \Big). \end{aligned} \quad (28)$$

В начальный момент времени фазово-угловое распределение (28) имеет вид

$$\frac{d^2 P}{d\Phi d\Omega} = I_{cir} \Phi_0 \frac{\mu}{k^2} \left(1 - \left(1 + \frac{\mu}{2} \right) \cos(2\Phi_0) \right). \quad (29)$$

Используя соотношение (17), преобразуем формулу (29) к виду

$$\begin{aligned} \frac{d^2 P}{d\Phi_0 d\Omega} &= \frac{m^2 c^5}{4\pi q^2} \Phi_0 \mu^2 \times \\ &\times \left(1 - \left(1 + \frac{\mu}{2} \right) \cos(2\Phi_0) \right). \end{aligned} \quad (30)$$

Из формулы (30) для интенсивности $I_{cir} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ получаем фазовый портрет распределения мощности излучения заряда в единицу телесного угла (рис. 4). Видно, что для интенсивности $I_{cir} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ при значениях $\sin \Phi_0 = +0,65$ и $-0,65$ фазово-угловое распределение мощности излучения заряда соответствует нулю.

Интегрируя равенство (26) по телесному углу $d\Omega = \cos \Phi d\Phi d\theta$, получаем формулу для полной мощности излучения:

$$\begin{aligned} P &= \frac{8\pi^2}{k^2} I_{cir} \left(\left(\frac{\chi_x^2 + \chi_y^2}{\gamma^2} + h^2 \right) + \right. \\ &\left. + \frac{qb(1+h)}{\sqrt{2}\gamma^2\omega} \left(f\chi_y - \frac{\pi}{2} \chi_x \right) \right). \end{aligned} \quad (31)$$

Зависимость полной мощности излучения от начальной фазы волны имеет вид

$$\begin{aligned} P &= \mu \frac{4\pi^2}{k^2} I_{cir} \left(\frac{\mu}{2} + 1 \right) \times \\ &\times \left(1 + \left(\cos \Phi_0 + \frac{\pi}{2} \sin \Phi_0 \right) \right). \end{aligned} \quad (32)$$

Дифференцируя выражение (32) по Φ_0 , получаем фазовое распределение мощности излучения:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\Phi_0} &= \mu \frac{4\pi^2}{k^2} I_{cir} \left(\frac{\mu}{2} + 1 \right) \times \\ &\times \left(\frac{\pi}{2} \cos \Phi_0 - \sin \Phi_0 \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Используя соотношения (17), преобразуем формулу (33) к виду

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\Phi_0} &= \frac{\pi m^2 c^5}{q^2} \mu^2 \left(\frac{\mu}{2} + 1 \right) \times \\ &\times \left(\frac{\pi}{2} \cos \Phi_0 - \sin \Phi_0 \right). \end{aligned} \quad (34)$$

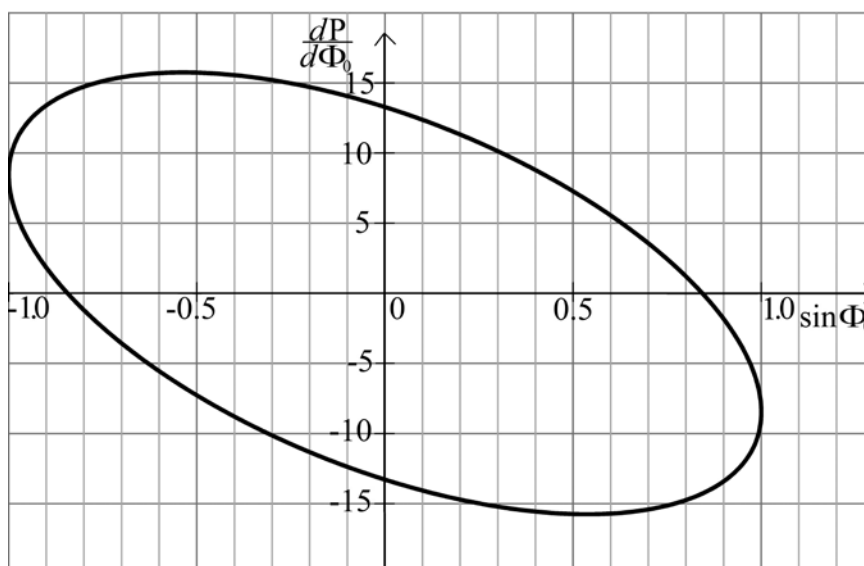


Рис. 5. Фазовое распределение мощности излучения заряда $dP/d\Phi_0$ (0,01 ТВт) в зависимости от начальной фазы волны Φ_0

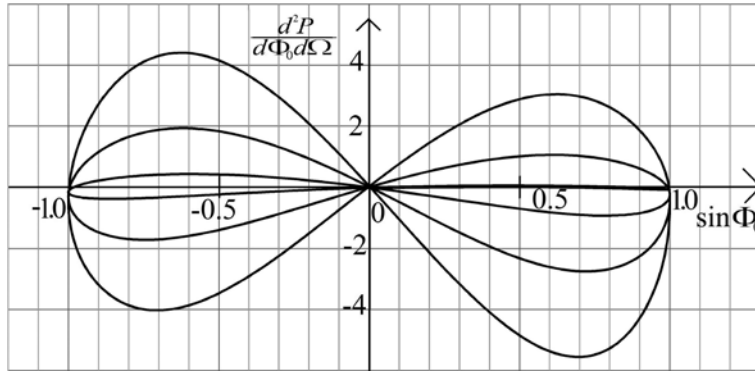


Рис. 6. Фазово-угловое распределение мощности $d^2P/d\Phi_0 d\Omega$ (0,01 ТВт) излучения заряда в зависимости от начальной фазы волны Φ_0

Из формулы (34) для интенсивности $I_{cir} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ получаем фазовый портрет распределения мощности излучения (рис. 5).

Видно, что при значениях $\sin \Phi_0 = -0,85$ и $+0,85$ фазовое распределение мощности излучения заряда соответствует нулю.

Усредняя выражение (32) по начальной фазе волны Φ_0 , получаем среднюю мощность излучения частицы:

$$\bar{P} = \mu \frac{4\pi^2}{k^2} I_{cir} \left(\frac{\mu}{2} + 1 \right). \quad (35)$$

Подставляя выражение (17) в формулу (35), получаем

$$\bar{P} = \frac{\pi m^2 c^5}{q^2} \mu \left(\frac{\mu}{2} + 1 \right). \quad (36)$$

Линейная поляризация. Аналогично выкладкам, проведенным для случая круговой поляризации, для линейно-поляризованной волны координаты частицы, взятые из работы [1], и компоненты вектора Умова – Пойнтинга (15) подставляем в формулу (25); тогда получаем следующее равенство:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\Omega} = & I_{cir} \left(\left(\frac{\chi_x^2}{\gamma^2} + h^2 \right) \frac{\Phi^2}{k^2} + \right. \\ & \left. + \frac{q^3 b_x^3}{4\gamma^4 \omega^3 k^2} \chi_x \cos \Phi \sin(2\Phi) - \right. \\ & \left. - \left(2(1+h)\Phi \frac{q\chi_x b_x}{\gamma^2 \omega k^2} + 2C_x \frac{qb_x}{\gamma \omega k} \right) \cos \Phi + \right. \\ & \left. + 2 \left(C_x \frac{\chi_x}{\gamma} + hC_z \right) \frac{\Phi}{k} + \frac{q^2 b_x^2}{\gamma^2 \omega^2 k^2} \left(1 + \frac{\chi_x^2}{\gamma^2} \right) \cos^2 \Phi - \right. \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} & - 2h\Phi \frac{q^2 b_x^2}{8\gamma^2 \omega^2 k^2} \sin 2\Phi + \frac{q^4 b_x^4}{64\gamma^4 \omega^4 k^2} \sin^2(2\Phi) - \\ & \left. - C_z \frac{q^2 b_x^2}{4\gamma^2 \omega^2 k} \sin 2\Phi + C_x^2 + C_z^2 \right) \cos^2 \Phi, \quad (37) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} C_x = & -\frac{\chi_x}{\gamma k} \Phi_0 + \frac{qb_x}{\gamma \omega k} \cos \Phi_0, \\ C_z = & -\frac{h}{k} \Phi_0 + \frac{q}{\gamma^2 \omega k} \chi_x b_x \cos \Phi_0 + \\ & + \frac{q^2 b_x^2}{8\gamma^2 \omega^2 k} \sin 2\Phi_0. \quad (38) \end{aligned}$$

Дифференцируя равенство (37) по Φ , получаем фазово-угловой портрет распределения мощности излучения в начальный момент времени при интенсивности $I_{lin} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ (рис. 6). Видно, что фазово-угловое распределение излучения заряда соответствует типу «восьмерки», и при $\sin \Phi_0 = -1, 0$ и $+1$ оно равно нулю.

Интегрируя равенство (37) по телесному углу, получаем полную мощность излучения частицы:

$$\begin{aligned} P = & 4\pi^2 \frac{I_{lin}}{k^2} \left(\frac{14}{9} \left(\frac{\chi_x^2}{\gamma^2} + h^2 \right) - \right. \\ & \left. - \frac{3}{4} \pi(1+h) \frac{q\chi_x b_x}{\gamma^2 \omega} - \right. \\ & \left. - \frac{3}{4} C_x \frac{qb_x}{\gamma \omega k^{-1}} + \frac{1}{10} h \frac{q^2 b_x^2}{\gamma^2 \omega^2} \right). \quad (39) \end{aligned}$$

Для начального момента времени имеем следующее выражение:

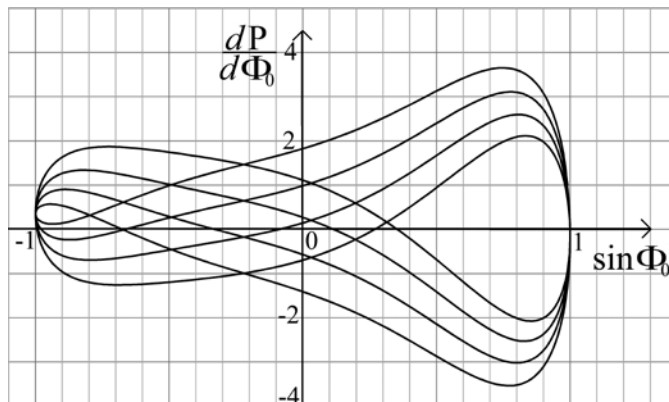


Рис. 7. Фазовое распределение мощности излучения заряда P ($0,01 \text{ ТВт}$) в зависимости от начальной фазы волны Φ_0

$$\begin{aligned}
 P = 4\pi^2 \frac{I_{lin}}{k^2} & \left(\frac{14}{9} \left(\mu \sin^2 \Phi_0 + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\mu^2}{16} (1 + 2 \sin^2 \Phi_0)^2 \right) + \frac{\mu^2}{40} (1 + 2 \sin^2 \Phi_0) + \right. \\
 & \left. + \frac{3}{4} \pi \left(1 + \frac{\mu}{4} (1 + 2 \sin^2 \Phi_0) \right) \mu \sin \Phi_0 - \right. \\
 & \left. - \frac{3}{4} (\mu \sin \Phi_0 \Phi_0 + \mu \cos \Phi_0) \right). \quad (40)
 \end{aligned}$$

Дифференцируя это выражение по Φ_0 , получаем фазовое распределение мощности излучения для интенсивности $I_{lin} = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ (рис. 7).

При $I_{lin} \rightarrow \infty$ данное распределение для значений $\sin \Phi_0 = -1$ и $+1$ соответствует нулю. Для остальных значений $\sin \Phi_0$ фазовое распределение $dP / d\Phi_0 \rightarrow \infty$ (тоже при $I_{lin} \rightarrow \infty$).

Усредняя выражение (40) по начальной фазе волны Φ_0 , получаем среднюю мощность излучения частицы:

$$\bar{P} = 4\pi^2 \mu \frac{I_{lin}}{k^2} \left(\frac{23}{12} + \frac{39}{80} \mu \right). \quad (41)$$

С учетом соотношений (17) формула (41) принимает вид

$$\bar{P} = \frac{\pi m^2 c^5}{2q^2} \mu^2 \left(\frac{23}{12} + \frac{39}{80} \mu \right). \quad (42)$$

На рис. 8 приведены зависимости средних мощностей излучения электрона от интенсивностей плоских монохроматических

электромагнитных волн линейной и круговой поляризации (см. соответственно формулы (42) и (36)).

Из формул (36), (42) и рис. 8. следует, что мощность излучения частицы при интенсивности $I \geq 1,37 \cdot 10^6 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ в поле плоской монохроматической электромагнитной волны для случаев линейной и круговой поляризации сравнимы в нерелятивистском пределе. При этом их различие не превышает 10 %. Для интенсивности $I = 10^7 \text{ ТВт} \cdot \text{см}^{-2}$ мощность излучения электрона в поле такой электромагнитной волны линейной поляризации вчетверо выше, чем в круговой.

Спектрально-угловые характеристики излучения заряда в поле плоской монохроматической волны

Спектр излучения заряженной частицы в поле плоской монохроматической электромагнитной волны можно представить в виде суммы бесконечного числа монохроматических волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\omega=-\infty}^{+\infty} \mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) \exp(-i\Phi). \quad (43)$$

Фурье-компоненту можно представить в виде периодической функции с периодом \tilde{T} [1]:

$$\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r}) = \frac{1}{\tilde{T}} \int_{\tilde{t}}^{\tilde{t}+\tilde{T}} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \exp(i\Phi) dt. \quad (44)$$

Из уравнения (1) выразим $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, подставим в функцию (44) и перейдем от инте-

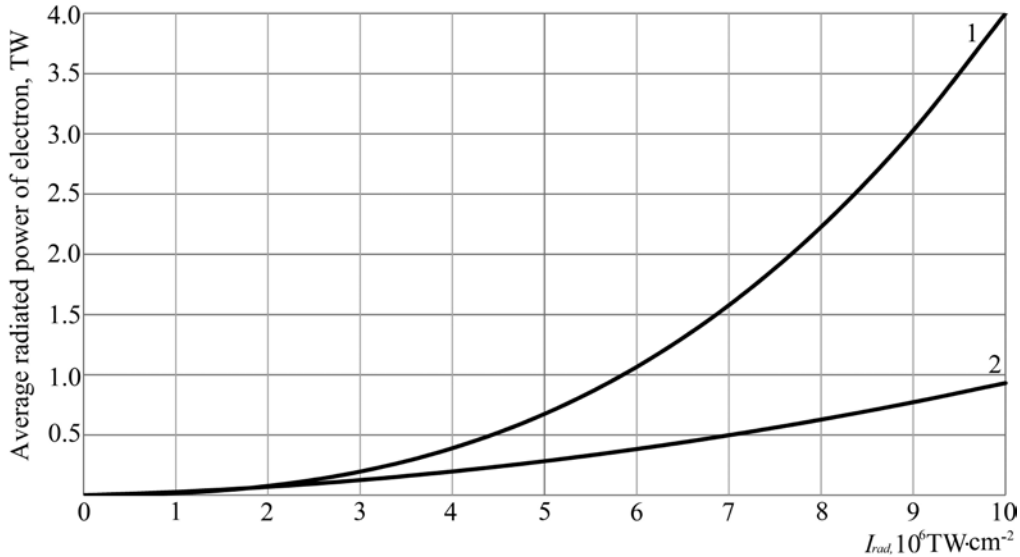


Рис. 8. Зависимости средней мощности излучения электрона от интенсивностей плоских монохроматических электромагнитных волн линейной (1) и круговой (2) поляризации (см. соответственно формулы (42) и (36))

гирования по времени к интегрированию по фазе Φ . Тогда для действительной части $\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r})$ получаем следующее выражение:

$$\text{Re}(\mathbf{E}_\omega(\mathbf{r})) = \frac{1}{\tilde{T}} \int_{\Phi(t)}^{\Phi(\tilde{t})} \left(\frac{1}{q} \frac{d\mathbf{p}}{dt} - \frac{1}{c} [\mathbf{VH}] \right) \times \cos \Phi \frac{(1+g)}{\omega} d\Phi. \quad (45)$$

Подставим выражения (4), (9) – (11) в формулу (45) и проинтегрируем по фазе Φ . Тогда компоненты Фурье-образа функции (45) в покомпонентной форме принимают следующий вид:

$$\text{Re}(E_{\omega,x}) = \frac{b_x}{2(1+h)} \left(1 + h - \frac{q^2(b_x^2 - b_y^2)}{16\gamma^2\omega^2} \right), \quad (46)$$

$$\text{Re}(E_{\omega,y}) = 0, \quad \text{Re}(E_{\omega,z}) = 0.$$

Рассмотрим опять случаи круговой и линейной поляризации волны.

Круговая поляризация. Из формул (46) получаем следующие значения компонент Фурье-образа функции (45) для круговой поляризации:

$$\text{Re}(\mathbf{E}_\omega) = \frac{b}{2\sqrt{2}}. \quad (47)$$

Видно, что в этом случае Фурье-образ

сохраняет информацию только об амплитудах спектральных составляющих, тогда как информация об их фазе теряется. Поэтому все сигналы с одинаковыми спектрами амплитуд, но с различными спектрами фаз должны иметь одинаковую спектральную плотность.

Подставляя значения (47) в сумму (43), получаем следующий спектр излучения частицы для начального момента времени:

$$\text{Re}(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)) = \frac{b}{2\sqrt{2}} \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \cos(\omega\xi_0), \quad (48)$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)$ – напряженность поля излучения заряженной частицы в поле плоской монохроматической электромагнитной волны в начальный момент t_0 ; \mathbf{r} – положение частицы в пространстве относительно начального положения $(0, 0, z_0)$; b – амплитуда электромагнитной волны; $\xi_0 = -z_0/c$.

Модуль спектра излучения (48) имеет следующее фазовое распределение:

$$\text{Re} \left(\left| \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\Phi_0} \right| \right) = \frac{b}{2\sqrt{2}} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \sin(\omega\xi_0) \right|. \quad (49)$$

Если рассмотреть случай, когда $\xi_0 \rightarrow 1$, то получим спектральное распределение излучения заряда по частоте ω :

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\omega} \right| \right) = \frac{b}{2\sqrt{2}} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \sin(\omega) \right|. \quad (50)$$

Спектр излучения заряда в единичный телесный угол имеет вид

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\Omega} \right| \right) = \frac{b}{4\sqrt{2}\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \operatorname{tg}(\omega\xi_0) \right|. \quad (51)$$

Фазово-угловое распределение спектра излучения имеет вид

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d^2\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\Phi d\Omega} \right| \right) = \frac{b}{4\sqrt{2}\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \sec^2(\omega\xi_0) \right|.$$

При $\xi_0 \rightarrow 1$ получаем частотно-угловое распределение модуля спектра следующего вида:

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d^2\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\omega d\Omega} \right| \right) = \frac{b}{4\sqrt{2}\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \sec^2(\omega) \right|. \quad (52)$$

Введем функцию, характеризующую спектральную плотность излучения:

$$S(\omega) = |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)|^2. \quad (53)$$

Тогда спектр (48) принимает следующий вид:

$$\operatorname{Re}(S(\omega)) = \frac{b^2}{8} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \cos^2(\omega\xi_0) \right|, \quad (54)$$

а фазовое распределение (54) имеет вид

$$\operatorname{Re} \left(\frac{dS(\omega)}{d\Phi} \right) = \frac{b^2}{8} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \sin(2\omega\xi_0) \right|. \quad (55)$$

Спектральная плотность излучения в единичный телесный угол выражается как

$$\operatorname{Re} \left(\frac{dS(\omega)}{d\Omega} \right) = \frac{b^2}{8\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \sin(\omega\xi_0) \right|. \quad (56)$$

Соответствующее фазово-угловое распределение спектральной плотности принимает вид

$$\operatorname{Re} \left(\frac{d^2S(\omega)}{d\Phi_0 d\Omega} \right) = \frac{b^2}{8\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \cos(\omega\xi_0) \right|. \quad (57)$$

При условии $\xi_0 \rightarrow 1$ получаем частотно-угловое распределение спектральной плотности излучения частицы:

$$\operatorname{Re} \left(\frac{d^2S(\omega)}{d\omega d\Omega} \right) = \frac{b^2}{8\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \cos(\omega) \right|. \quad (58)$$

Линейная поляризация. В этом случае из

выражений (46) для Фурье-образа получаем:

$$\operatorname{Re}(\mathbf{E}_\omega) = \frac{b}{\left(2 + \frac{\mu}{2}(1 + 2\sin^2\Phi_0) \right)^{\times}} \times \left(1 + \frac{\mu}{4}(1 + 2\sin^2\Phi_0) - \frac{\mu}{16} \right). \quad (59)$$

Подставляя выражение (59) в формулу (43), получаем спектр излучения частицы в начальный момент времени:

$$\operatorname{Re}(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)) = b \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \frac{\left(1 + \frac{\mu}{4}(1 + 2\sin^2\Phi_0) - \frac{\mu}{16} \right)}{\left(2 + \frac{\mu}{2}(1 + 2\sin^2\Phi_0) \right)} \cos(\omega\xi_0). \quad (60)$$

Спектр излучения имеет следующее распределение по фазе:

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\Phi_0} \right| \right) = b \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \left(1 - \frac{2B}{A} \right) \frac{\mu}{A} \sin\Phi_0 \cos^2\Phi_0 - \frac{B \sin\Phi_0}{A} \right|, \quad (61)$$

где

$$A = 2 + \frac{\mu}{2}(1 + 2\sin^2\Phi_0),$$

$$B = 1 + \frac{\mu}{4} \left(1 + 2\sin^2\Phi_0 - \frac{\mu}{16} \right).$$

При $\xi_0 \rightarrow 1$ получаем спектральное распределение излучения заряда по частоте ω :

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\omega} \right| \right) = b \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \left| \left(1 - \frac{2B}{A} \right) \frac{\mu}{A} \sin(\omega) \cos^2(\omega) - \frac{B \sin(\omega)}{A} \right|. \quad (62)$$

Спектр излучения заряда в единичный телесный угол определяется формулой

$$\operatorname{Re} \left(\left| \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\Omega} \right| \right) = \frac{b}{2\pi} \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \left| \left(\frac{1}{2} - \frac{B}{A} \right) \frac{\mu}{A} \sin(2\Phi_0) - \frac{B \operatorname{tg}\Phi_0}{A} \right|. \quad (63)$$

Фазово-угловое распределение этого спектра излучения имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left(\left| \frac{d^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\Phi d\Omega} \right| \right) &= \frac{b}{2\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \left(\left(\frac{2B}{A} - 1 \right) + \right. \right. \\ &+ \left. \left(\frac{2}{A} - 1 \right) \frac{\mu}{A} \right) \frac{\mu}{A} \sin^2(2\Phi_0) - \\ &- \frac{\mu \sin(2\Phi_0)B}{A^2} + \left(1 - \frac{2B}{A} \right) \frac{\mu}{A} \cos(2\Phi_0) - \\ &\left. - \frac{\sec^2(\Phi_0)B}{A} \right|. \end{aligned} \quad (64)$$

В равенстве (64) при условии $\xi_0 \rightarrow 1$ получаем частотно-угловое распределение спектра излучения:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left(\left| \frac{d^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t_0)}{d\omega d\Omega} \right| \right) &= \frac{b}{2\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \left(\left(\frac{2B}{A} - 1 \right) + \right. \right. \\ &+ \left. \left(\frac{2}{A} - 1 \right) \frac{\mu}{A} \right) \frac{\mu}{A} \sin^2(2\omega) - \\ &- \frac{\mu \sin(2\omega)B}{A^2} + \left(1 - \frac{2B}{A} \right) \frac{\mu}{A} \cos(2\omega) - \\ &\left. - \frac{\sec^2(\omega)B}{A} \right|. \end{aligned} \quad (65)$$

Спектральная плотность излучения имеет вид

$$S(\omega) = b \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \frac{B^2}{A^2} \cos^2(\omega\xi_0) \right|. \quad (66)$$

Фазовое распределение данной спектральной плотности излучения выражается формулой

$$\begin{aligned} \frac{dS(\omega)}{d\Phi_0} &= b \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \frac{\sin(2\omega\xi_0)B}{2A} \times \right. \\ &\times \left. \left(2\mu \cos^2(\omega\xi_0) - \frac{2\mu \cos^2(\omega\xi_0)B}{A} - 2B \right) \right|. \end{aligned} \quad (67)$$

Спектральная плотность излучения в единичный телесный угол определяется выражением

$$\begin{aligned} \frac{dS(\omega)}{d\Omega} &= \frac{b}{2\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \frac{2 \cos(\omega\xi_0)B}{2A} \times \right. \\ &\times \left. \left(2\mu \cos^2(\omega\xi_0) - \frac{2\mu \cos^2(\omega\xi_0)B}{A} - 2B \right) \right|. \end{aligned} \quad (68)$$

Дифференцируя выражение (65) по Φ_0 , получаем фазово-угловое распределение

спектральной плотности излучения заряженной частицы:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 S(\omega)}{d\Phi_0 d\Omega} &= \frac{b}{2\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \frac{2\mu}{A} \sin \Phi_0 \times \right. \\ &\times \left. \left(\left(1 - \frac{2B}{A} - \frac{4B^2}{A^2} + \frac{2B}{A} \right) \mu \cos^4(\Phi_0) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \left(\left(\frac{B}{A} - 1 \right) \frac{2\mu}{3} - \frac{B}{A} - 1 \right) 3B \cos^2(\Phi_0) + B^2 \right) \right|. \end{aligned} \quad (69)$$

Из распределения (69) при $\xi_0 \rightarrow 1$ получаем частотно-угловое распределение спектральной плотности излучения заряда:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 S(\omega)}{d\omega d\Omega} &= \frac{b}{2\pi} \left| \sum_{\omega=-\infty}^{\omega=\infty} \frac{2\mu}{A} \sin(\omega) \times \right. \\ &\times \left. \left(\left(1 - \frac{2B}{A} - \frac{4B^2}{A^2} + \frac{2B}{A} \right) \mu \cos^4(\omega) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \left(\left(\frac{B}{A} - 1 \right) \frac{2\mu}{3} - \frac{B}{A} - 1 \right) 3B \cos^2(\omega) + B^2 \right) \right|. \end{aligned} \quad (70)$$

Заключение

В работе приведены спектрально-угловые характеристики излучения заряженной частицы в поле плоской монохроматической электромагнитной волны. Получены выражения для средней мощности излучения релятивистского заряда. Вычислена интенсивность излучения заряженной частицы в поле линейно-поляризованной электромагнитной волны. Для интенсивности указанного излучения $I = 10^{19}$ Вт·см⁻² получены фазовые портреты фазовых и фазово-угловых распределений интенсивности и мощности излучения частицы от начальной фазы.

Показано, что без учета радиационного трения частица в среднем не ускоряется и не замедляется, следовательно, выполняется теорема Лоусона – Вудворда, согласно которой области ускорения сменяются областями замедления, и в среднем энергия электрона не растет. Для круговой поляризации Фурье-образ напряженности электрического поля излучения частицы сохраняет информацию только об амплитудах спектральных составляющих, тогда как

информация о фазе теряется.

Показано также, что для случая круговой поляризации интенсивность ее волны равна интенсивности излучения заряженной частицы ($I_{em} = I_{cir}$). Для плоской монохроматической линейно-поляризованной электромагнитной волны при превышении

релятивистского значения ее интенсивности, равного $1,37 \cdot 10^{18}$ Вт·см⁻², интенсивность излучения заряда становится релятивистской и зависит от величины I_{lin}/I_{rel} [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания Министерства образования и науки РФ (проект № 1269).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Андреев С.Н., Макаров В.П., Рухадзе А.А.** О движении заряженной частицы в плоской монохроматической электромагнитной волне // Квантовая электроника. 2009. Т. 39. № 1. С. 68–72.

[2] **Френкель Я.И.** Собрание избранных трудов в 3 тт. Т. 1. Электродинамика (общая теория электричества), М.-Л.: Издательство АН СССР, 1956. 428 с.

[3] **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Теория поля. 8-е изд., стереотипное. М.: Физматлит, 2012. 536 с.

[4] **Копытов Г.Ф., Мартынов А.А., Акинцов Н.С.** Движение заряженной частицы в поле плоской эллиптически-поляризованной электромагнитной волны // Фундаментальные ис-

следования. 2014. № 9. Ч. 5. С. 1013–1018.

[5] **Галкин А.Л., Коробкин В.В., Романовский М.Ю., Ширяев О.Б.** Релятивистское движение и излучение электрона в поле интенсивного лазерного импульса // Квантовая электроника. 2007. Т. 37. № 10. С. 903–909.

[6] **Ахманов С.А., Никитин С.Ю.** Физическая оптика: 2-е изд. М.: Наука, 2004. 654 с.

[7] **Ньютон Р.** Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 607 с.

[8] **Аззам Р., Башара Н.** Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981. 583 с.

[9] **Багров В.Г., Бисноватый-Коган Г.С., Бородовицын В.А. и др.** Теория излучения релятивистских частиц. М.: Физматлит, 2002. 576 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АКИНЦОВ Николай Сергеевич – преподаватель кафедры радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
akintsov777@mail.ru

КОПЫТОВ Геннадий Филиппович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
g137@mail.ru

МАРТЫНОВ Александр Алексеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
martynov159@yandex.ru

Akintsov N.S., Kopytov G.F., Martynov A.A. SPECTRAL AND ANGULAR RADIATION CHARACTERISTICS OF A CHARGED PARTICLE IN THE PLANE MONOCHROMATIC ELECTROMAGNETIC WAVE.

Relying upon the solution of the relativistic equation of a charged particle motion that was obtained by A.A. Rukhadze et al., the spectral and angular characteristics of ultra-relativistic intensive radiation of a relativistic charged particle have been studied, the particle being linearly accelerated by a superpower laser pulse. The case where the particle propagates in vacuum without brake light was examined. The interaction of the charged particle with the large-amplitude ultra-short laser pulse was analyzed in details using the relativistic consideration. Formulae for the average radiated power of the relativistic charged particle, depending on the initial conditions, the electromagnetic-wave amplitude, intensity and polarization were



obtained. For the case where the laser pulse can be represented by a monochromatic plane wave, analytical expressions for the radiation characteristics were put forward and the phase-angular distributions of relativistic radiated power and intensity were found. The Fourier transform of the electric-intensity radiation field of the charged particle and the particle's spectral density radiation in the field of a plane monochromatic wave for different types of polarization (linear and circular ones) were determined.

PLANE ELECTROMAGNETIC WAVE, RADIATED POWER, RADIATION INTENSITY, ULTRASHORT LASER PULSE.

REFERENCES

- [1] **S.N. Andreyev, V.P. Makarov, A.A. Rukhadze**, On the motion of a charged particle in a plane monochromatic electromagnetic wave, *Quantum Electronics*. 39(1) (2009) 68–72.
- [2] **Ya.I. Frenkel**, *Sobraniye izbrannykh trudov: v 3 t. T.1, Electrodynamics. [General Theory of Electricity]*, Moscow, Leningrad, Izdatelstvo AN SSSR, 1956.
- [3] **L.D. Landau, E.M. Lifshits**, *Teoriya polya [The Field Theory]*, Moscow, Nauka, 2004.
- [4] **G.F. Kopytov, A.A. Martynov, N.S. Akintsov**, A charged particle move in the field of the plane elliptically polarized electromagnetic wave, *Fundamentalnyye issledovaniya, Fiziko-matematicheskiye nauki*. 9. Ch. 5(2014) 1013–1018.
- [5] **A.L. Galkin, V.V. Korobkin, M.Yu. Romanovskiy, O.B. Shirayev**, Relyativistskoye dvizheniye i izlucheniye elektrona v pole intensivnogo lazernogo impulsa // *Kvantovaya elektronika*. 37(10) (2007) 903–909.
- [6] **S.A. Akhmanov, S.Yu. Nikitin**, *Fizicheskaya optika: 2-ye izd. [Physical Optics]*, Moscow, Nauka, 2004.
- [7] **R. Newton**, *Teoriya rasseyaniya voln i chastits [Scattering Theory of Waves and Particles]*, Moscow, Mir, 1967.
- [8] **R.M. Azzam, N.M. Bashara**, *Ellipsometriya i polarizovannyi svet [Ellipsometry and Polarized Light]*, Moscow, Mir, 1981.
- [9] **V.G. Bagrov, G.S. Bisnovatyy-Kogan, V.A. Borodovitsyn**, *Teoriya izlucheniya relativistskih chastits [Radiation Theory of Relativistic Particles]*, Moscow, Fizmatlit, 2002.

THE AUTHORS

AKINTSOV Nikolay S.

Kuban State University

149 Stavropolskaya St., Office 421, Krasnodar, 350040, Russian Federation.
akintsov777@mail.ru

KOPYTOV Gennadii F.

Kuban State University

149 Stavropolskaya St., Office 421, Krasnodar, 350040, Russian Federation.
g137@mail.ru

MARTYNOV Alexander A.

Kuban State University

149 Stavropolskaya St., Office 421, Krasnodar, 350040, Russian Federation.
martynov159@yandex.ru

DOI: 10.5862/JPM.230.15

УДК 539.12:537.63:537.868

*Н.С. Акинцов, В.А. Исаев,
Г.Ф. Копытов, А.А. Мартынов*

Кубанский государственный университет, г. Краснодар

ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ЧАСТОТНО-МОДУЛИРОВАННОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ И ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В работе проведен анализ задачи о движении заряженной частицы во внешнем поле частотно-модулированной электромагнитной волны и в постоянном магнитном поле и представлены точные решения соответствующих уравнений. Указанная задача важна при исследовании взаимодействия лазерных импульсов большой интенсивности с твердыми мишенями, а также в связи с практической разработкой многочастотных лазеров и развитием техники модуляции лазерного излучения. Получены формулы для средней кинетической энергии релятивистской частицы в зависимости от начальных условий, амплитуды электромагнитной волны, интенсивности волны и ее параметра поляризации. Исследованы различные случаи начальных условий движения заряженной частицы и поляризации волны. Полученные результаты могут использоваться в исследованиях высокотемпературной плазмы, образующейся на поверхности мишени, и при поисках новых режимов взаимодействия лазер-плазма.

ПЛОСКАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ВОЛНА, ЗАРЯЖЕННАЯ ЧАСТИЦА, УЛЬТРАКОРОТКИЙ ЛАЗЕРНЫЙ ИМПУЛЬС.

Введение

Метод лазерного индуцированного ускорения заряженных частиц вызвал значительный интерес к пионерской работе Т. Таджима и Дж. Даусона [1] среди исследователей всего мира. В настоящее время представляется актуальной задача ускорения заряженных частиц плазмы ультракороткими лазерными импульсами большой интенсивности [2 – 5]. С развитием лазерных технологий стало возможным получение тераваттных и петаваттных лазерных импульсов [6 – 10], которые можно использовать для исследования взаимодействия сильных остросфокусированных световых импульсов с заряженными частицами в плазме. Развитие таких физико-технических областей, как физика плазмы, астрофизика, мощная релятивистская СВЧ-электроника, ускорительная техника создают предпосылки для изучения взаимодействия заряженных частиц с частотно-модулированными электромагнитными

волнами. Особая роль в таких взаимодействиях принадлежит релятивистским заряженным частицам в сильных электромагнитных полях. Знание энергетических характеристик заряженной частицы в поле частотно-модулированной электромагнитной волны необходимо в связи с практической разработкой многочастотных лазеров и развитием техники модуляции лазерного излучения.

В настоящей работе рассматривается динамика электрона в интенсивном частотно-модулированном электромагнитном поле эллиптической поляризации при наличии постоянного однородного магнитного поля. Изучение особенностей взаимодействия заряженных частиц со сверхкороткими лазерными импульсами фемтосекундной длительности и с излучениями интенсивностью до 10^{22} Вт/см² является одним из основных направлений лазерной физики в настоящее время.

Задача о движении заряженной частицы в поле плоской частотно-модулированной

электромагнитной волны была сформулирована и решена для случая линейной и круговой поляризации в работе [11]. Однако авторы не провели усреднения скорости, импульса, кинетической энергии частицы по периоду колебаний в поле плоской частотно-модулированной электромагнитной волны при наличии постоянного однородного магнитного поля, что представляет несомненный научный и практический интерес.

Цель настоящей работы – анализ движения частицы во внешнем поле произвольно поляризованной частотно-модулированной электромагнитной волны большой интенсивности при наличии внешнего постоянного однородного магнитного поля. В частности, необходим также вывод формул для средней кинетической энергии частицы, усредненной по периоду ее колебаний.

Постановка задачи

Уравнение движения заряженной частицы с массой m и зарядом q в высокочастотном лазерном электромагнитном поле при наличии постоянного однородного магнитного поля \mathbf{H}_0 имеет следующий вид [9]:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}[\mathbf{V} \times \mathbf{H}_z], \quad (1)$$

где \mathbf{p} – импульс заряженной частицы; \mathbf{E} – напряженность электрического лазерного поля излучения; $\mathbf{H}_z = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}$ – напряженность суммарного магнитного поля, включающего однородное постоянное магнитное поле и магнитную составляющую поля лазерного излучения; q – заряд частицы.

Уравнение (1) дополняется начальными условиями для скорости и координат частицы:

$$\mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0, \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0.$$

Импульс частицы и ее скорость связаны следующим равенством [9]:

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{V}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}. \quad (2)$$

Изменение энергии частицы

$$\varepsilon = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}} = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \quad (3)$$

определяется уравнением

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = q\mathbf{E}\mathbf{V}. \quad (4)$$

Энергия, импульс и скорость частицы связаны соотношением

$$\mathbf{p} = \frac{\varepsilon\mathbf{V}}{c^2}. \quad (5)$$

В данной работе полагается, что фаза несущей электромагнитной волны модулирована по гармоническому закону:

$$\varphi = \mu \sin(\omega'\xi + \psi),$$

где $\mu = \Delta\omega / \omega'$ – индекс модуляции, равный отношению девиации частоты $\Delta\omega$ к частоте модулирующей волны ω' ; ψ – постоянная фаза;

$$\xi = t - z / c.$$

Будем считать, что плоская частотно-модулированная электромагнитная волна распространяется вдоль оси z , а напряженность $\mathbf{H}_0 = \mathbf{k}H_0$ постоянного однородного магнитного поля также направлена по оси z (\mathbf{k} – орт оси z). В этом случае компоненты векторов электрического (\mathbf{E}) и магнитного (\mathbf{H}) полей для плоской частотно-модулированной электромагнитной волны определяются выражениями [11]:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_x = H_y = b_x \exp(-i(\omega\xi + \alpha + \mu \sin(\omega'\xi + \psi))), \\ E_y = -H_x = fb_y \exp(-i(\omega\xi + \alpha + \mu \sin(\omega'\xi + \psi))), \\ E_z = H_z = 0, \end{array} \right. \quad (6)$$

где ω – частота несущей волны; α – постоянная фаза; оси x и y совпадают с направлением полуосей эллипса поляризации волны b_x и b_y , причем $b_x \geq b_y \geq 0$; $f = \pm 1$ – параметр поляризации, причем верхний знак для E_y соответствует правой поляризации, а нижний – левой [14, 15].

Если использовать преобразование Яко-

би – Ангера, то реальная часть выражений (6) принимает вид

$$\begin{cases} E_x = H_y = b_x \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(\mu) \cos \Phi_n, \\ E_y = -H_x = fb_y \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(\mu) \cos \Phi_n, \\ E_z = H_z = 0, \end{cases} \quad (7)$$

где $J_n(\mu)$ функция Бесселя n -го порядка;

$$\Phi_n = (\omega + n\omega')\xi + \alpha + n\psi.$$

Как видно из формул (7), спектр частотно-модулированной электромагнитной волны симметричен по частоте:

$$\omega_n = \omega + n\omega'$$

и при этом не ограничен. Однако при $n \gg \mu$ функции Бесселя становятся пренебрежимо малыми, и поэтому ширину спектра можно ограничить. Практическая ширина спектра определяется из выражения

$$\Delta\omega = 2(\mu + 1)\omega',$$

т. е. в разложениях (7) индекс n можно менять в пределах от $-N$ до N , где число $N \approx \mu + 1$. Так, при $\mu \gg 1$, $N = 1$, ширина спектра $\Delta\omega = 2\omega'$ совпадает с шириной спектра амплитудно-модулированной электромагнитной волны [11], т. е. частотно-модулированная электромагнитная волна в этом случае переходит в амплитудно-модулированную. При значении $\mu \gg 1$, $N = \mu$ ширина спектра равна удвоенному значению девиации частоты:

$$\Delta\omega = 2\Delta\omega_n.$$

Решение уравнения движения заряда

Решение уравнений (1) и (4) с \mathbf{E} и \mathbf{H} из выражений (7) имеет вид

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{qb_x}{\omega} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_n}{(1 + m\eta)} + \frac{q}{c} H_0 y + \chi_x, \\ p_y &= \frac{fqby}{\omega} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_n}{(1 + m\eta)} - \frac{q}{c} H_0 x + \chi_y. \end{aligned} \quad (8)$$

где $\eta = \omega' / \omega$.

В уравнениях (8) перейдем к дифференцированию по ξ :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{qb_x c}{\omega\gamma} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_n}{(1 + m\eta)} + \omega_c y + \frac{c}{\gamma} \chi_x, \\ \dot{y} &= \frac{fqby c}{\omega\gamma} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_n}{(1 + m\eta)} - \omega_c x + \frac{c}{\gamma} \chi_y, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\omega_c = qH_0 / \gamma$ – циклотронная частота.

Постоянные χ_x , χ_y и γ в уравнениях (9) с учетом формул (3) и (7) определяются начальной фазой волны

$$\Phi_n(0) = \Phi_{n0} = -(1 + m\eta)kz_0 + \alpha + n\psi$$

(k – волновое число) и начальной скоростью частицы $\mathbf{V}_0 = 0$:

$$\begin{aligned} \chi_x &= \frac{mV_{x0}}{\sqrt{1 - \frac{V_0^2}{c^2}}} - \\ &- \frac{qb_x}{\omega} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_{n0}}{(1 + m\eta)} - \frac{q}{c} H_0 y_0, \\ \chi_y &= \frac{mV_{y0}}{\sqrt{1 - \frac{V_0^2}{c^2}}} - \\ &- \frac{fqby}{\omega} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_{n0}}{(1 + m\eta)} + \frac{q}{c} H_0 x_0, \\ \gamma &= \frac{mc \left(1 - \frac{V_{z0}}{c}\right)}{\sqrt{1 - \frac{V_0^2}{c^2}}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Преобразуя систему дифференциальных уравнений (9), получаем следующий вид уравнений:

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \omega_c^2 x &= \frac{qcb_x}{\gamma} \sum_{n=-N}^N J_n(\mu) \cos \Phi_n + \\ &+ \frac{fq\omega_c b_y}{\gamma k} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_n}{(1 + m\eta)} + \frac{\omega_c c}{\gamma} \chi_y, \\ \ddot{y} + \omega_c^2 y &= \frac{fqcb_y}{\gamma} \sum_{n=-N}^N J_n(\mu) \cos \Phi_n - \\ &- \frac{q\omega_c b_x}{\gamma k} \sum_{n=-N}^N \frac{J_n(\mu) \sin \Phi_n}{(1 + m\eta)} - \frac{\omega_c c}{\gamma} \chi_x. \end{aligned} \quad (11)$$

Решение дифференциальных уравнений второго порядка (11) ищем в виде суммы решений однородного уравнения и частного решения неоднородного уравнения с учетом начальных условий. Для координат

х и у получаем следующее решения:

$$\begin{aligned}
 x &= \left(\frac{qb_x \omega}{\gamma k} \sum_{n=-N}^{n=N} Z_n + \frac{\omega \chi_y}{\omega_c \gamma k} \right) \cos \Phi_c + \\
 &+ \frac{fqb_y \omega}{\gamma k} \sum_{n=-N}^{n=N} Z_n \sin \Phi_c - \frac{fqb_y \omega_c}{\gamma k} \times \\
 &\times \sum_{n=-N}^{n=N} \frac{Z_n}{(1+m\eta)} \sin \Phi_n - \frac{qb_x \omega}{\gamma k} \times \\
 &\times \sum_{n=-N}^{n=N} Z_n \cos \Phi_n + \frac{\omega \chi_y}{\omega_c \gamma k}; \quad (12) \\
 y &= \left(\frac{fqb_y \omega}{\gamma k} \sum_{n=-N}^N Z_n + \frac{\omega \chi_x}{\omega_c \gamma k} \right) \cos \Phi_c - \\
 &- \frac{qb_x \omega}{\gamma k} \sum_{n=-N}^N Z_n \sin \Phi_c - \frac{fqb_y \omega}{\gamma k} \sum_{n=-N}^N Z_n \cos \Phi_n + \\
 &+ \frac{qb_x \omega_c}{\gamma k} \sum_{n=-N}^N \frac{Z_n}{(1+m\eta)} \sin \Phi_n - \frac{\omega \chi_x}{\omega_c \gamma k},
 \end{aligned}$$

где $k = \omega / c$; n – порядок функции Бесселя;

$$\Phi_c = \omega_c t; \quad Z_n = J_n(\mu) / (\omega^2(1+m\eta)^2 - \omega_c^2).$$

Используя (8) и (12), получаем выражения для компонент p_x и p_y импульса частицы:

$$\begin{aligned}
 p_x &= \sum_{n=-N}^N A_n \sin \Phi_n + B \cos \Phi_c + \\
 &+ C \sin \Phi_c + \sum_{n=-N}^N D_n \cos \Phi_n, \quad (13) \\
 p_y &= \sum_{n=-N}^N K_n \sin \Phi_n + F \cos \Phi_c + \\
 &+ G \sin \Phi_c + \sum_{n=-N}^N I_n \cos \Phi_n,
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 A_n &= \frac{qb_x}{\omega} Z_n \omega^2 (1+m\eta); \\
 B &= fqb_y \omega_c \sum_{n=-N}^N Z_n + \chi_x; \quad (14) \\
 C &= -qb_x \omega_c \sum_{n=-N}^N Z_n; \quad D_n = -fqb_y \omega_c Z_n; \\
 K_n &= \frac{fqb_y}{\omega} Z_n \omega^2 (1+m\eta); \\
 F &= \chi_y - qb_x \omega_c \sum_{n=-N}^N Z_n;
 \end{aligned}$$

$$G = -fqb_y \omega_c \sum_{n=-N}^{n=N} Z_n; \quad I_n = qb_x \omega_c Z_n.$$

Из формул (3) и (4) находим z -компоненту импульса частицы:

$$p_z = \gamma g, \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned}
 g &= h + \frac{1}{4\gamma^2} \times \\
 &\times \sum_{n=-N}^N (D_n^2 - A_n^2 + I_n^2 - K_n^2) \cos(2\Phi_n) + \\
 &+ \frac{1}{2\gamma^2} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (A_n A_{n_B} + K_n K_{n_B}) \sin \Phi_n \sin \Phi_{n_B} + \\
 &+ \frac{1}{\gamma^2} (B \cos \Phi_c + C \sin \Phi_c) \sum_{n=-N}^N A_n \sin \Phi_n + \\
 &+ \frac{1}{\gamma^2} (F \cos \Phi_c + G \sin \Phi_c) \sum_{n=-N}^N K_n \sin \Phi_n + \\
 &+ \frac{1}{2\gamma^2} \sum_{n=-N}^N (A_n D_n + I_n K_n) \sin(2\Phi_n) + \quad (16) \\
 &+ \frac{1}{\gamma^2} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (A_n D_{n_B} + K_n I_{n_B}) \sin \Phi_n \sin \Phi_{n_B} + \\
 &+ \frac{1}{4\gamma^2} (B^2 - C^2 + F^2 - G^2) \cos(2\Phi_c) + \\
 &+ \frac{1}{2\gamma^2} (BC + FG) \sin(2\Phi_c) + \\
 &+ \frac{1}{\gamma^2} (B \cos \Phi_c + C \sin \Phi_c) \sum_{n=-N}^N D_n \cos \Phi_n + \\
 &+ \frac{1}{\gamma^2} (F \cos \Phi_c + G \sin \Phi_c) \sum_{n=-N}^N I_n \cos \Phi_n + \\
 &+ \frac{1}{2\gamma^2} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (D_n D_{n_B} + I_n I_{n_B}) \cos \Phi_n \cos \Phi_{n_B},
 \end{aligned}$$

при этом

$$\begin{aligned}
 h &= \frac{1}{2} \left[\frac{m^2 c^2}{\gamma^2} - 1 + \frac{1}{2\gamma^2} \left(\sum_{n=-N}^N (A_n^2 + D_n^2 + \right. \right. \\
 &\left. \left. + K_n^2 + I_n^2) + B^2 + C^2 + F^2 + G^2 \right) \right], \quad (17)
 \end{aligned}$$

где $\Phi_k = (\omega + n_B \omega') \xi + \alpha + n_B \psi$; n_B – порядок функции Бесселя.

С помощью формул (3) и (4) найдем выражение для энергии частицы:

$$\varepsilon = c\gamma(1 + g). \quad (18)$$

Используя выражения (5), (13) и (15), получаем параметрическое представление скорости частицы по параметру ξ :

$$\begin{aligned} V_x &= \frac{dx}{dt} = \frac{c}{(1+g)\gamma} \left(\sum_{n=-N}^N A_n \sin \Phi_n + \right. \\ & \left. B \cos \Phi_c + C \sin \Phi_c + \sum_{n=-N}^N D_n \cos \Phi_n \right), \\ V_y &= \frac{dy}{dt} = \frac{c}{(1+g)\gamma} \left(\sum_{n=-N}^N E_n \sin \Phi_n + \right. \\ & \left. F \cos \Phi_c + G \sin \Phi_c + \sum_{n=-N}^N I_n \cos \Phi_n \right), \\ V_z &= \frac{dz}{dt} = \frac{cg}{1+g}. \end{aligned} \quad (19)$$

Из уравнений (11) и выражения (18) следует, что движение частицы во внешнем поле частотно-модулированной электромагнитной волны при наличии постоянного однородного магнитного поля, направленного вдоль оси z , представляет собой суперпозицию движения с некоторой постоянной скоростью V_z и колебательного движения с частотой

$$\tilde{\omega} = \omega(1 + m\eta) / (1 + h),$$

отличной от частоты поля ω , частоты модуляции ω' и циклотронной частоты ω_c .

Тогда, интегрируя равенство (15), получаем уравнение движения вдоль оси z :

$$z(t) = \tilde{z} + \tilde{V}_z t + \theta(t) + \eta(t), \quad (20)$$

где \tilde{z} , \tilde{V}_z – постоянные;

$$\begin{aligned} \theta(t) &= \sum_{n=-N}^N \theta_n(t), \quad \eta(t) = \sum_{n=-N}^N \eta_n(t), \\ \theta(t + \tilde{T}_n) &= \theta(t), \quad \eta(t + \tilde{T}_c) = \eta(t), \end{aligned} \quad (21)$$

причем $\theta(t)$, $\eta(t)$ – периодические функции с периодами

$$\tilde{T}_n = 2\pi / \tilde{\omega}_n, \quad \tilde{T}_c = 2\pi / \omega_c.$$

В формуле (20)

$$\tilde{V}_z = \frac{ch}{1+h}. \quad (22)$$

Из выражений (19) следует, что g является также суммой $2N + 1$ периодических функций, с периодами \tilde{T}_n и \tilde{T}_c . Период \tilde{T}_n осцилляции частицы в поле плоской частотно-модулированной электромагнитной волны и период \tilde{T}_c осцилляции частицы в магнитном поле определяются формулами

$$\Phi(t + \tilde{T}_n) = \Phi(t), \quad \Phi_c(t + \tilde{T}_c) = \Phi_c(t),$$

из которых, при учете выражений (6), (19) и уравнения (20), следует, что

$$\begin{aligned} \tilde{T}_n &= \frac{2\pi(1+h)}{\omega(1+m\eta)} = T \frac{(1+h)}{(1+m\eta)}; \\ \tilde{T}_c &= \frac{2\pi}{\omega_c}. \end{aligned} \quad (23)$$

Таким образом, движение частицы представляет собой суперпозицию нескольких гармонических колебаний с разными периодами: \tilde{T}_n и \tilde{T}_c . Когда частота модуляции ω' равна нулю, получаем периоды осцилляции частицы, выражения для которых были получены в работе [13].

Движение частицы, усредненное по периоду колебаний

В этом разделе мы приведем результаты усреднения импульса \mathbf{p} и энергии ε частицы по периодам ее колебаний (23) в поле частотно-модулированной электромагнитной волны и постоянном однородном магнитном поле.

Далее вместо переменной времени t введем новые переменные: Φ'_n – полная фаза n -го гармонического колебания, Φ'_c – полная фаза циклотронного колебания;

$$\begin{aligned} \Phi'_n &= \Phi_n(t'); \\ dt' &= \frac{d\Phi'_n}{\omega(1+m\eta)} \frac{1}{1 - V_z(t)/c} = \\ &= \frac{1+g}{\omega(1+m\eta)} d\Phi'_n; \\ \Phi'_c &= \Phi_c(t'); \quad dt' = \frac{d\Phi'_c}{\omega_c}. \end{aligned} \quad (24)$$

Так как движение частицы представляет собой суперпозицию гармонических колебаний с частотами ω_n и ω_c , усреднение будет производиться по формуле

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Phi(t)}^{\Phi(\bar{t})} \frac{1}{\bar{T}_n} \int_{\Phi_c(t)}^{\Phi_c(\bar{t})} f(t') \times \times \frac{1+g}{\omega(1+m\eta)} d\Phi'_n d\Phi'_c, \quad (25)$$

где $f(t')$ – произвольная функция.

Усредняя компоненты (18) скорости частицы, получаем:

$$\bar{V}_x = 0; \quad \bar{V}_y = 0; \quad \bar{V}_z = \frac{ch}{1+h}. \quad (26)$$

Как и следовало ожидать, скорость частицы \bar{V}_z в выражениях (26) соответствует величине \bar{V}_z , даваемой формулой (22).

Из формул (26) следует что, средние поперечные компоненты импульса частицы равны нулю. Для среднего значения продольной составляющей импульса частицы получаем выражение

$$\begin{aligned} \bar{p}_z = \frac{\gamma}{1+h} & \left(h + h^2 + \right. \\ & + \frac{1}{32\gamma^4} \sum_{n=-N}^N (D_n^2 - A_n^2 + I_n^2 - K_n^2)^2 + \\ & + \frac{1}{16\gamma^4} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (A_n A_{n_B} + K_n K_{n_B})^2 + \\ & + \frac{1}{4\gamma^4} (B^2 + C^2) \sum_{n=-N}^N (A_n^2 + D_n^2) + \\ & + \frac{1}{4\gamma^4} (F^2 + G^2) \sum_{n=-N}^N (I_n^2 + K_n^2) + \\ & + \frac{1}{8\gamma^4} \sum_{n=-N}^N (A_n D_n + I_n K_n)^2 + \\ & + \frac{1}{4\gamma^4} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (A_n D_{n_B} + K_n I_{n_B})^2 + \\ & + \frac{1}{32\gamma^4} (B^2 - C^2 + F^2 - G^2)^2 + \\ & + \frac{1}{8\gamma^2} (BC + FG)^2 + \\ & \left. + \frac{1}{16\gamma^4} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (D_n D_{n_B} + I_n I_{n_B})^2 \right). \end{aligned} \quad (27)$$

Средняя энергия $\bar{\epsilon}$ частицы определя-

ется формулой

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon} = \frac{c\gamma}{1+h} & \left((1+h)^2 + \right. \\ & + \frac{1}{32\gamma^4} \sum_{n=-N}^N (D_n^2 - A_n^2 + I_n^2 - K_n^2)^2 + \\ & + \frac{1}{16\gamma^4} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (A_n A_{n_B} + K_n K_{n_B})^2 + \\ & + \frac{1}{4\gamma^4} (B^2 + C^2) \sum_{n=-N}^N (A_n^2 + D_n^2) + \\ & + \frac{1}{4\gamma^4} (F^2 + G^2) \sum_{n=-N}^N (I_n^2 + K_n^2) + \\ & + \frac{1}{8\gamma^4} \sum_{n=-N}^N (A_n D_n + I_n K_n)^2 + \\ & + \frac{1}{4\gamma^4} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (A_n D_{n_B} + K_n I_{n_B})^2 + \\ & + \frac{1}{32\gamma^4} (B^2 - C^2 + F^2 - G^2)^2 + \\ & + \frac{1}{8\gamma^2} (BC + FG)^2 + \\ & \left. + \frac{1}{16\gamma^4} \sum_{\substack{n, n_B=-N \\ n \neq n_B}}^N (D_n D_{n_B} + I_n I_{n_B})^2 \right). \end{aligned} \quad (28)$$

Из этой формулы, с учетом выражения (14), видно, что $\bar{\epsilon}$ зависит от интенсивности волны, ее начальной фазы и поляризации, частоты несущей волны ω , частоты модуляции ω' , циклотронной частоты ω_c и начальной скорости частицы.

Случай произвольной поляризации волны при отсутствии у частицы начальной скорости

В этом разделе рассмотрим случай, когда частица в начальный момент времени покоилась ($\mathbf{V}_0 = 0$) и находилась в точке $(0, 0, z_0)$.

Из формулы (13) выразим постоянные χ_x, χ_y, γ , учитывая, что $\Phi_n(0) = \Phi_{n0} = -(1+m\eta)kz_0 + \alpha + n\psi, \Phi_c(0) = \Phi_{c0} = 0$:

$$\chi_x = - \sum_{n=-N}^N A_n \sin \Phi_{n0} + \quad (29)$$

$$\begin{aligned} & + \sum_{n=-N}^N D_n (1 - \cos \Phi_{n0}), \\ \chi_y = & - \sum_{n=-N}^N K_n \sin \Phi_{n0} + \\ & + \sum_{n=-N}^N I_n (1 - \cos \Phi_{n0}). \end{aligned} \quad (29)$$

Для волны с произвольной поляризацией имеем следующее равенство [14]:

$$b_x^2 \pm b_y^2 = \rho^2 b^2, \quad (30)$$

где ρ – параметр эллиптичности ($\rho = \pm 1$ соответствует линейной поляризации, $\rho = \pm 1/\sqrt{2}$ – круговой, в остальных случаях ($0 \leq \rho \leq 1$) – эллиптической).

Из выражения (17) получаем значение h в начальный момент времени:

$$\begin{aligned} h = \frac{q^2 \rho^2 b^2}{4m^2 c^2} & \left[\sum_{n=-N}^N Z_n^2 ((\omega^2(1+m\eta)^2 - \omega_c^2) \times \right. \\ & \left. \times \sin^2 \Phi_{n0} + (\omega^2(1+m\eta)^2 + 3\omega_c^2) \right]. \end{aligned} \quad (31)$$

Пусть

$$\omega_c = \delta \omega, \quad (32)$$

где δ – отношение частот ω_c и ω , причем $\delta \in [0; 1) \cup (1; +\infty)$.

Поскольку в данной задаче рассматривается ускорение заряженной частицы в высокочастотном лазерном поле при наличии постоянного однородного магнитного поля, но без учета радиационного трения частицы, энергия частицы должна становиться бесконечно большой вследствие того, что при $\delta = 1$ выполняется условие циклотронного авторезонанса. Однако бесконечно большое значение энергии невозможно в реальных условиях, поэтому указанный случай исключается из рассмотрения.

Подставляя соотношение (32) в выражение (31), получаем, что

$$h = \frac{\sigma}{4} \sum_{n=-N}^N [J_n(\mu) \tilde{Z}_n \sin^2 \Phi_{n0} + \tilde{Z}_n^2 T_n], \quad (33)$$

где

$$\tilde{Z}_n = J_n(\mu) / ((1+m\eta)^2 - \delta^2);$$

$$T_n = (1+m\eta)^2 + 3\delta^2;$$

$$\sigma = \frac{q^2 \rho^2 b^2}{m^2 c^2 \omega^2} = \frac{2q^2}{\pi m^2 c^5} I \lambda^2, \quad (34)$$

при этом $I = c\rho^2 b^2 / 4\pi$ – интенсивность эллиптически поляризованной электромагнитной волны, $\lambda = 2\pi c / \omega$ – длина волны.

Подставляя выражения (29) – (34) в формулу (28), получаем среднюю энергию первоначально покоящейся частицы в волне эллиптической поляризации:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} = & \frac{c\gamma}{32(1+h)} \left(32(1+h)^2 + \right. \\ & + \sigma^2 \sum_{n=-N}^N \tilde{Z}_n^4 (S_n^2 + 8\delta^2 N_n) + \\ & + 4\sigma^2 \sum_{n=-N}^N \tilde{Z}_n^4 (Q_n + 2S_n N_n) \sin^2 \Phi_{n0} + \\ & \left. + \sigma^2 \sum_{n=-N}^N \tilde{Z}_n^4 S_n^2 \sin^4 \Phi_{n0} \right). \end{aligned} \quad (35)$$

Как видно из этого выражения, средняя энергия частицы зависит от начальных фаз, амплитуды, интенсивности и поляризации электромагнитной волны, от частот несущей волны, модуляции и циклотронной частоты.

Усредненная дополнительно по начальной фазе Φ_{n0} , энергия $\langle \bar{\varepsilon} \rangle$ заряженной частицы в поле плоской частотно-модулированной электромагнитной волны и постоянном однородном магнитном поле определяется выражением

$$\begin{aligned} \langle \bar{\varepsilon} \rangle - mc^2 = & mc^2 \left(\frac{\sigma}{8} P_n + 4R_n \times \right. \\ & \times \left(\sqrt{\frac{R_n}{M_n}} + \frac{\sigma J_n(\mu) \tilde{Z}_n}{2R_n} - 1 \right) + \\ & \left. + \frac{\sigma^2 \tilde{Z}_n^4 G_n}{8\sqrt{R_n M_n}} + \frac{\sigma \tilde{Z}_n^3 H_n}{2J_n(\mu)} \left(1 - \sqrt{\frac{R_n}{M_n}} \right) \right), \end{aligned} \quad (36)$$

где

$$M_n = \sigma J_n(\mu) \tilde{Z}_n + \sigma \tilde{Z}_n^2 T_n + 4,$$

$$R_n = \sigma \tilde{Z}_n^2 T_n + 4, \quad P_n = \tilde{Z}_n (J_n(\mu) + 2\tilde{Z}_n T_n),$$

$$G_n = S_n^2 + 8\delta^2 N_n, \quad H_n = Q_n + 2S_n N_n.$$

Полученные формулы (28), (29), (33), (35) и (36) для средней кинетической энергии частицы содержат явную зависимость от начальной скорости частицы, амплитуды электромагнитной волны, индекса частотной модуляции, частот несущей волны и модуляции, циклотронной частоты, интенсивности и ее поляризации. Следовательно, они позволяют сделать практические вычисления. Когда $\mu \ll 1$, $N = 1$, формулы (28), (29), (33), (35) и (36) принимают вид, который был получен в работе [13].

Заключение

В работе приведено точное аналитическое решение уравнений движения заряженной частицы во внешнем поле частотно-модулированной электромагнитной волны и постоянном однородном магнитном поле. Приведена формула зависимости скорости заряженной частицы от интенсивности плоской частотно-модулированной электромагнитной волны произвольной поляризации. Указанная скорость зависит от амплитуды и параметра поляризации электромагнитной волны, несущей частоты, частоты модуляции и циклотронной частоты.

В частотно-модулированной электромагнитной волне (7) поля \mathbf{E} и \mathbf{H} являются периодическими и их среднее значение равно нулю. Можно было бы предположить, что частотно-модулированная электромагнитная волна и постоянное однородное магнитное поле оказывают знакопеременное воздействие на заряженную частицу и среднее отклонение, вызванное этим воздействием на частицу, тоже равно нулю. Однако это предположение оказывается неверным. В частности, в поле плоской частотно-модулированной электромагнитной волны частица совершает систематический дрейф по направлению распространения электро-

магнитного поля. Это подтверждено аналитическим расчетом компонент скорости и импульса, а также средней кинетической энергии частицы.

При увеличении интенсивности поля, согласно формуле (23), частота колебательного движения частицы, частота модуляции и циклотронная частота стремятся к нулю. Показано, что усредненное по периодам колебаний \tilde{T}_n и \tilde{T}_c перемещение частицы представляет собой суперпозицию движения с постоянной скоростью и колебательного движения с несущей частотой, циклотронной частотой и n -го колебательного движения с частотой ω_n . При отсутствии частотной модуляции все формулы переходят в соответствующие формулы, которые представлены в работе [13]. Решения получены в явной зависимости от начальных данных, амплитуды электромагнитной волны, частоты несущей волны, частоты модуляции, циклотронной частоты, интенсивности волны и ее поляризационного параметра, что позволяет применять полученные решения в практических расчетах.

Практическая значимость проведенного исследования заключается в том, что полученные результаты можно использовать для разработки устройств релятивистской электроники. Кроме того, они могут представлять интерес для астрофизических исследований. Приведенные результаты также могут использоваться для интерпретации экспериментов с плазмой, помещенной во внешнее частотно-модулированное электромагнитное поле, когда имеется однородное магнитное поле.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № 1269).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Tajima T., Dawson J.M. Laser electron accelerator // Phys. Rev. Lett. 1979. Vol. 43. No. 4. Pp. 267–269.
[2] d’Humieres E., Lefebvre E., Gremillet L.,

Malka V. Proton acceleration in high-intensity laser interaction with thin foils // Phys. Plasmas. 2005. Vol. 12. No. 9. P. 099902.

[3] Mora P. Thin-foil expansion into a vacuum

// Phys. Rev. E. 2005. Vol. 72. No. 5. P. 056401.

[4] Oishi Y., Nayuki T., Fujii T., et al. Dependence on laser intensity and pulse duration in proton acceleration by irradiation ultrashort laser pulses on a Cu foil target // Phys. Plasmas. 2005. Vol. 12. No. 7. P. 073102.

[5] Pukhov A., Gordienko S., Kiselev S. The bubble regime of laser-plasma acceleration: monoenergetic electrons and scalability // Rep. Prog. Phys. 2004. No. 46. Pp. 179–186.

[6] Mourou G., Tajima T., Bulanov S.V. Optics in the relativistic regime // Rev. Mod. Phys. 2006. Vol. 78. No. 2. Pp. 309–372.

[7] Sentoku Y., Cowan T.E., Kemp A., Ruhl H. High energy proton acceleration in interaction of short pulse with dense plasma target // Phys. Plasmas, 2003. Vol.10. No. 5. P. 2009.

[8] Umstadter D.J. Relativistic laser – plasma interactions // Phys. D: Appl. Phys. 2003. Vol. 36. No. 8. P. R151.

[9] Wilks S.C., Kruer W.L., Tabak M., Langdon A.B. Absorption of ultra-intense laser pulses // Phys.

Rev. Lett. 1992. Vol. 69. No. 9. Pp. 1383–1386.

[10] Wilks S.C., Langdon A.B., Cowan T.E., et al. Energetic proton generation in ultra-intense laser-solid interactions // Phys. Plasmas. 2001. Vol. 8. No. 2. P. 542.

[11] Копытов Г.Ф., Оксюзян С.С., Тлячев В.Б. К вопросу о характеристиках излучения электрона в модулированном электромагнитном поле // Известия вузов. Физика. 1987. 15 с. Деп. в ВИНТИ 14.09.85. № 7353.

[12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. 8-е изд., стер. М.: Физматлит, 2012. 536 с.

[13] Копытов Г.Ф., Мартынов А.А., Акинцов Н.С. The motion of a charged particle in the field of an electromagnetic wave and the constant magnetic field // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2014. No. 4 (206). Pp. 55–63.

[14] Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981. 583 с.

[15] Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 607 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АКИНЦОВ Николай Сергеевич – преподаватель кафедры радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
akintsov777@mail.ru

ИСАЕВ ВЛАДИСЛАВ АНДРЕЕВИЧ – доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
vlisaev@rambler

КОПЫТОВ Геннадий Филиппович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
g137@mail.ru

МАРТЫНОВ Александр Алексеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и компьютерных технологий Кубанского государственного университета.

350040, Российская Федерация, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
martynov159@yandex.ru

Akintsov N.S., Isaev V.A., Kopytov G.F., Martynov A.A. THE MOTION OF A CHARGED PARTICLE IN THE FIELD OF A FREQUENCY-MODULATED ELECTROMAGNETIC WAVE AND IN THE CONSTANT MAGNETIC FIELD.

In this article the problem on the motion of a charged particle in the field of frequency-modulated electromagnetic wave and in the external uniform static magnetic field has been analyzed; the exact solutions

of the corresponding equations have been presented. This problem is of great importance to study the interaction of high-intensity laser pulses with solid targets and to develop practically multifrequency lasers and the laser-modulation emission technology. The formulae for the mean kinetic energy of a relativistic charged particle as a function of initial conditions, electromagnetic wave amplitude, wave intensity and its polarization parameter were obtained. The different cases of initial conditions of a charged particle motion and of a wave polarization were investigated. The obtained results can be put to use when studying the high-temperature plasma formed on the surface of the target and when searching for new modes of laser-plasma interaction.

PLANE ELECTROMAGNETIC WAVE, CHARGED PARTICLE, ULTRASHORT LASER PULSE.

REFERENCES

- [1] **T. Tajima, J.M. Dawson**, Laser electron accelerator, *Phys. Rev. Lett.* 43 (4) (1979) 267–269.
- [2] **E. d’Humières, E. Lefebvre, L. Gremillet, V. Malka**, Proton acceleration in high-intensity laser interaction with thin foils, *Phys. Plasmas*. 12 (2005) 9902.
- [3] **P. Mora**, Thin-foil expansion into a vacuum, *Phys. Rev. E*. 72 (5) (2005) 056401.
- [4] **Y. Oishi, T. Nayuki, T. Fujii**, Measurement of source profile of proton beams generated by ultraintense laser pulses using a Thomson mass spectrometer, *Phys. Plasmas*, 12 (2005) 073102.
- [5] **A. Pukhov, S. Gordienko, S. Kiselev**, The bubble regime of laser – plasma acceleration: monoenergetic electrons and scalability, *Rep. Prog. Phys.* 46 () (2004) 179–186.
- [6] **G. Mourou, T. Tajima, S.V. Bulanov**, Optics in the relativistic regime, *Rev. Mod. Phys.* 78(2) (2006) 309–372.
- [7] **Y. Sentoku, T. E. Cowan, A. Kemp, H. Ruhl**, High energy proton acceleration in interaction of short pulse with dense plasma target, *Phys. Plasmas*. 10(5) (2003) 2009.
- [8] **D.J. Umstadter**, Relativistic laser – plasma interactions, *Phys. D: Appl. Phys.* 36(8) (2003) R152.
- [9] **S.C. Wilks, W.L. Kruer, M. Tabak, A.B. Langdon**, Absorption of ultra-intense laser pulses, *Phys. Rev. Lett.* 69(9) (1992) 1383–1386.
- [10] **S.C. Wilks, A.B. Landon, T.E. Cowan**, Energetic proton generation in ultra-intense laser-solid interactions, *Phys. Plasmas*. 8 ()(2001) 542.
- [11] **G.F. Kopytov, S.S. Oksuzyan, V.B. Tlyachev**, K voprosu o harakteristikah izlucheniya elektrona v modulirovannom elektromagnitnom pole, *Izvestiya Vuzov. Fizika* (1987)15 p. Dep. VINITI 14.09.85, No. 7353.
- [12] **L.D. Landau, E.M. Lifshits**, *Teoriya polya [The Field Theory]*, Moscow, Nauka, 2004.
- [13] **G.F. Kopytov, A.A. Martynov, N.S. Akintsov**, The motion of a charged particle in the field of an electromagnetic wave and the constant magnetic field, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. No. 4 (206) (2014) 55–63.
- [14] **R.M. Azzam, N.M. Bashara**, *Ellipsometriya i polarizovannyi svet [Ellipsometry and polarized light]*, Moscow, Mir, 1981.
- [15] **R. Newton**, *Scattering Theory of Waves and Particles*. Moscow, Mir, 1967.

THE AUTHORS

AKINTSOV Nikolay S.

Kuban State University

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russian Federation
akintsov777@mail.ru

ISAEV Vladislav A.

Kuban State University

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russian Federation
vlisaev@rambler.ru

KOPYTOV Gennadii F.

Kuban State University

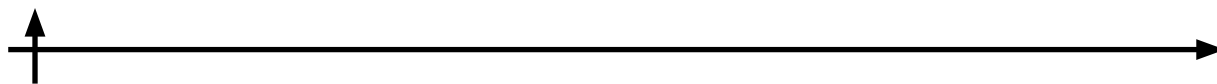
149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russian Federation
g137@mail.ru

MARTYNOV Alexander A.

Kuban State University

149 Stavropolskaya St., Krasnodar, 350040, Russian Federation

martynov159@yandex.ru



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абрамов А.Г.	24	Смирнов П.Е.	24
Акинцов Н.С.	150, 164	Соловьев К.В.	84
Гатаулин Я.А.	36	Софронов А.Н.	77
Зайцев Д.К.	36	Тер-Мартirosян А.Л.	77
Исаев В.А.	164	Федорова Е.А.	36
Копытов Г.Ф.	150, 164	Фирсов Д.А.	77
Кудинова Н.Р.	9, 91	Чурилова М.А.	139
Левченя А.М.	24	Юхнев А.Д.	36
Мартынов А.А.	150, 164	Яковлев Ю.А.	9, 91
Митюрева А.А.	48	Vajaj N.S.	100
Октябрьский В.П.	73	Dhapte V.V.	119
Паневин В.Ю.	77	Mehta P.P.	119
Петриченко М.Р.	61	Omanwar S.K.	100
Полянский А.М.	9, 91	Palan C.B.	100
Полянский В.А.	9, 91	Takpire S.R.	111
Смирнов В.В.	48	Waghuley S.A.	111
Смирнов Е.М.	24		

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 4 (230) 2015

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* – ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 29.12.2015. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 21,71. Уч.-изд. л. 21,71. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Издательство Политехнического университета
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами **ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782**. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

**Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:
(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Наталья Александровна
или по e-mail: physics@spbstu.ru**