

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



# НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

---

---

Физико-математические  
науки

---

---

**Том 13, №4**  
**2020**

Санкт-Петербургский политехнический  
университет Петра Великого  
2020

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

**РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА**

*Боровков А.И.*, проректор по перспективным проектам;

*Варшалович Д.А.*, академик РАН;

*Глухих В.А.*, академик РАН;

*Жуков А.Е.*, чл.-кор. РАН;

*Индейцев Д.А.*, чл.-кор. РАН;

*Рудской А.И.*, академик РАН;

*Сурис 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;

*Лобода О.С.*, канд. физ.-мат. наук, доцент, 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;

*Привалов В.Е.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

*Смирнов Е.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;

*Черепанов А.С.*, д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

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 СПб-ПУ».

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 индексируется в базе данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), а также 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.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE  
POLYTECHNICAL UNIVERSITY  
**JOURNAL**

---

---

Physics  
and Mathematics

---

---

**VOLUME 13, No.4,  
2020**

Peter the Great St. Petersburg  
Polytechnic University  
2020

# ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

## JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

*A.I. Borovkov* – vice-rector for perspective projects;

*V.A. Glukhikh* – full member of RAS;

*D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;

*A.I. Rudskoy* – full member of RAS;

*R.A. Suris* – full member of RAS;

*D.A. Varshalovich* – full member of RAS;

*A.E. Zhukov* – corresponding member of RAS.

## JOURNAL EDITORIAL BOARD

*V.K. Ivanov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;

*A.E. Fotiadi* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;

*V.M. Kapralova* – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;

*V.I. Antonov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*I.B. Bezprozvanny* – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;

*A.V. Blinov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*A.S. Cherepanov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*D.V. Donetskii* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;

*D.A. Firsov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*A.S. Kheifets* – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;

*O.S. Loboda* – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*J.B. Malherbe* – Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;

*V.M. Ostryakov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*V.E. Privalov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*E.M. Smirnov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*A.V. Solov'yov* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;

*A.K. Tagantsev* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;

*I.N. Toptygin* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

*E.A. Tropp* – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

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'.

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 **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index) and the **Russian Science Citation Index** (RSCI) databases.

© 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 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2020

## Содержание

### Физика конденсированного состояния

- Ваганов С.А., Панфилов А.Г., Сейсян Р.П. *Экситон в сверхсильном и гиперсильном магнитных полях*..... 9
- Ванина П.Ю., Силин Н.С., Босак А.А., Чернышов Д.Ю., Набережнов А.А. *Температурная эволюция диффузного рассеяния в монокристалле ниобата стронция-бария SBN-60 в релаксорной фазе*..... 28
- Гороховатский Ю.А., Темнов Д.Э., Сотова Ю.И. *Влияние реологических параметров на электретные свойства поливинилиденфторида (статья на английском языке)*..... 39

### Математическое моделирование физических процессов

- Булович С.В. *Неявный экономичный алгоритм численного интегрирования системы уравнений для описания состояния многофазного потока с общим давлением*..... 47
- Коваленко А.Н., Коптюхов А.О., Мещеряков Д.К., Щуклинов А.П. *Моделирование термокинетических процессов в тигельных ловушках расплава кориума при авариях реакторов на АЭС*..... 61
- Храпунов Е.Ф., Чумаков Ю.С. *Влияние угла наклона локально нагретой поверхности на теплообмен при бифуркации свободноконвективного факела*..... 77
- Котмакова А.А., Гатаулин Я.А., Юхнев А.Д., Зайцев Д.К. *Влияние упругости стенок на структуру течения в трехмерной модели бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями*..... 89

### Физическая электроника

- Соловьев К.В. *Идеально фокусирующие системы с однородными магнитными полями*..... 102

### Физическая оптика

- Решетов И.В., Каасик В.П., Липовский А.А., Таганцев Д.К., Журихина В.В. *Термическая релаксация оптической нелинейности поляризованных стекол*..... 110
- Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э. *Эффективный модовый объем и оценка мощности выходного излучения гелий-неонового лазера*..... 119
- Каров Д.Д., Пуро А.Э. *Тензорная томография для измерения остаточных напряжений в осесимметричных градиентных стержнях при искривлении просвечивающих лучей (статья на английском языке)*..... 133

### Физическое материаловедение

- Пашкевич Д.С., Зимин А.Р., Алексеев Ю.И., Мухортов Д.А., Камбур П.С., Петров В.Б., Баженов Д.А., Смолкин П.А., Капустин В.В. *Получение фторида водорода из гексафторида урана в режиме горения*..... 149
- Пашкевич Д.С., Мухортов Д.А., Капустин В.В., Камбур П.С., Курапова Е.С., Зимин А.Р., Маслова А.С. *Стабильность фронта пламени и состав продуктов горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода*..... 162
- Бабич Е.С., Редутто И.В., Редьков А.В., Решетов И.В., Журихина В.В., Липовский А.А. *Модификация приповерхностной области стекол высоким электрическим полем*..... 176

### Радиофизика

**Лиюкумович Л.Б., Костромитин А.О., Скляр Ф.В., Котов О.И.** *Уровень выходной мощности интерферометрических оптоволоконных схем с волоконно-оптическими брэгговскими решетками для мультиплексирования чувствительных элементов.....* 185

### Математика

**Вальдман Я., Фролов М.Е.** *Функциональные апостериорные оценки точности решений задач механики деформируемого твердого тела.....* 203

# Contents

## Condensed matter physics

- Vaganov S.A., Panfilov A.G., Seisyan R.P.** *An exciton in the superstrong and hyperstrong magnetic fields*..... 9
- Vanina P.Yu., Silin N.S., Bosak A.A., Chernyshov D.Yu., Naberezhnov A.A.** *Temperature evolution of diffuse scattering in the strontium-barium niobate SBN-60 single crystal in the relaxor state*..... 28
- Gorokhovatsky Yu.A., Temnov D.E., Sotova Yu.I.** *Rheological parameters' effect on the electret properties of polyvinylidene fluoride*..... 39

## Simulation of physical processes

- Bulovich S.V.** *An implicit economical algorithm for numerical integration of the equation system describing a multiphase flow state with common pressure*..... 47
- Kovalenko A.N., Koptuyukhov A.O., Meshcheryakov D.K., Schuklinov A.P.** *Thermokinetic processes in the corium traps of high-temperature melt during the reactor accidents at an A-plant: simulation*..... 61
- Khrapunov E.F., Chumakov Yu.S.** *Influence of the slope angle of a locally heated surface on the heat transfer during bifurcation of a pure thermal plume*..... 77
- Kotmakova A.A., Gataulin Ya.A., Yukhnev A.D., Zaitsev D.K.** *The abdominal aorta bifurcation with iliac arteries: the wall elasticity effect on the flow structure*..... 89

## Physical electronics

- Solovyev K.V.** *Ideal focusing systems with homogenous magnetic fields*..... 102

## Physical optics

- Reshetov I.V., Kaasik V.P., Lipovskii A.A., Tagantsev D.K., Zhurikhina V.V.** *Thermal relaxation of optical nonlinearity in the poled glasses*..... 110
- Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E.** *The effective mode volume and estimation of helium-neon laser output power*..... 119
- Karov D.D., Puro A.E.** *Curved-ray tensor tomography for residual stress measurements in axisymmetric graded rods*..... 133

## Physical materials technology

- Pashkevich D.S., Zimin A.R., Alexeev Yu.I., Mukhortov D.A., Kambur P.S., Petrov V.B., Bazhenov D.A., Smolkin P.A., Kapustin V.V.** *Hydrogen fluoride obtaining from uranium hexafluoride in the combustion mode*..... 149
- Pashkevich D.S., Mukhortov D.A., Kapustin V.V., Kambur P.S., Kurapova E.S., Zimin A.R., Maslova A.S.** *The stability of flame front and the composition of combustion products of ammonia in oxygen in the presence of hydrogen fluoride*..... 162
- Babich E.S., Reduto I.V., Redkov A.V., Reshetov I.V., Zhurikhina V.V., Lipovskii A.A.** *Modification of glass surface by a high electric field*..... 176

**Radiophysics**

**Liokumovich L.B., Kostromitin A.O., Skliarov Ph.V., Kotov O.I.** *An output power level of the fiber-optic interferometric schemes with fiber Bragg gratings for multiplexing the sensitive elements.....* 185

**Mathematics**

**Valdman J., Frolov M.E.** *Functional-type a posteriori error estimates for solutions of problems in deformable solid mechanics.....* 203

DOI: 10.18721/JPM.13401

УДК 537.6, 538.9, 539.1

## ЭКСИТОН В СВЕРХСИЛЬНОМ И ГИПЕРСИЛЬНОМ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

**С.А. Ваганов, А.Г. Панфилов, Р.П. Сейсян**

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Для экситонных состояний в полупроводниках проанализированы условия перехода от сильного магнитного поля (диамагнитный экситон) к сверхсильному (экситонный магнитополимер) и гиперсильному (экситон КЭП) магнитным полям. Рассмотрены эффекты, индуцированные такими переходами, и возможности использования экситона в качестве модельного объекта для изучения атомов водорода и позитрония в сверхсильном и гиперсильном магнитных полях.

**Ключевые слова:** диамагнитный экситон, экситонный магнитополимер, сверхсильное магнитное поле, квантово-электродинамический предел

**Ссылка при цитировании:** Ваганов С.А., Панфилов А.Г., Сейсян Р.П. Экситон в сверхсильном и гиперсильном магнитных полях // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 9–27. DOI: 10.18721/JPM.13401

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## AN EXCITON IN THE SUPERSTRONG AND HYPERSTRONG MAGNETIC FIELDS

**S.A. Vaganov, A.G. Panfilov, R.P. Seisyan**

Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,  
St. Petersburg, Russian Federation

The transformation of excitonic states in the raising magnetic field has been investigated beginning with the diamagnetic exciton (strong field) through excitonic magnetopolymer (superstrong field) to the QEL exciton (hyperstrong magnetic field). The effects induced by this transformation were considered. The capability of the exciton as a model object to study the hydrogen and positron atoms in superstrong and hyperstrong magnetic fields was also analysed.

**Keywords:** diamagnetic exciton, excitonic magnetopolymer, superstrong magnetic field, quantum electromagnetic limit

**Citation:** Vaganov S.A., Panfilov A.G., Seisyan R.P., An exciton in the superstrong and hyperstrong magnetic fields, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 9–27. DOI: 10.18721/JPM.13401

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

### Введение

Экситон Ванье – Мотта (экситон большого радиуса) – это важнейший объект физики полупроводников. Этому во-

дородоподобному образованию из электрона и дырки посвящено огромное количество исследований и обзоров (см., например, монографии [1, 2] и ссылки в них).

Поведение экситона в различных полупроводниковых кристаллах, нано- и гетероструктурах детально изучалось в магнитном и/или электрическом полях, при интенсивном лазерном возбуждении и т. п. [1, 3].

Влияние слабого магнитного поля на экситон Ванье – Мотта подробно исследовано как экспериментально, так и теоретически. В деталях изучены и эффект Зеемана (расщепление экситонных энергетических уровней, линейное с полем), и диамагнитный сдвиг (сдвиг уровней вверх по энергии, пропорциональный квадратам поля и радиуса соответствующего экситонного состояния).

Переход к эффектам сильного поля – квантованию Ландау и образованию диамагнитного экситона (ДЭ) – изучался в различных полупроводниковых кристаллах и низкоразмерных структурах (подробности можно найти в обзорной монографии [2]).

Итак, можно утверждать, что поведение экситона и в слабых, и в умеренно сильных магнитных полях изучено достаточно хорошо. Далее было бы интересно экспериментально решить следующие вопросы:

проявляются ли какие-либо новые магнитополевые эффекты в экситонных спектрах в более сильных полях;

какие поля с индукцией  $B > B_{ss}$  следует считать сверхсильными (здесь и далее  $B_{ss}$  – индукция сверхсильного магнитного поля), кардинально меняющими поведение экситона.

Если принимать во внимание атомоподобность экситона Ванье – Мотта, то естественным было бы искать ответы в атомной физике. Однако прямые аналогии здесь не применимы, так как «водородоподобный» экситон не полностью подобен атому водорода. Анализу важности этого различия посвящена первая половина данной статьи. Наличие среды и малая приведенная масса смещают экситонные эффекты на два-четыре порядка по шкале энергий и на три-пять порядков по шкале магнитных полей относительно атомных. Роль спин-орбитального взаимодействия оказывается не столь значительной, тогда как возможность рождения

экситона светом (электромагнитным полем) и малое радиационное время его существования в кристалле привносят в жизнь экситона существенные нюансы.

Вторая половина статьи посвящена собственно предполагаемым экситонным эффектам в сверх- и гиперсильных магнитных полях. Интерес к данной проблеме именно сейчас продиктован целым рядом обстоятельств.

С одной стороны, за последние 20–30 лет достигнут существенный прогресс в области эксперимента: в России и мире созданы уникальные лабораторные установки для получения сверхмощных магнитных полей [4], параллельно установлены или уточнены зонные и экситонные параметры множества полупроводниковых материалов (в том числе новых) [5].

С другой стороны, теоретические исследования в области магнитополевой атомной физики столкнулись с невозможностью проведения прямых и даже косвенных экспериментов, а это привело к тому, что идеи полувекковой давности [6 – 9] почти не получили развития, концептуально не изменились (см. обзор [10] и ссылки в нем). Использование все более мощных математических методов (например, аппарата вторичного квантования) и точных аналитических решений практически не модифицирует ранее полученные результаты.

Даже не делая попытки обсуждать атомно-магнитополевые теоретические модели (их верность все равно может подтвердить лишь эксперимент), мы считаем целесообразным приложить указанные идеи к физике атомоподобных квазичастиц в твердом теле – экситонов.

Данная статья направлена на суммирование накопленных на данный момент сведений и попытку прогноза, какие новые проявления и при каких условиях можно ожидать в оптике экситонов. Эти условия подразумевают соответствующие свойства полупроводниковых материалов (существующих, а главное перспективных), а также величину сверхсильных магнитных полей.

### Влияние среды. Масштабирование эффектов магнитного поля

Экситон, в отличие от изолированного атома водорода, существует в среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon > 1$ , уменьшающей кулоновское взаимодействие в  $\epsilon$  раз, а энергию связи экситона — в  $\epsilon^2$  раз. Экранирование кулоновского взаимодействия также в  $\epsilon$  раз увеличивает экситонный радиус, который определяет многие ключевые свойства экситона, например размерное квантование в наноструктурах.

Кроме того, поскольку электрон в кристалле — не частица с массой  $m_e$ , а квазичастица с эффективной массой  $m_e^*$  (определяемой как

$$m_e^* = (2/\hbar^2)d^2E/dk^2$$

вблизи точки экстремума на зависимости  $E(k)$  для соответствующей зоны проводимости), а эффективная масса  $m_h^*$  дырки, т. е. «ядра» водородоподобного экситона, намного меньше массы протона, то приведенная масса экситона

$$\mu = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*)$$

гораздо меньше  $m_e$ , в отличие от приведенной массы атома водорода  $\mu_H \cong m_e$ .

Следовательно, боровский радиус экситона

$$a_{ex} = a_0 \epsilon / (\mu/m_e) \quad (1)$$

в 10 – 100 раз превышает боровский радиус атома водорода ( $a_0 \cong 0,53 \text{ \AA}$ ), а энергия связи экситона

$$Ry_{ex} = Ry (\mu/m_e)/\epsilon^2 \quad (2)$$

в 100 – 1000 раз меньше энергии ионизации атома водорода  $Ry \cong 13,6 \text{ эВ}$ .

Кроме того, у атомов водорода и мюония масса ядра (протона  $p^+$ , мю-мезона  $\mu^+$ ) намного больше массы электрона, и поэтому можно пренебречь вкладом магнитного момента ядра в энергию взаимодействия этих атомов с магнитным полем:

$$E_M(B) = e\hbar B/m_e + e\hbar B/m_{p,\mu^+} \cong e\hbar B/m_e. \quad (3)$$

Однако для экситона (как и для атома позитрония) вкладом ядра пренебречь нельзя, и суммарная энергия взаимодействия экситона с магнитным полем становится больше таковой для атома в  $m_e/\mu$  раз:

$$E_M(B) = e\hbar B/m_e^* + e\hbar B/m_h^* = e\hbar B/\mu. \quad (4)$$

Суммируя все эти особенности, получаем, что значение магнитной индукции  $B_{Ryex}$ , при котором энергия  $E_M(B)$  взаимодействия магнитного момента экситона с полем становится равной энергии связи  $Ry_{ex}$ , оказывается для экситона в  $\epsilon^2(\mu/m_e)^2$  меньше, чем для атома водорода:

$$B_{Ryex} = \mu Ry_{ex} / e\hbar = m_e Ry (\mu/m_e)^2 / \epsilon^2 = B_{Ry} \cdot (\mu/m_e)^2 / \epsilon^2, \quad (5)$$

при этом разница составляет 3 – 5 порядков.

Величины соответствующих масс, энергий связи и характеристических магнитных полей  $B_{Ry}$  для водородоподобных атомов и полей  $B_{Ryex}$  для экситонов в различных полупроводниковых кристаллах приведены в табл. 1 и 2. Величины в табл. 2, относящиеся к экситонам, носят скорее ориентировочный, чем справочный характер. В оригинальных работах различия достигают 10 – 15 %, предпочтение отдано самосогласованным данным: все значения в формуле (2) могут быть получены из эксперимента, и они должны быть согласованы, что не соблюдается в целом ряде публикаций.

Материальная среда, в которой существует экситон, «масштабирует» магнитопольные эффекты: действие поля  $B$  на экситон эквивалентно воздействию гораздо большего поля —

$$B^* = \epsilon^2/\mu^2 B$$

на атом водорода. В результате доступные в лабораториях магнитные поля, равные при-

Таблица 1

**Значения основных физических величин  
для водорода и водородоподобных атомов**

«Атом»	«Ядро»	$m_{\text{яц}}/m_e$	$\mu/m_e$	$R_y$ , эВ	$B_{R_y}$ , кТл
Водород H	Протон $p^+$	1836	1,000	13,6	117,5
Мюоний Mu	$\mu$ -мезон $\mu^+$	207	0,995	13,5	116,5
Позитроний Ps	Позитрон $e^+$	1	0,500	6,8	29,0

Об о з н а ч е н и я:  $m_{\text{яц}}$  – масса «ядра»,  $m_e$  – масса электрона,  $\mu$  – их приведенная масса;  $R_y$  – энергия связи,  $B_{R_y}$  – соответствующее ей характеристическое магнитное поле.

Таблица 2

**Значения основных физических величин  
для экситона в различных кристаллах**

Кристалл	$m_h^*/m_e$	$m_e^*/m_e$	$\mu/m_e$	$a_{\text{ex}}$ , Å	$R_{y_{\text{ex}}}$ , мэВ	$B_{R_{y_{\text{ex}}}}$ , Тл
ZnS	1,76	0,340	0,285	16,5	49,00	120
ZnO	0,59	0,280	0,190	22,0	42,50	70
ZnSe	0,78	0,160	0,130	29,0	35,00	39,0
GaN	0,80	0,200	0,160	31,0	25,00	35,0
CdS	0,68	0,210	0,160	31,0	25,00	34,0
ZnTe	0,60	0,120	0,100	46,0	18,00	15,5
CdSe	0,45	0,110	0,088	61,0	11,50	8,70
CdTe	0,63	0,096	0,083	65,0	11,00	7,80
InP	0,60	0,079	0,070	95,0	6,00	3,60
GaAs	0,50	0,063	0,056	125	4,40	2,10
GaSb	0,28	0,041	0,036	231	2,00	0,62
InAs	0,41	0,024	0,023	350	1,35	0,27
HgTe	0,32	0,031	0,028	400	0,86	0,21
InSb	0,42	0,014	0,014	673	0,60	0,07

Об о з н а ч е н и я:  $m_h^*$ ,  $m_e^*$  – эффективные массы дырки и электрона соответственно;  $a_{\text{ex}}$  – боровский радиус экситона;  $R_{y_{\text{ex}}}$  – энергия связи дырки и электрона в экситоне,  $B_{R_{y_{\text{ex}}}}$  – соответствующее ей характеристическое магнитное поле.

мерно одному тесла, позволяют моделировать поведение атомов водорода в полях  $10^3 - 10^5$  Тл при исследовании поведения экситонов в полупроводниковых кристаллах.

Имеется и еще одна возможность для дальнейшего снижения «модельных» полей. Так как диамагнитные экситоны исследуются в

основном оптическими методами, наиболее информативным является изучение возбужденных состояний экситона. Осцилляции магнитопоглощения, возникающие в спектре, после соответствующей математической обработки поставляют информацию и об уровнях Ландау, и о параметрах диамагнит-

ного экситона в конкретном материале при определенном значении поля [2]. Наиболее выраженные осцилляции соответствуют при этом бесполевым экситонным состояниям с главным квантовым числом  $n = 3 - 5$ . В то же время, поскольку симметричные и прочие свойства состояний, например  $1S$ ,  $2S$ ,  $3S$  и т. п., практически ничем не отличаются, то имеет место еще одно масштабирование: воздействие магнитного поля  $B_{Ryex,n}$  на экситонное состояние  $nS$  эквивалентно воздействию большего поля

$$B_{Ryex,n=1} = n^2 B_{Ryex,n}$$

на состояние  $1S$ .

Аналогичное масштабирование имеет место для состояний  $nP$ ,  $nD$  и т. д.

Обобщая вышеизложенное, мы можем утверждать, что при изучении поведения экситонного состояния  $4S$ , например в кристаллах CdSe в магнитном поле величиной в 3 – 4 Тл (она вовсе не является рекордной), можно получать информацию о поведении основного состояния  $1S$  атома водорода в мегатесловых, сверхсильных для атома водорода магнитных полях. Рис. 1 иллюстрирует этот тезис для кристалла CdSe (менее подробные диаграммы были опубликованы нами ранее в статье [11]). Видно, например, что для экситонных состояний  $n = 3, 4$  в селениде кадмия переход от поведения, характерного для слабых полей (расщепление Зеемана и квадратичный с полем (диамагнитный) энергетический сдвиг линий), к поведению, характерному для сильных полей (мультиплетное расщепление, сдвиг линейный с полем (циклотронный)), происходит уже в полях, заметно меньших  $B_{Ryex} = 9$  Тл.

Таким образом, если изучать экситон в лаборатории, используя при этом масштабирование магнитного поля, то появляется возможность смоделировать поведение атома водорода в полях, недостижимых на Земле: поля в сотни тысяч тесла могут возникать разве что в окрестностях экзотических объектов Вселенной типа нейтронных звезд; постоянные же магнитные поля до 40 Тл (и

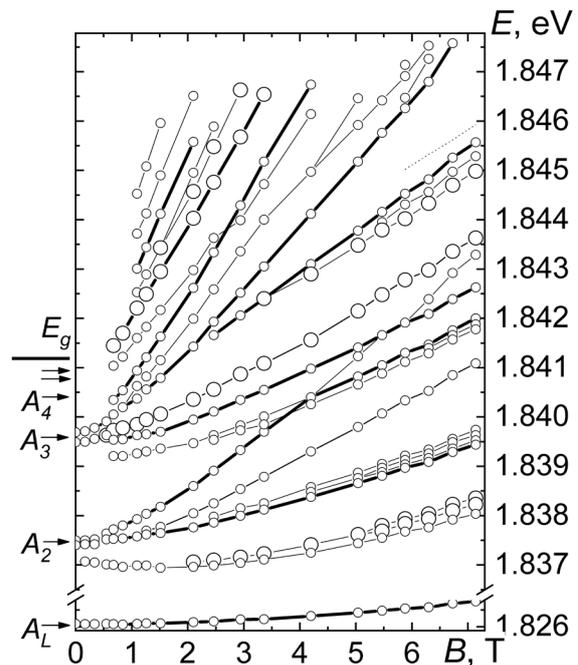


Рис. 1. Векторная диаграмма экситонных состояний (серия A) в кристалле CdSe во внешнем магнитном поле  $H \perp c$ ,  $H \perp k$ . Поляризация  $E \parallel c$ .

Толщины линий и радиусы кружков отражают интенсивности и ширины спектральных линий поглощения, соответственно

импульсные до 1500 Тл) достижимы в специальных лабораториях.

В 1999 году Государственная премия России в области науки и техники была вручена физикам из Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики (ВНИИЭФ, г. Саров Нижегородской области, Россия) за работу «Взрывное генерирование сверхсильных магнитных полей и проведение исследований по физике твердого тела в магнитных полях 10-мегагауссового диапазона» [4]. Достигнутое рекордное поле составляло 2800 Тл, а максимальное поле установки для оптических экспериментов — 800 Тл.

Стоит обратить внимание на еще одно обстоятельство. В атомной физике критерий сильного поля есть соотношение между энергией взаимодействия магнитного момента электрона с внешним магнитным полем  $E_M(B)$  и энергией спин-орбитального взаимодействия  $\Delta_{SO}$ . Переход от слабого маг-

нитного поля к сильному экспериментально сопровождается переходом от эффекта Зеемана к эффекту Пашена – Бака. Критерий сверхсильного магнитного поля  $B_{Ry}$  для атома водорода – это соотношение той же энергии взаимодействия магнитного момента электрона с внешним полем  $E_M(B)$ , и энергии связи электрона с протоном в атоме водорода  $Ry$  (часто вместо  $Ry$  рассматривают полную потенциальную энергию атома водорода в основном состоянии,  $1 \text{ Hartree} = 2Ry$ ). Ввиду того, что энергия ионизации атома водорода в основном состоянии на четыре порядка больше энергии спин-орбитального взаимодействия, сверхсильными полями для атома водорода будут уже поля свыше  $100\,000 \text{ Тл}$ . В табл. 1 приведены значения  $B_{Ry}$  для водорода, для случая  $E_M(B_{Ry}) = Ry$  и для водородоподобных атомов с соответствующими значениями энергии связи.

Для экситона, как правило,  $Ry_{ex} \ll \Delta_{SO}$ , т. е. экситон в «сверхсильном магнитном поле» (в «атомной» терминологии) и в «сильном магнитном поле» (диамагнитный экситон (ДЭ)) – это фактически одно и то же. При этом поведение ДЭ уже достаточно хорошо изучено, по крайней мере для магнитных полей, переходных от слабых к сильным [2].

Поскольку наиболее интересные особенности поведения водородоподобных атомов в сверхсильных магнитных полях (см. далее) проявляются в диапазоне значений индукции  $B = 10 - 1000 B_{Ry}$ , то будет методологически удобно использовать термин «сверхсильное поле» также и для водородоподобных мюония, позитрония и экситона при выполнении условия  $B > B_{ss} \approx 10 B_{Ry}(B_{Ryex})$ .

### Водород и водородоподобные атомы в сверхсильном поле

О поведении и превращениях атомов водорода в магнитных полях свыше  $10^6 \text{ Тл}$  («сверхсильное поле»), мы предполагаем в настоящее время лишь теоретически [6 – 8]. Различные модели сходятся в том, что имеет место геометрическая перестройка атома: изначально шарообразный, он начинает сжиматься по осям, перпендикулярным на-

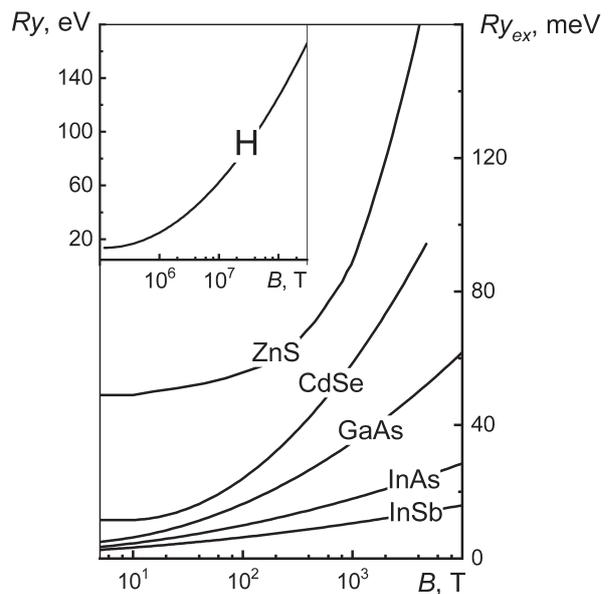


Рис. 2. Зависимости энергии связи экситона от магнитного поля в различных кристаллах (на вставке дана аналогичная зависимость для атома водорода)

правлению магнитного поля, превращаясь в эллипсоид (веретено, сигару) – см. далее рис. 4. В гигатесловых полях потенциал ионизации атома водорода предположительно увеличивается до тысяч электронвольт, т. е. вырастает на несколько порядков [6, 8].

В связи с этим стоит повториться: несмотря на то, что между опубликованием работ [6] и [8] прошло более 20 лет, они дают практически идентичные зависимости.

На рис. 2 показано, как в магнитных полях, которые на много порядков меньше атомных, должна меняться энергия связи экситонов  $Ry_{ex}$ . Приведенные зависимости не являются результатом точных расчетов: здесь мы лишь предполагаем, что зависимость  $Ry_{ex}(B)$  и теоретически предсказываемая зависимость  $Ry(B)$  магнитополевой атомной физики [6] аналогичны (т. е. имеют вид  $\sim \ln^2(B/B_{Ry})$ ). Для удобства восприятия представлены только несколько кристаллов: от широкозонных полупроводников до узкозонных.

Уточнение зависимостей  $Ry_{ex}(B)$  даже менее актуально, чем в атомной физике: хотя изменения, демонстрируемые на рис. 2, кар-

динальны (в экспериментально достижимых магнитных полях энергия связи экситона должна меняться в разы), все же сложно наблюдать их экспериментально. Дело в том, что эти изменения происходят на фоне перестройки электронного спектра – с формированием уровней Ландау для носителей обоих типов. При этом зависимость энергии уровней Ландау от магнитного поля – линейная:

$$E_{L,n}(B) = E_M(B) \cdot (n_L + 1/2), \quad (6)$$

и она гораздо сильнее логарифмической зависимости энергии связи экситона (в данном случае уже диамагнитного) от поля, так что зависимость  $R_{y_{ex}}(B)$  будет просто незаметной на фоне  $E_{L,n}(B)$ .

Совместное изучение поведения сразу нескольких уровней вряд ли поможет объяснить происходящие изменения: уровни Ландау эквидистантны только в первом приближении. Кроме того, энергия связи экситона, привязанного к каждому конкретному уровню Ландау, зависит от значения  $n_L$  [2]. Например, в сурьмянистом индии InSb, одном из первых исследованных материалов (эффект осцилляций магнитопоглощения в InSb подробно изучался еще в 1950 – 1960-х гг.), где, вследствие экстремально малой энергии связи экситона, сверхсильное магнитное поле  $B_{ss}$  – это единицы тесла, магнитополевые зависимости энергии уровней диамагнитного экситона в полях до 8 Тл (т. е. примерно  $100 B_{Ry_{ex}}$ ) были описаны без привлечения идеи об увеличении энергии связи экситона в таких полях [2].

Интересно, что если мы используем в формуле (6) величину  $E_M$  из формулы (4), то увидим (рис. 3), что для большинства полупроводников в сверхсильном магнитном поле значение энергии перехода между основными уровнями Ландау электрона и дырки ( $n_L = 0$ ) смещается в видимую часть спектра, удобную для экспериментального наблюдения.

Однако наиболее интересным эффектом сверхсильного магнитного поля может оказаться предсказываемая теорией модификация межатомного взаимодействия, которая,

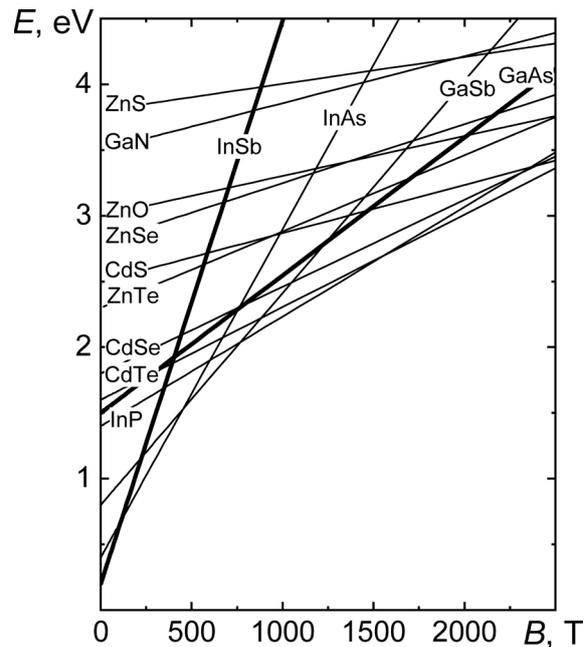


Рис. 3. Зависимости энергии перехода между основными («нулевыми») уровнями Ландау электрона и дырки от магнитного поля (несколько зависимостей выделены для удобства восприятия рисунка)

применительно к экситону, должна проявляться прежде всего в спектрах не поглощения, а экситонной люминесценции, исследованиям которой уделено гораздо меньше внимания.

### Межатомное (межэкситонное) взаимодействие в сверхсильном поле

Нейтральные атомы, сильно вытянутые вдоль направления поля, будут обладать большим электрическим квадрупольным моментом, поэтому они начнут сильно притягиваться друг к другу вдоль линий магнитного поля, слабо отталкиваясь в перпендикулярных полю направлениях. В результате могут, по видимому, образовываться «магнитополимеры» – цепочки модифицированных полем веретенообразных атомов, выстроившихся вдоль линий поля (рис. 4). При дальнейшем увеличении поля атомы такого полимера теряют индивидуальность, происходит обобществление электронов в единое иглообразное облако, по оси которого располагаются протоны – атомные ядра [9].

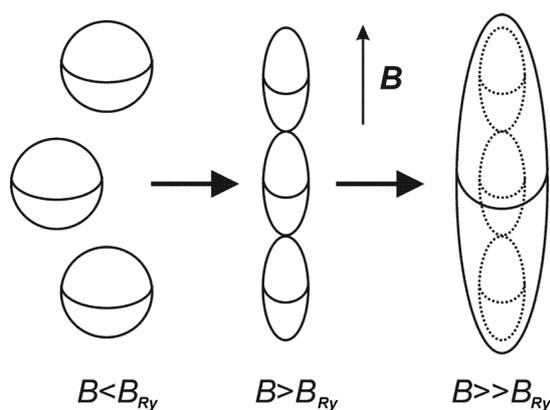


Рис. 4. Схема образования атомных/экситонных магнитополимеров в сверхсильных магнитных полях

Подтверждение этой теоретической картины, возможно, уже экспериментально получено при регистрации спектров теплового излучения нейтронных звезд. Часть этого излучения не пропускается атмосферой нейтронной звезды, и в рентгеновской области спектра наблюдаются полосы поглощения. Как правило, основная полоса расположена в области  $E_a \approx 200 - 700$  эВ [12], и несколько менее четко выраженных полос иногда наблюдают при энергиях  $2E_a$ ,  $3E_a$  и т. д. Первоначальные попытки связать эти полосы с циклотронными частотами электронов или протонов либо кислородом в атмосфере звезды оказались безуспешными.

Можно, однако, объяснить это поглощение ионизацией атомов водорода в сверхсильном магнитном поле: увеличение потенциала ионизации до  $200 - 700$  эВ ( $15 - 50Ry$ ) возможно в полях порядка  $10^8 - 10^9$  Тл, т. е. именно в тех полях, которые характерны для старых нейтронных звезд (для молодых нейтронных звезд (остатков сверхновых) типичны гораздо меньшие поля, а именно  $10^6 - 10^7$  Тл).

Один рентгеновский квант может ионизовать одновременно несколько атомов, составляющих магнитополимер; тем более, что в таких полях имеет место обобществление электронов (как указано выше). В результате, с точностью до относительно малой энергии связывания атомов в полимер, должны

наблюдаться полосы при энергиях  $E_a$ ,  $2E_a$ ,  $3E_a$  и т. д. Это может объяснить наличие дополнительных полос поглощения в спектре.

Интересно, что, хотя температура поверхности нейтронных звезд приближается к миллиону градусов ( $kT \approx 100$  эВ), атомы водорода в их атмосфере должны оставаться преимущественно неионизованными, так как  $kT < E_a$ . Другими словами, в атмосфере старой нейтронной звезды предположительно присутствуют и атомы (пусть и необычные), и молекулы (как в атмосфере Солнца), и магнитополимеры.

Возвращаясь от атомной физики к физике экситонов, отметим, что биэкситоны изучены лишь в нескольких типах кристаллов, при этом в относительно слабом магнитном поле, а триэкситоны и т. п. — это лишь теоретическая идея. Уже обнаружено, что биэкситон, в отличие от экситона, превращается в излучение не в однофотонном процессе

$$X_2 \rightarrow h\nu,$$

где  $X$  — экситон, а в два этапа [13]:

$$X_2 \rightarrow X_{n=2} + h\nu_1 \rightarrow h\nu_1 + h\nu_2.$$

Здесь же следует отметить, что аннигиляция атома позитрония (и тем более молекулы) — тоже многофотонный процесс (см. табл. 3 далее).

В связи с тем, что теория биэкситона практически не разработана даже для слабых полей, не говоря уже о сильных и сверхсильных, при исследовании экситонов высокой плотности (а это обязательное условие наблюдения би- и полиэкситонов в слабых магнитных полях) в сверхсильных магнитных полях можно получить новые, неожиданные и интересные результаты.

### Рождение экситона светом и малое время его жизни

Крайне важное отличие экситона от атома водорода — возможность рождения экситона светом.

В этом экситон гораздо более сходен не с



Таблица 3

Сравнение экситона с атомами водорода и позитрония

Характеристика	Экситон (X)	Позитроний (Ps)	Водород (H)
Структура	Дырка+электрон ( $h^+ + e^-$ )	Позитрон+электрон ( $e^+ + e^-$ )	Протон+электрон ( $p^+ + e^-$ )
Приведенная масса	$0,01 - 0,30m_e$	$0,5m_e$	$\approx m_e$
Размер, Å	10 – 1000	$\approx 2$	$\approx 1$
Энергия связи, мэВ	1 – 100	$\approx 6800$	$\approx 13600$
Энергия димеризации, эВ	Биекситон $X_2$ : 0,0001 – 0,0010	Дипозитроний $Ps_2$ : 0,4	Молекула $H_2$ : 4,5
Аннигиляция (Энергия)	1, 2, ... фотонов; ( $h\nu \approx E_g \approx 0,1 - 10$ эВ)	2, 3, ... фотонов; ( $h\nu_{\Sigma} = 2m_e c^2 \approx 1$ МэВ)	невозможна; $H^+ + e^- = n^0 + \nu_e$ ( $m_H c^2 \approx 1$ ГэВ)
Время жизни, с	$10^{-5} - 10^{-7}$	Парапозитроний $1,25 \cdot 10^{-10}$ Ортопозитроний $1,43 \cdot 10^{-7}$	Стабилен
Оптические переходы			

атомом водорода, а с экзотическим атомом позитрония (табл. 3). Из табл. 3 также видно еще одно отличие экситона (и атома позитрония) от атома водорода – его (их) нестабильность. Магнитное поле, увеличивая

энергию связи экситона, повышает и время совместной жизни электрона и дырки. Правда неясно, сохранится ли эта тенденция в запредельно сильных магнитных полях; но если сохранится, то это может способство-

вать созданию экситонного газа высокой плотности. При этом образующийся газ, возможно, удастся получить холодным, т. е. реализовать условия для бозе-эйнштейновской конденсации экситонов [14].

В отсутствие поля или в не очень сильных магнитных полях обычно имеет место относительный «перегрев» электронной подсистемы. Дело в том, что при возбуждении коротким световым импульсом газ экситонов не всегда успевает прийти в равновесное состояние и температура экситонной подсистемы оказывается не согласованной с температурой кристаллической решетки.

В кристалле может рождаться множество квазичастичных возбуждений и не только экситон (электронно-дырочная пара). Среди них, например, фононы, соответствующие коллективным колебаниям атомов кристаллической решетки. Поскольку энергия акустических фононов имеет нижним пределом нуль, их рождение возможно в любом магнитном поле. Образно говоря, вращаясь по ларморовским орбитам, электрон и дырка испускают вокруг себя акустические фононы. Чем сильнее поле, тем больше рождается фононов и тем больше перегревается решетка.

Чем большее магнитное поле желательно создать, тем меньше времени для этого имеется. Время нарастания поля до максимального значения в упомянутых выше рекордных экспериментах составляло 5 – 20 мкс, после чего происходили тепловой взрыв и разрушение как магнита, так и исследуемого образца.

Это означает, что в близких к запредельным сверхсильных магнитных полях ситуация другая. Экситонная система может не успеть разогреться до разрушения образца и останется относительно холодной. Холодный экситонный газ высокой плотности – это идеальная ситуация для реализации бозе-эйнштейновской конденсации [14].

### Гиперсильное магнитное поле

Теория [6 – 9] предсказывает, что в магнитных полях свыше  $B_{hs} \approx 10^{10}$  Тл (здесь и далее  $B_{hs}$  означает индукцию гиперсильного

магнитного поля) атом водорода должен становиться уже не веретенообразным, а иголкообразным, а именно – отношение продольного к поперечному линейному размеру эллипсоида должно достигать значения 200.

Однако, по-видимому, предложенная модель в столь сильном поле уже неприменима. Дело в том, что в указанном гиперсильном поле энергия взаимодействия электронного магнитного момента атома водорода с внешним магнитным полем  $E_M(B)$  превосходит уровень  $10^6$  эВ, т. е. энергия становится достаточной для рождения электронно-позитронных пар из вакуума и наступает так называемый квантово-электродинамический предел Швингера (КЭП, QEL,  $B_{cr} = m_e^2 c^2 / e\hbar \cong \cong 4,4 \cdot 10^9$  Тл), выше которого происходят совершенно удивительные вещи (см. далее).

Для рождения электронно-позитронной пары за счет взаимодействия магнитного поля не с атомом водорода, а с атомом позитрония, с учетом квантования Ландау (электроны и позитроны в сильном магнитном поле рождаются только в состояниях, соответствующих основному уровню Ландау), магнитное поле  $B$  должно стать таким, чтобы энергия взаимодействия с ним

$$2[E_{L,0e^+}(B) + E_{L,0e^-}(B)]$$

(сравните формулы (3) и (6)) была выше, чем просто

$$m_e c^2 + m_{e^+} c^2 = 2m_e c^2,$$

а именно, она должна следовать выражению

$$E = 2m_e c^2 + E_{L,0e^+}(B) + E_{L,0e^-}(B) = 2m_e c^2 + E_M(B)/2. \quad (7)$$

Другими словами, необходимая энергия взаимодействия  $E_M(B) = E$  должна быть выше  $4m_e c^2$ , а соответствующее гиперсильное магнитное поле должно составлять

$$B_{hs} = B_{cr} \cong 4,4 \cdot 10^9 \text{ Тл.}$$

Поскольку рождение/аннигиляция элек-



тронно-позитронной пары представляет собой принципиально многофотонный процесс (см. табл. 3), необходимая энергия может быть либо «собрана» с двух электронов одного атома, либо получена возбуждением уже существующих связанных электронно-позитронных пар (атомов позитрония). В последнем случае возникает каскадная генерация пар. Попутно отметим, что многофотонность подразумевает возможность «подбарьерного» рождения электронно-позитронной пары (аналогично поглощению света ниже края поглощения у полупроводников).

Для рождения электронно-дырочной пары в кристалле необходима энергия, которая в миллион раз меньше, чем энергия рождения электронно-позитронной пары в вакууме. Она равна энергии  $E_g$  – ширине запрещенной зоны и варьируется от единиц электронвольт для широкозонных полупроводников до десятых долей электронвольт для узкозонных. Аналогично формуле (7), для экситона в магнитном поле имеем критерий

$$E_M(B) > 2E_g,$$

$$B > B_{hs} = 2\mu E_g / e\hbar.$$

Соответствующая зависимость энергии взаимодействия от магнитного поля в кристалле, имеющая вид

$$E_M(B) = E_g + E_{L,0h}(B) + E_{L,0e}(B),$$

была уже представлена на рис. 3 для различных полупроводников.

В таком гиперсильном магнитном поле экситон должен начать испускать не только фононы (см. выше), но и новые электронно-дырочные пары.

Однако прежде чем начать обсуждать эту возможность, стоит вспомнить еще об оптических фононах, энергия которых сравнима с энергией связи экситона (в отличие от акустических фононов с их малой энергией). Взаимодействие экситонов с оптическими фононами было подробно изучено уже в

1950–1970-х гг. теоретически и экспериментально (см., например, статью [15]). Были изучены зависимости экситон-фононного взаимодействия от степени ионности полупроводниковых кристаллов, их дефектности, температуры и т. п.

Собственно, даже сам факт движения экситона Ваннье – Мотта по кристаллу был доказан при изучении «фононных повторений» – спектральных линий, обусловленных испусканием фононов экситонами при движении последних (энергетической релаксацией экситонов). Характерная «максвеллоподобная» форма этих линий отвечает энергии

$$E_X - nE_{LO},$$

где  $E_X$  – энергия основного экситонного состояния ( $E_X = E_g - Ry_{ex}$ );  $E_{LO}$  – энергия оптического фонона;  $n = 1, 2, \dots$

Указанная форма линий и их температурная зависимость были описаны вплоть до значения  $n = 4$  [16].

В то же время модификация экситон-фононного взаимодействия в магнитном поле осталась практически неизученной. Особенно это касается сильного поля, когда теоретический параметр  $E_M(B)/Ry_{ex}$  становится большим.

Таким образом, можно ожидать появления новых экситон-фононных эффектов в сверхсильных, а тем более гиперсильных магнитных полях. Как минимум, в спектрах люминесценции должны во множестве возгораться экситонные линии «фононных повторений».

Возвращаясь к возможности рождения в гиперсильном магнитном поле не только фононов, но и новых электронно-дырочных пар (своего рода «клонирование» экситонов), по аналогии с оптическими фононами можно ожидать появления еще и «(e-h)-повторений» основного экситонного состояния, привязанного к нулевым уровням Ландау электрона и дырки. Однако здесь теория совсем несостоятельна, и простор для фантазии открыт.

Энергия  $E_M = 2E_g$ , например в кристалле InSb ( $E_g \approx 0,2$  эВ), соответствует магнитному

полю  $B_{hs} \approx 50$  Тл, достижимому в современных лабораториях. В табл. 4 приведены значения  $B_{hs}$  для еще нескольких материалов.

Но возможны и более удивительные экситонные эффекты. В работе [17] была сделана попытка представить, что же происходит с веществом при магнитных полях выше КЭП. Предположительно, вакуум становится поляризованным, а свет, входя в область с таким полем, меняет скорость и длину волны. В результате появляется эффект двулучепреломления, как например, в анизотропных кристаллах. Кроме того, фотоны с высокими энергиями начинают самопроизвольно расщепляться на несколько квантов или сливаться в один.

Стоит отметить, что такое расщепление/слияние в гиперсильном магнитном по-

ле может быть достаточно просто описано в терминах физики экситонов следующим образом: кванты  $h\nu \approx 2E_g$  рождают экситоны (пары  $e + h$ ), эти пары/экситоны образуют магнитную молекулу (магнитополимер, см. рис. 4), протяженное «гиперядро» которой окружено обобщенными электронами. Этот магнитополимер из  $N$  экситонов с некоторой вероятностью аннигилирует, т. е. излучается квант света с энергией  $Nh\nu$ . Или наоборот, квант  $Nh\nu$  порождает магнитополимер из  $N$  экситонов, каждый из которых аннигилирует, излучая квант света с энергией  $h\nu \approx 2E_g$ .

Таким образом, в спектре излучения полупроводников в гиперсильном магнитном поле, можно будет при возбуждении светом с энергией около  $N_1 E_g$  наблюдать мощное возгорание нескольких линий излучения, разде-

Таблица 4

**Энергетические и магнитополевые параметры ряда кристаллов и атома позитрония**

Кристалл	$E_g$ , эВ	$B_{hs}$ , Тл	$Ry_{ex}$ , мэВ	$B_{ss}$ , Тл	$B_{hs}/B_{ss}$
<i>Экситон</i>					
InSb	0,2	47	0,60	0,7	67
InAs	0,4	160	1,35	2,7	59
GaSb	0,8	500	2,00	6,2	81
GaAs	1,5	1 400	4,40	21	67
InP	1,4	1 700	6,00	36	47
CdTe	1,6	2 300	11,00	78	30
CdSe	1,8	2 700	11,50	87	31
ZnTe	2,3	4 000	18,00	155	26
GaN	3,5	9 800	25,00	350	28
CdS	2,5	6 800	25,00	340	20
ZnSe	2,8	6 200	35,00	390	16
ZnO	3,0	9 900	42,50	700	14
ZnS	3,8	19 000	49,00	1200	16
<i>Позитроний Ps</i>					
–	$\Sigma(h\nu)$ , эВ	$B_{cr}$ , Тл	$Ry_{Ps}$ , мэВ	$B_{ss}$ , Тл	$B_{cr}/B_{ss}$
–	$10^6$	$9 \cdot 10^6$	$7 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^4$

Обозначения:  $E_g$ ,  $Ry_{ex}$  – ширина запрещенной зоны и энергия связи экситона;  $B_{hs}$ ,  $B_{ss}$  – соответствующие характеристические магнитные поля;  $\Sigma(h\nu)$ ,  $B_{cr}$ ,  $Ry_{Ps}$ ,  $B_{ss}$  – аналогичные величины для атома позитрония.



ленных энергией около  $N_2 E_g$ , обусловленное как вышеописанным «расщеплением/слиянием» квантов света, так и каскадной генерацией электронно-дырочных пар. Спектр возгорающегося излучения будет сложным, со сдвигами линий, обусловленными энергиями связи биэкситона, магнитополимера, отражающим переходы в неосновное состояние экситона и т. п.

Здесь же очевидно, что КЭП задает ограничение для роста энергии связи электрона в атоме водорода. Аналогичная ситуация, по-видимому, реализуется и в случае с экситоном. К сожалению, существующие теории не применимы вблизи КЭП, а количественные результаты расчетов пока недостоверны.

Обращает на себя внимание тот факт, что для атомов позитрония и водорода соотношение сверхсильного и гиперсильного полей составляет сотни тысяч, а для экситонов оно не превосходит 100 (см. табл. 4, где сверхсильные поля  $B_{ss} > 10 B_{Ry}$ ). Соответственно, радиус атома водорода (позитрония), поперечный полю, при достижении гиперсильных полей может уменьшиться на два порядка, а радиус экситона вблизи  $B \approx B_{hs}$  — всего в несколько раз (по самым оптимистичным оценкам, менее, чем в пять раз для узкозонных материалов и чуть больше для широкозонных). Однако следует отметить, что соответствующие магнитные поля находятся далеко за пределами возможностей экспериментаторов. Это несколько ослабляет исследовательский потенциал экситона как модельного объекта для анализа поведения водородоподобных атомов в сверхсильных магнитных полях, хотя эффект магнитополимеризации экситонов все же должен проявляться.

### Плотность энергии гиперсильного поля

Еще одно отличие в поведении экситонов в гиперсильном магнитном поле от поведения в тех же условиях атомов водорода и позитрония связано с радикальным отличием характерных для них плотностей энергии указанного поля.

Магнитное поле — это особый вид ма-

тери, посредством которой осуществляется взаимодействие между движущимися заряженными частицами или телами, обладающими магнитным моментом. Это поле, взаимодействуя с магнитным моментом электрона, увеличивает энергию последнего и само по себе создает определенную плотность энергии.

Рекордная, достигнутая на данный момент плотность энергии в постоянном магнитном поле равна  $6 \text{ кДж/см}^3$ , а в импульсном —  $3 \text{ МДж/см}^3$  [4]. Плотность энергии гиперсильного поля применительно к атому позитрония составляет  $W_{hs} \cong 8 \cdot 10^{18} \text{ Дж/см}^3$ , или  $1,3 \cdot 10^8 \text{ МэВ/Å}^3$  для  $B_{hs} = B_{cr} \cong 4,4 \cdot 10^9 \text{ Тл}$ . В то же время, если представить себе пространство, плотно (полностью) заполненное атомами позитрония в отсутствие поля, то соответствующая плотность энергии составит  $W_{ps} \approx 0,1 \text{ МэВ/Å}^3$  ( $\Sigma(h\nu) \approx 1 \text{ МэВ}$  на объем позитрония  $V_{ps} \approx 10 \text{ Å}^3$ ), т. е. в миллиард раз меньше. Учет же удвоения энергии атома позитрония в гиперсильном поле и одновременного стократного уменьшения его поперечного радиуса увеличивает  $W_{ps}$  на четыре порядка, т. е. не меняет соотношение  $W_{hs} \gg \gg W_{ps}$ . Именно это обстоятельство приводит к так называемому кипению вакуума — рождению большого числа виртуальных частиц в магнитных полях  $B_{Wps}$ , значительно меньших магнитного поля  $B_{cr}$  — гиперсильного поля квантового электродинамического предела (подпороговое рождение, см. предыдущий раздел), овеществлению этих частиц и их последующей аннигиляции — высвечиванию. По сути, такое световое излучение посредством рождения, а затем аннигиляции пар можно интерпретировать как переход энергии постоянного магнитного поля в электромагнитное излучение. В любом случае главный эффект гиперсильного поля — рождение пар — должен наблюдаться в характеристических полях, величиной уже на порядок меньшей гиперсильного.

В полупроводниковых кристаллах роль вакуума выполняет среда с диэлектрической проницаемостью, отличной от единицы, и вместо образования виртуальных электрон-

но-позитронных пар рождаются всевозможные виртуальные квазичастицы с разными энергиями, в том числе виртуальные электронно-дырочные пары. Следуя вышеизложенной «атомной/позитрониевой» картине, можно указать характерные значения  $B_w$  в зависимости от ширины запрещенной зоны и энергии связи экситона (его радиуса) (табл. 5). Чтобы не перегружать табл. 5, в ней приведены параметры только трех абстрактных полупроводников: широкозонного (типа CdS-ZnTe), узкозонного (типа InSb) и «промежуточного» (типа GaSb). Для каждого материала, кроме плотности гиперсильного магнитного поля  $W_{hs}$ , приведена плотность «экситонной энергии»  $W_1$  (плотность выражается как отношение величины  $E_g$  к объему экситона  $V_{ex}$ , т. е. рассматривается как бы плотно заполненный экситонами кристалл). В сверхсильном поле множитель, учитывающий изменение радиуса и энергии электронно-дырочной пары, не превышает 100. Энергия  $W_2$  рассчитана в предположении о сверхплотном экситонном газе с одним экситоном на кристаллическую

ячейку (или электронно-дырочной жидкости, см. далее). Также указаны магнитные поля, плотность энергии которых определяет значения  $W_1$  и  $W_2$ .

Заметим, что магнитное поле, равное всего 5 Тл, в случае узкозонного материала соответствует плотности энергии поля 10 Дж/см<sup>3</sup>, или  $1,6 \cdot 10^{-4}$  эВ/Å<sup>3</sup>, что соответствует плотности экситонов  $\rho \cong 8 \cdot 10^{20}$  см<sup>-3</sup>, или одному экситону на шесть ячеек. В связи с этим следует отметить, что экситон Ванье – Мотта (экситон большого радиуса), будучи квазичастицей, не связан ограничением «плотного заполнения» пространства, волновая функция такого экситона распределена по всему кристаллу (в отличие от экситона Френкеля, локализованного на ячейке в каждый момент времени), поэтому экситонная плотность гипотетически может возрастать неограниченно. Однако при повышении плотности, с одной стороны, начинаются эффекты взаимной экранировки экситонами кулоновского взаимодействия внутри каждого из них, что приводит к превращению экситонного газа не в экситон-

Таблица 5

**Зависимость плотностей энергии и соответствующих характеристических магнитных полей от параметров полупроводниковых кристаллов**

Величина	Значение для полупроводника		
	широкозонного	«промежуточного»	узкозонного
$E_g$ , эВ	2,4	0,8	0,2
$V_{ex}$ , 10 <sup>6</sup> Å <sup>3</sup>	0,08	10	500
$B_{hs}$ , Тл	5000	500	50
$W_{hs}$ , Дж/см <sup>3</sup>	10 <sup>7</sup>	10 <sup>5</sup>	10 <sup>3</sup>
$W_1$ , Дж/см <sup>3</sup>	2	$5 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-5}$
$B_1$ , Тл	2	0,1	0,007
$W_2$ , Дж/см <sup>3</sup>	1000	250	60
$B_2$ , Тл	50	25	12

Об о з н а ч е н и я:  $E_g$ ,  $V_{ex}$  – ширина запрещенной зоны и объем экситона;  $B_{hs}$  – его характеристическое магнитное поле;  $W_{hs}$  – плотность энергии, соответствующая  $B_{hs}$ ;  $W_1$ ,  $W_2$  – плотности энергии сверхсильного и гиперсильного полей;  $B_1$ ,  $B_2$  – магнитные поля, соответствующие  $W_1$  и  $W_2$ .



ную жидкость, а в жидкость электронно-дырочную; с другой стороны, экситон — это частица, описываемая в одноэлектронном приближении, и при повышении экситонной плотности это описание становится все менее оправданным.

Ясно, что не вся энергия магнитного поля перейдет в экситонные возбуждения. Тем не менее, если генерация электронно-дырочных пар будет происходить с достаточно высокой скоростью, то возможными станут все известные эффекты экситонного газа высокой плотности ( $\rho > 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ): образование биэкситонов (триэкситонов и т. д., вплоть до опять же магнитополимеров) или экситонной/электронной жидкости, бозе-эйнштейновская конденсация. Другими словами, в экстремальных магнитных полях, даже при слабом лазерном возбуждении кристалла (когда плотность рождаемых лазером экситонов предельно низка), можно, тем не менее, получать высокую плотность экситонов.

**Перспективные материалы для магнитооптических исследований в сверхсильных и гиперсильных магнитных полях**

Можно сделать вывод, что чем меньше энергия связи электрона и дырки  $Ry_{ex}$  (чем больше радиус экситона Ванье – Мотта  $a_{ex}$ ), тем более отчетливо выражены обсуждаемые эффекты. Если учесть, что, как правило,  $Ry_{ex}$  тем меньше, чем меньше ширина запрещенной зоны полупроводника  $E_g$  (см., например,

табл. 4), то можно заключить, что узкозонный материал с величиной запрещенной зоны  $E_g < 0,2 \text{ эВ}$  будет относиться к перспективным.

Стоит оценить (при сохранении тенденций) предположительные параметры такого гипотетического материала (табл. 6). Соответственно, можно рассчитать и зависимость энергии основного («нулевого») уровня Ландау и энергии связи диамагнитного экситона от магнитного поля (сравните рис. 2 и 3). Полученные расчетные данные для трех вариантов материалов, представленных в табл. 6 (в дополнение к известному варианту 1), приведены на рис. 5.

Анализ данных табл. 6 и рис. 5 показывает, что даже в случае материала с  $E_g = 0,05 \text{ эВ}$  уже в отнюдь не рекордных магнитных полях до 10 Тл, экситонная линия (или оптический переход между основными уровнями Ландау электрона и дырки) будет смещаться из инфракрасной в видимую область спектра, как в подавляющем большинстве других полупроводников. Кроме того, увеличение энергии связи экситона расширит температурный диапазон, в котором время жизни экситона достаточно велико: на 10 К (в грубом приближении), при возрастании  $Ry_{ex}$  на 1 мэВ.

К сожалению, среди гомоатомных и бинарных полупроводников самые узкозонные соединения имеют значения  $E_g \approx 0,2 - 0,3 \text{ эВ}$ , например, такие кристаллы, как InSb и соединения с инвертированной зонной структу-

Таблица 6

**Параметры экстремально узкозонных полупроводников**

Номер варианта	$E_g$ , мэВ	$\mu/m_e$	$\epsilon$	$Ry_{ex}$ , мэВ	$B_{ss}$ , Тл	$B_{hs}$ , Тл
1	200	0,014	17,3	0,60	0,70	47,0
2	150	0,010	17,5	0,47	0,40	25,0
3	100	0,007	17,8	0,31	0,20	13,0
4	50	0,004	18,0	0,17	0,06	3,5

Примечания. 1. Обозначения величин соответствуют приведенным в табл. 2 и 4,  $\epsilon$  — диэлектрическая постоянная. 2. Вариант 1 относится, например, к кристаллам InSb.

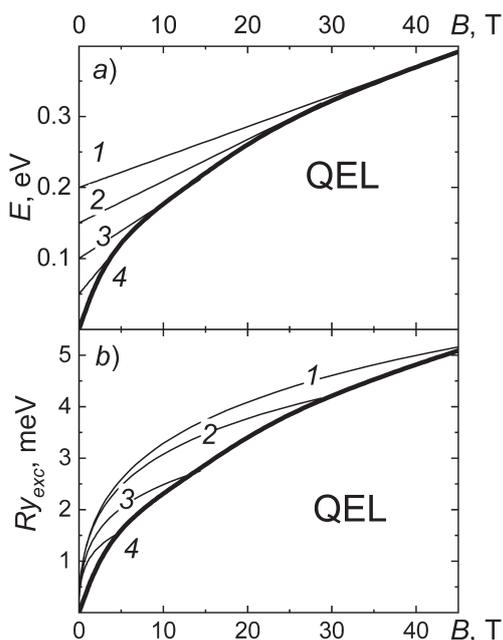


Рис. 5. Расчетные зависимости энергии основного уровня Ландау (а) и энергии связи диамагнитного экситона (б) от магнитного поля в четырех полупроводниках (номера кривых соответствуют номерам вариантов в табл. 6)

рой на основе ртути: HgS, HgSe, HgTe.

Уже известны несколько экстремально узкозонных тернарных (тройных) соединений ( $E_g \leq 0,1$  эВ) на основе висмута индия InBi: InAs<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>, InSb<sub>1-x</sub>Bi<sub>x</sub>, а также халькогенидов ртути, но в виде твердых растворов, т. е. с большим количеством структурных дефектов, мешающих существованию экситонов (например, в случае соединения InBi основной проблемой является образование нанокристаллов висмута). Можно надеяться, что развитие технологий приведет все же к появлению кристаллов достаточного качества со значениями  $E_g \leq 0,1$  эВ.

### Заключение

Подводя итоги обсуждению свойств экситона в экстремально сильных магнитных полях, кратко просуммируем основные ожидаемые эффекты.

В сверхсильном поле, когда  $B > B_{ss} \approx 10 B_{Ryexc}$ , наиболее интересна модификация межэк-

ситонного взаимодействия, приводящая к большей стабильности биэкситонов и появлению экситонных «полимеров». При этом смещение в видимую часть спектра энергии перехода между основными уровнями Ландау электрона и дырки в сверхсильном поле для большинства полупроводников упрощает эксперименты. Перестройка волновой функции основного состояния экситона от шарообразной до иголкообразной формы не столь велика, как у атома водорода в соответствующих атомных сверхсильных полях, поэтому эффект увеличения энергии связи, скорее всего, окажется слабовыраженным. В то же время рост времени жизни экситона, который пока трудно оценить, может привести к созданию холодного экситонного газа высокой плотности, т. е. реализовать условия для бозе-эйнштейновской конденсации экситонов.

В гиперсильном магнитном поле, при значениях индукции

$$B > B_{hs} = 2\mu E_g / e\hbar$$

для экситона в твердом теле или

$$B > B_{hs} = 4\mu m_e c^2 / e\hbar$$

для водорода/позитрония в вакууме, становятся возможными «клонирование» экситонов (соответственно, электронно-позитронных пар), эффект магнитоиндуцированного двулучепреломления и эффект кратного умножения/деления частоты падающего на кристалл света.

### Благодарности и пожелания

Авторы выражают благодарность экспертам Международного научно-технического центра (МНТЦ-ISTC), поддержавшим проект № 3986 «Моделирование низкоразмерного состояния материи в экспериментах с экситонами в сильных и сверхсильных магнитных полях» [18], не получивший, к сожалению, финансирования в рамках бюджетных возможностей МНТЦ. Эксперименты со сверхсильными и гиперсильными маг-



нитными полями являются крайне дорогостоящими. Тем не менее, авторы надеются, что в самом ближайшем будущем наработанный ими задел окажется востребован и магнитолевые эксперименты с эксито-

ном — этой неисчерпаемой квазичастицей — дадут бесценную информацию о свойствах не только твердого тела и магнитоатмосфер нейтронных звезд, но даже, возможно, и самой материи.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Экситоны. Под ред. Э.И. Рашбы и М.Д. Стерджа. М.: Наука, 1985. 616 с.
2. Сейсян Р.П. Спектроскопия диамагнитных экситонов. М.: Наука, 1984. 272 с.
3. Combescot M. Semiconductors in strong laser fields // Phys. Reports. 1992. Vol. 221. No. 4. Pp. 167–247.
4. Борисков Г.В., Быков А.И., Долотенко М.И., Егоров Н.И., Кудасов Ю.Б., Платонов В.В., Селемир В.Д., Таценко О.М. Физические исследования в сверхсильных магнитных полях // УФН. 2011. Т. 181. № 4. С. 441–447.
5. Database Springer Materials — properties of materials [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://materials.springer.com>. Дата обращения: 25.08.2020.
6. Кудрявцев В.С., Кадомцев Б.Б. Вещество в сверхсильном магнитном поле // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 1. С. 144–152.
7. Либерман М.А., Йоханссон Б. Вещество в сверхсильном магнитном поле и структура поверхности нейтронных звезд // УФН. 1995. Т. 165. № 2. С. 121–142.
8. Korolev A.V., Liberman M.A. Bose condensation and superfluidity of excitons in a high magnetic field // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50. No. 19. Pp. 14077–14089.
9. Кадомцев Б.Б., Кудрявцев В.С. Молекулы в сверхсильном магнитном поле // Письма в ЖЭТФ. 1971. Т. 13. № 1. С. 15–19.
10. Москаленко С.А., Либерман М.А., Москаленко Е.С., Думанов Е.В., Подлесный И.В. Когерентность двумерных электронно-дырочных систем: спонтанное нарушение непрерывных симметрий (обзор) // ФТТ. 2013. Т. 55. № 8. С. 1457–1487.
11. Гельмонт Б.Л., Михайлов Г.В., Панфилов А.Г., Разбирин Б.С., Сейсян Р.П., Эфрос А.Л. Диамагнитные экситоны в гексагональных кристаллах  $A_2B_6$  // ФТТ. 1987. Т. 26. № 6. С. 1730–1739.
12. Potekhin A.Y. Cyclotron harmonics in opacities of isolated neutron star atmospheres // Astronomy & Astrophysics. 2010. Vol. 518. July–August. P. A24. Pp. 1–12.
13. Разбирин Б.С., Уральцев И.Н., Михайлов Г.В. Биэкситоны в кристаллах  $A_2B_6$  // Письма в ЖЭТФ. 1977. Т. 25. № 4. С. 191–194.
14. Корнелл Э.А., Виман К.Э., Кетгерле В. Нобелевские лекции по физике — 2001 // УФН. 2003. Т. 173. № 12. С. 1319.
15. Гросс Е.Ф., Пермогоров С.А., Разбирин Б.С. Аннигиляция экситонов и экситон-фононное взаимодействие // УФН. 1971. Т. 103. № 3. С. 431–446.
16. Ключихин А.А., Пермогоров С.А., Резницкий А.Н. Многофононные процессы в резонансном рассеянии и экситонной люминесценции кристаллов // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. № 6 (12). С. 2230–2251.
17. Kouveliotou C., Duncan R.C., Thompson C. Magnetars // Scientific American. 2003. Vol. 288. No. 2. February. Pp. 35–41.
18. Simulation of the low-dimensional state of the matter in experiments on excitons in high and ultra-high magnetic fields. URL: <http://www.istc.int/en/project/178BFC04F2F46C9BC325762C0029C9C6>.

*Статья поступила в редакцию 04.08.2020, принята к публикации 03.09.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ВАГАНОВ Сергей Анатольевич** – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе» Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул. 26  
SV.Exciton@mail.ioffe.ru

**ПАНФИЛОВ Андрей Григорьевич** – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе» Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул. 26  
a.panfilov@mail.ioffe.ru

**СЕЙСЯН Рубен Павлович** – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе» Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул. 26  
rseis@ffm.ioffe.ru

## REFERENCES

1. Excitons: selected chapters (Modern problems in condensed matter sciences), Abridged edition by E.I. Rashba (author), M.D. Sturge (editor), Elsevier Science Ltd; Abridged Edition (May 1, 1987).
2. **Seysyan R.P.**, Spektroskopiya diamagnitnykh eksitonov [Spectroscopy of diamagnetic excitons]. Nauka, Moscow, 1984 (in Russian).
3. **Combescot M.**, Semiconductors in strong laser fields, Phys. Reports. 221 (4) (1992) 167–247.
4. **Boriskov G.V., Bykov A.I., Dolotenko M.I., et al.**, Research in ultrahigh magnetic field physics, Phys. Usp. 54 (4) (2011) 421–427.
5. Database SpringerMaterials – properties of materials, URL: <http://materials.springer.com>.
6. **Kadomtsev B.B., Kudryavtsev V.S.**, Matter in a superstrong magnetic field, Soviet Physics JETP. 35 (1) (1972) 76–80.
7. **Liberman M.A., Johansson B.**, Properties of matter in ultrahigh magnetic fields and the structure of the surface of neutron stars, Phys. Usp. 38 (2) (1995) 117–136.
8. **Korolev A.V., Liberman M.A.**, Bose condensation and superfluidity of excitons in a high magnetic field, Phys. Rev. B. 50 (19) (1994) 14077–14089.
9. **Kadomtsev B.B., Kudryavtsev V.S.**, Molecules in a superstrong magnetic field, Soviet Physics JETP Letters. 13 (9) (1971) 42–54.
10. **Moskalenko S.A., Dumanov E.V., Podlesny I.V., et al.**, Coherence of two-dimensional electron-hole systems: spontaneous breaking of continuous symmetries: a review, Physics of the Solid State. 55 (8) (2013) 1563–1595.
11. **Gelmont B.L., Mikhaylov G.V., Panfilov A.G., et al.**, Diamagnitnyye eksitony v geksagonalnykh kristallakh  $A_2B_6$  [Diamagnetic excitons in the hexagonal crystals], Soviet Physics. Solid State. 26 (6) (1987) 1730–1739.
12. **Potekhin A.Y.**, Cyclotron harmonics in opacities of isolated neutron star atmospheres, Astronomy & Astrophysics. 518 (2010) A24, 1–12.
13. **Razbirin B.S., Uraltsev I.N., Mikhaylov G.V.**, Biexcitons in  $A_2B_6$  crystals, Soviet Physics JETP Letters. 25 (4) (1977) 174–177.
14. **Kornell E.A., Wieman K.E., Ketterle W.**, Nobelevskiye lektsii po fizike – 2001 [Nobel lectures on physics – 2001], Phys. Usp. 173 (12) (2003) 1319 (in Russian).
15. **Gross E.F., Permogorov S.A., Razbirin B.S.**, Annihilation of excitons and exciton-phonon interaction, Sov. Phys. Usp. 14 (3) (1971) 104–112.
16. **Klochikhin A.A., Permogorov S.A.**,



**Reznitskii A.N.**, Multiphonon processes in resonant scattering and exciton luminescence of crystals, *Soviet Physics JETP*. 44 (6) (1976) 2230–2251.

17. **Kouveliotou C., Duncan R.C., Thompson C.**, Magnetars, *Scientific American*. 288 (2 Febru-

ary). (2003) 35–41.

18. Simulation of the low-dimensional state of the matter in experiments on excitons in high and ultra-high magnetic fields, URL: <http://www.istc.int/en/project/178BFC04F2F46C9BC32-5762C0029C9C6>.

*Received 04.08.2020, accepted 03.09.2020.*

## THE AUTHORS

**VAGANOV Sergei A.**

*Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences*

26 Politekhnicheskaya, St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
SV.Exciton@mail.ioffe.ru

**PANFILOV Andrei G.**

*Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences*

26 Politekhnicheskaya, St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
a.panfilov@mail.ioffe.ru

**SEISYAN Ruben P.**

*Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences*

26 Politekhnicheskaya, St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
rseis@ffm.ioffe.ru

DOI: 10.18721/JPM.13402  
УДК 538.911, 539.26

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ ДИФFUЗНОГО РАССЕЙЯНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ НИОБАТА СТРОНЦИЯ-БАРИЯ SBN-60 В РЕЛАКСОРНОЙ ФАЗЕ

**П.Ю. Ванина<sup>1</sup>, Н.С. Силин<sup>1</sup>, А.А. Босак<sup>2</sup>,  
Д.Ю. Чернышов<sup>1</sup>, А.А. Набережнов<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Европейский центр синхротронного излучения (ESRF),  
г. Гренобль, Франция;

<sup>3</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Температурные зависимости диффузного рассеяния синхротронного излучения в монокристалле модельного релаксора  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$  (SBN-60) исследованы в интервале температур 90 – 290 К в окрестности узлов обратной решетки (332), (412) и (002) в направлениях [001], [010], [110]. Показано, что диффузное рассеяние (DS) является сильно анизотропным, а его интенсивность  $I_{DS}(T, q)$  пропорциональна  $q^{-\alpha}$  ( $q$  – приведенный волновой вектор). Получены температурные зависимости параметра  $\alpha$  для указанных направлений и установлено, что микроскопическая перестройка структуры в SBN-60 продолжается при охлаждении и ниже температуры перехода в релаксорное состояние.

**Ключевые слова:** диффузное рассеяние, синхротронное излучение, релаксор, стронций-бариевый ниобат, кристаллическая структура

**Ссылка при цитировании:** Ванина П.Ю., Силин Н.С., Босак А.А., Чернышов Д.Ю., Набережнов А.А. Температурная эволюция диффузного рассеяния в монокристалле ниобата стронция-бария SBN-60 в релаксорной фазе // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 28–38. DOI: 10.18721/JPM.13402

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## TEMPERATURE EVOLUTION OF DIFFUSE SCATTERING IN THE STRONTIUM-BARIUM NIOBATE SBN-60 SINGLE CRYSTAL IN THE RELAXOR STATE

**P.Yu. Vanina<sup>1</sup>, N.S. Silin<sup>1</sup>, A.A. Bosak<sup>2</sup>,  
D.Yu. Chernyshov<sup>1</sup>, A.A. Naberezhnov<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> European Synchrotron Radiation Facility,  
Grenoble, France;

<sup>3</sup> Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,  
St. Petersburg, Russian Federation

Temperature dependences of synchrotron radiation diffuse scattering on the model relaxor single crystal  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$  (SBN-60) have been studied in the temperature interval from 90 to 290 K in the vicinities of lattice points (332), (412) and (002) in the [001], [010] and [110] directions. This diffuse scattering (DS) has been shown to be strongly anisotropic with intensity  $I_{DS}(T, q)$  proportional  $q^{-\alpha}$

where  $q$  is a reduce wavevector. The temperature dependences of the parameter  $\alpha$  have been obtained, and it is established, that the microscopic modification of structure in the SBN-60 continues on cooling below the temperature of transition to the relaxor state.

**Keywords:** diffuse scattering, synchrotron radiation, relaxor, strontium-barium niobate, crystal structure

**Citation:** Vanina P.Yu., Silin N.S., Bosak A.A., Chernyshov D.Yu., Naberezhnov A.A., Temperature evolution of diffuse scattering in the strontium-barium niobate SBN-60 single crystal in the relaxor state, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 28–38. DOI: 10.18721/JPM.13402

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Твердые растворы ниобата стронция-бария (SBN) являются модельной одноосной сегнетоэлектрической структурой, относящейся к типу вольфрамовых бронз с частично разупорядоченной структурой. При процентном содержании стронция  $50 < x < 75$  % эти растворы  $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Nb}_2\text{O}_6$  (далее SBN- $x$ ) демонстрируют ярко выраженные релаксорные свойства, причем степень этих свойств растет с увеличением концентрации стронция [1].

Основа структуры SBN- $x$  — это два типа октаэдров  $\text{NbO}_6$ , объединенных атомами кислорода в объемный каркас. В этом каркасе имеется три типа структурных каналов, направленных вдоль полярной оси  $c$  (вдоль направления [001]). Каналы треугольного сечения в SBN- $x$  всегда пусты, средние каналы четырехугольного сечения ( $A_1$ ) заполняются только атомами стронция, широкие пятиугольные каналы ( $A_2$ ) заполнены атомами бария и стронция [2]. Особенностью кристаллической структуры таких соединений является то, что на шесть возможных позиций в каналах  $A_1$  и  $A_2$  приходится пять двухвалентных катионов и одна вакансия, что обуславливает статистический характер распределения катионов [2].

Твердые растворы типа SBN- $x$ , особенно при  $x \approx 60$  %, привлекают большое внимание, благодаря своим релаксорным, пирозлектрическим, диэлектрическим, электрооптическим и нелинейным оптическим свойствам [3 – 6]. Кроме того, было выяснено [7], что в диапазоне концентраций стронция 50 – 60 % существует ее критическое значение, выше

которого нормальные сегнетоэлектрические домены перестают существовать, а вместо них наблюдается структура, состоящая из иглоподобных нанополярных доменов.

При комнатной температуре кристалл SBN-60 имеет тетрагональную структуру со следующими параметрами решетки:

$$\begin{aligned} a &= b = 12,4566(9) \text{ \AA}, \\ c &= 7,8698(6) \text{ \AA}. \end{aligned}$$

Следует также отметить, что структура SBN-60 является модулированной, с векторами модуляции

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1 &= 0,3075(6) (\mathbf{a}^* + \mathbf{b}^*), \\ \mathbf{q}_2 &= 0,3075(6) (\mathbf{a}^* - \mathbf{b}^*), \end{aligned}$$

где  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$  — векторы обратного пространства.

Наиболее адекватно кристаллическая структура монокристалла SBN-61 (близкого по концентрации) была решена в работе [8] как несоизмерная структура в пятимерном пространстве в рамках суперпространственной группы

$$P4bm (pp1/2, p-p1/2).$$

Модуляция структуры впервые наблюдалась в работе [9], и было показано [8], что она связана с коллективным искажением кислородных октаэдров и случайным заселением  $4c$ -позиций в структуре SBN ионами стронция и бария. Для монокристалла SBN-60 (он близок по структуре и свойствам к SBN-61, допированному церием) была также исследована критическая динамика. Было уста-

новлено [10 – 12], что при охлаждении из высокотемпературной параэлектрической фазы, по мере приближения к температуре перехода в релаксорное состояние, вблизи узлов обратной решетки типа (00L) наблюдается поперечное диффузное рассеяние (DS) на сегнетоэлектрических флуктуациях, интенсивность которого увеличивается при понижении температуры; при этом корреляционная длина  $r_c$  возрастает. В области перехода DS состоит из двух компонент, одна из которых хорошо описывается лоренцианом

$$G_1 \sim 1/(\kappa^2 + q^2),$$

а вторая – квадратированным лоренцианом

$$G_2 \sim 1/(\kappa^2 + q^2)^2.$$

Здесь  $\kappa$  – обратная корреляционная длина ( $r_c \sim 1/\kappa$ ),  $q$  – приведенный волновой вектор.

Следует отметить, что интенсивность второй компоненты резко возрастает при прохождении через температуру перехода. Была получена зависимость корреляционной длины  $r_c(T)$  от температуры и показано, что ниже 340 К этот параметр «замерзает» и остается практически постоянным вплоть до 290 К [10]. Приложение внешнего электрического поля приводит к подавлению обеих компонент диффузного рассеяния, и в первую очередь, компоненты, описываемой функцией  $G_2$  [10, 13].

Что касается особенностей кристаллической структуры SBN-60 (и ее температурной эволюции) при охлаждении в релаксорной фазе, то этот вопрос в настоящее время малоизучен: есть только результаты, указывающие на существование двух различных вкладов в диффузное рассеяние [14]. Оба типа рассеяния являются существенно анизотропными: первый наблюдается в окрестности сверхструктурных отражений и вероятно связан с рассеянием на волнах смещений в системе кислородных октаэдров, а второй – с наличием локальных областей скоррелированных смещений ионов стронция и бария в пятиугольных каналах SBN-60.

В данной работе представлены первые результаты исследования температурной эволюции DS при охлаждении от комнатной температуры до 90 К.

### Экспериментальная часть

Измерения проводились на линии ID29 источника синхротронного излучения в Европейском центре синхротронного излучения (ESRF). Длина волны падающего излучения составляла  $\lambda = 0,7749 \text{ \AA}$ ,  $\Delta\lambda/\lambda \approx 2 \cdot 10^{-4}$ . Образцы представляли собой игольчатые кристаллы толщиной примерно 100 мкм.

Двумерные распределения интенсивности рассеяния рентгеновского излучения были получены при помощи пиксельного детектора PILATUS6M [15]. Уточнение матрицы ориентаций и предварительная реконструкция обратного пространства были проведены с использованием пакета программного обеспечения CrysAlis [16]. Измерения проводились при охлаждении в интервале температур от 290 до 90 К, стабильность поддержания температуры во время измерений была не хуже 1,5 К.

### Экспериментальные результаты и их обсуждение

Исследования температурной эволюции DS проводились в окрестности узлов обратной решетки (002), (412) и (332) в трех направлениях: [001], [010] и [110], для получения информации о возможной анизотропии диффузного рассеяния.

При подгонке зависимость интенсивности  $I$  от приведенного волнового вектора  $q$  аппроксимировалась следующим выражением:

$$I(q) = I_{DS}(q) + I_{Br}(q) + I_{bkg}(q). \quad (1)$$

Первое слагаемое соответствует диффузному рассеянию DS, которое при достаточно больших значениях  $q$  ( $q > \kappa$ ) можно аппроксимировать зависимостью  $I_{DS}(q) \sim q^{-\alpha}$ . Второе слагаемое  $I_{Br}(q)$  описывает брэгговский вклад, а третье  $I_{bkg}(q)$  – линейный вклад фона в суммарное рассеяние.

Упругий пик описывался гауссианом, из

подгонки определялось точное положение  $q_c$  максимума. Фон аппроксимировался линейной функцией, параметры определялись из усреднения по 10 – 14 точкам, которые выбирались слева и справа от  $q_c$  при больших значениях  $q$ , когда вклад упругого пика становился пренебрежимо малым, как и вклад от DS. При  $|q| < 0,09$ , во всех случаях интенсивный брэгговский пик не позволял надежно выделить более слабое DS, а при  $|q| > 0,35$  диффузное рассеяние уже было не отличить от фона.

Рассмотрим поведение температурных зависимостей интенсивности DS в монокристалле SBN-60 в направлении [001]. На рис. 1 хорошо видно, что интенсивность DS в этом направлении при всех значениях  $q$  практически не зависит от температуры.

Далее, для этого направления были построены зависимости интенсивностей DS от  $q$  во всей исследованной температурной области в дважды логарифмическом масштабе (рис. 2). На приведенных графиках хорошо видно, что для всех зависимостей  $I_{DS}(q)$  выполняется соотношение  $I_{DS}(q) \sim q^{-\alpha}$ . Коэффициенты  $\alpha$ , соответствующие наклонам полученных прямых, приведены в таблице.

Здесь следует отметить, что для всех исследованных узлов обратной решетки эти параметры практически остаются неизменными во всем исследованном температурном интервале. Другими словами, в направлении [001] диффузное рассеяние не изменяется при охлаждении.

По аналогичной процедуре были получены температурные зависимости интенсивно-

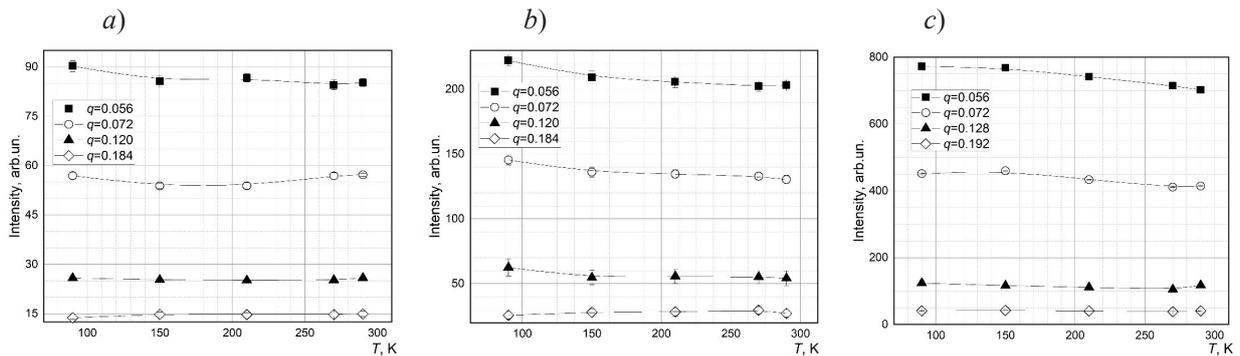


Рис. 1. Температурные зависимости интенсивностей диффузного рассеяния синхротронного излучения  $I_{DS}(q, T)$  в SBN-60 при различных значениях  $q$  в направлении [001] вблизи узлов (332) (a), (412) (b), (002) (c).

Кривые на рисунках – результат процедуры сглаживания

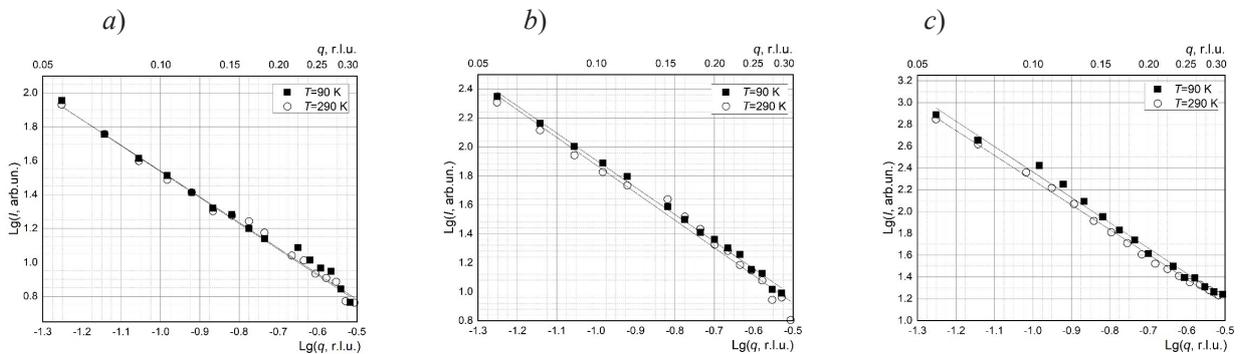


Рис. 2. Зависимости интенсивности DS от приведенного волнового вектора (в дважды логарифмическом масштабе) в SBN-60 при температурах 90 и 290 K в направлении [001] для узлов (332) (a), (412) (b), (002) (c). Значения  $q$  указаны в r.l.u. (reduced lattice unit). Линии на рисунках – результат подгонки

стей DS рентгеновского излучения  $I_{DS}(q, T)$  в SBN-60, полученные в направлениях [010] и  $[1\bar{1}0]$  для значений приведенного волнового вектора в интервале  $0,112 < |q| < 0,288$  в температурной области от 90 до 290 К (рис. 3). Из данных на рис. 3 видно, что для всех исследованных узлов при малых значениях  $q$  интенсивность диффузного рассеяния  $I_{DS}(q, T)$  растет при охлаждении.

Далее, были построены зависимости интенсивностей диффузного рассеяния от приведенного волнового вектора  $q$ , в дважды логарифмическом масштабе для всего интервала температур 90 – 290 К (см. в таблице). На рис. 4 для сравнения приведены зависимости  $I_{DS}(q)$  при температурах 290 и 90 К. Хорошо видно, что и в этих случаях хорошо выполняется линейный характер полученных зависимостей, т. е. вблизи этих узлов наблюдается степенная зависимость интенсивности DS:  $I_{DS}(q) \sim q^{-\alpha}$ . Отметим, что при охлаждении параметры  $\alpha$ , характеризующие наклон кривых, существенно возрастают и достигают следующих значений: для узла (332) – 3,52 и 3,48 в направлениях [010] и  $[1\bar{1}0]$  соответственно; для узла (412) – 3,32 и 3,18, а для узла (002) – 3,20 и 2,76 при  $T = 90$  К (см. таблицу).

Таким образом, анализ полученных данных указывает на существование двух вкла-

дов в диффузное рассеяние:

DS-1, который вдоль направлений [010] и  $[1\bar{1}0]$  возрастает при понижении температуры, причем при этом растет и параметр  $\alpha$ ;

DS-2, который практически не зависит от температуры вдоль направления [001], равно, как и параметр  $\alpha$ , во всем исследованном интервале 90 – 290 К, однако в окрестности разных узлов обратной решетки значения параметра  $\alpha$  различаются.

Следует подчеркнуть, что полученные температурные зависимости интенсивностей DS-1 и DS-2 позволяют утверждать, что ни один из типов рассеяния не является термодиффузным (TDS – Thermal Diffuse Scattering), интенсивность которого должна увеличиваться при повышении температуры [17].

Как уже упоминалось ранее, в работе [10] было показано, что при охлаждении из параэлектрической фазы, помимо обычного для критического рассеяния вклада, описываемого лоренцианом  $G_1$ , появляется дополнительный вклад от квадрированного лоренциана  $G_2$ , причем этот вклад увеличивается при переходе в релаксорную фазу. Это приводит к тому, что суммарное диффузное рассеяние описывается суперпозицией функций  $G_1$  и  $G_2$ , а при достаточно больших значениях  $q$  ( $q > \kappa$ ) коэффициент  $\alpha$  в законе рассеяния  $q^{-\alpha}$ , наблюдаемом в

Таблица

**Значения параметра  $\alpha$  для прямых  $\lg(I_{DS}) = -\alpha \lg(q) + b$ , полученные при разных температурах для разных направлений и узлов решетки в кристалле SBN-60 (см. рис. 2)**

Узел обратной решетки	Направление в кристалле	Значение параметра $\alpha$				
		90 К	150 К	210 К	270 К	290 К
(332)	[001]	1,53(11)	1,49(2)	1,52(5)	1,51(4)	1,51(3)
	[010]	3,52(10)	3,47(9)	3,45(7)	3,18(4)	2,89(10)
	$[1\bar{1}0]$	3,48(6)	3,49(4)	3,50(5)	3,36(5)	2,87(5)
(412)	[001]	1,87(3)	1,81(4)	1,86(6)	1,81(5)	1,85(6)
	[010]	3,32(5)	3,23(6)	3,22(6)	3,04(4)	2,80(5)
	$[1\bar{1}0]$	3,18(5)	3,25(5)	3,27(5)	3,24(6)	2,83(5)
(002)	[001]	2,33(5)	2,33(4)	2,31(4)	2,27(4)	2,27(3)
	[010]	3,20(5)	3,15(5)	3,11(5)	2,87(5)	2,57(3)
	$[1\bar{1}0]$	2,76(1)	2,68(2)	2,57(2)	2,24(4)	1,92(4)

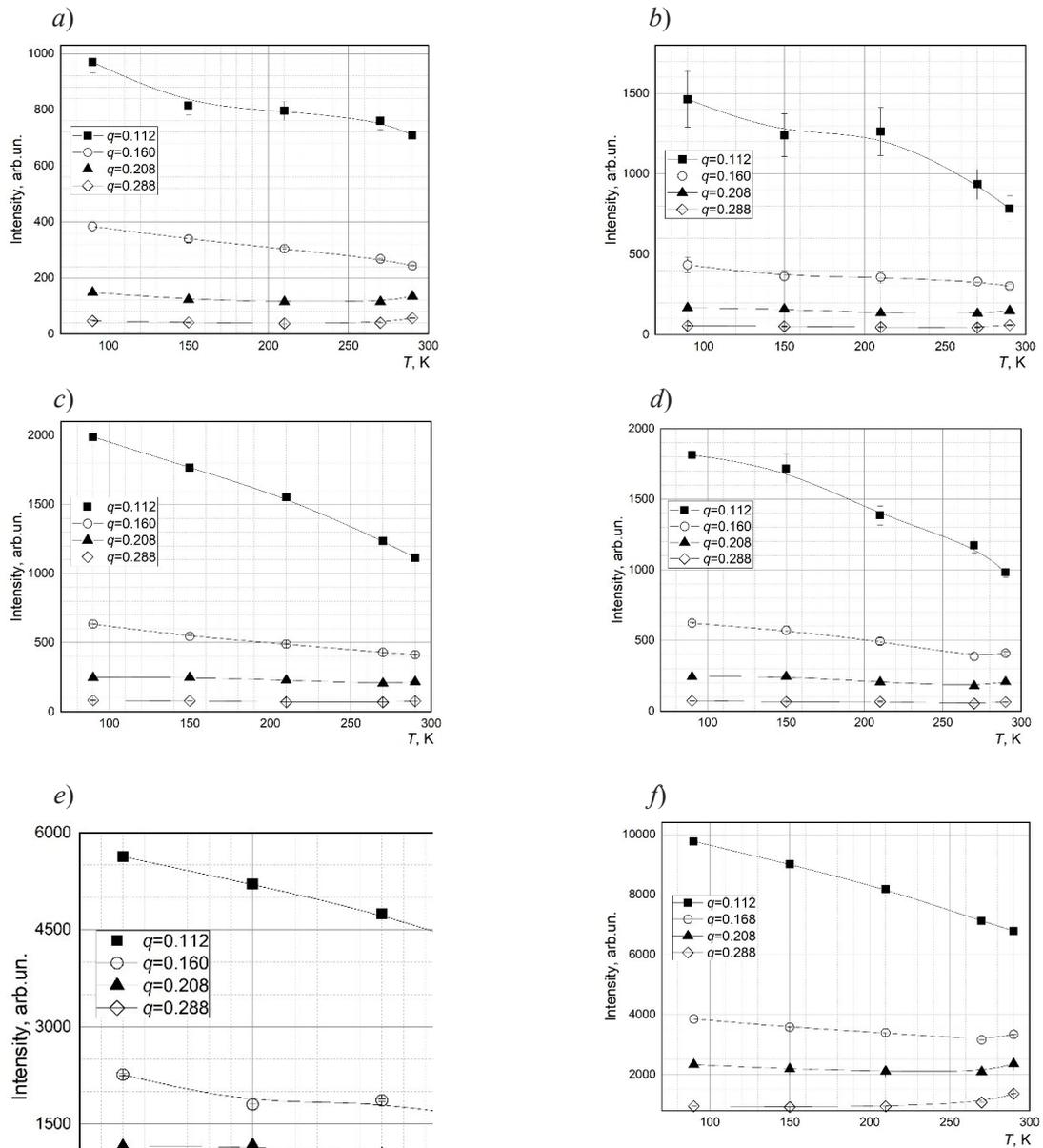


Рис. 3. Температурные зависимости интенсивностей DS  $I_{DS}(q, T)$  в монокристалле SBN-60 при различных значениях  $q$  вблизи узла (332) в направлениях  $[010]$  (a),  $[1\bar{1}0]$  (b), вблизи узла (412) в направлении  $[010]$  (c),  $[1\bar{1}0]$  (d) и вблизи узла (002) в направлениях  $[010]$  (e),  $[1\bar{1}0]$  (f).

Кривые на рисунках – результат процедуры сглаживания

эксперименте, становится больше двух. Этот же эффект мы наблюдаем и в данном случае для DS-1 при понижении температуры, причем рост величины  $\alpha$  при охлаждении свидетельствует об увеличении вклада  $G_2$  в DS-1. В некоем смысле подобное поведение параметра  $\alpha$  наблюдалось в работе [18] для монокристалла  $\text{KTaO}_3$ , допированного литием (1,6 % Li), ниже  $T_C$  (температура фазового перехода составляла около 35 К).

В прямом пространстве функции  $G_1$  соответствует (в изотропном трехмерном случае) корреляционная функция вида

$$C_1 = \exp(-kr)/r,$$

характеризуемая наличием «обрезающего» множителя  $1/r$ , т. е. такой коррелятор характерен для областей локального упорядочения (корреляции) с достаточно резкими границами.

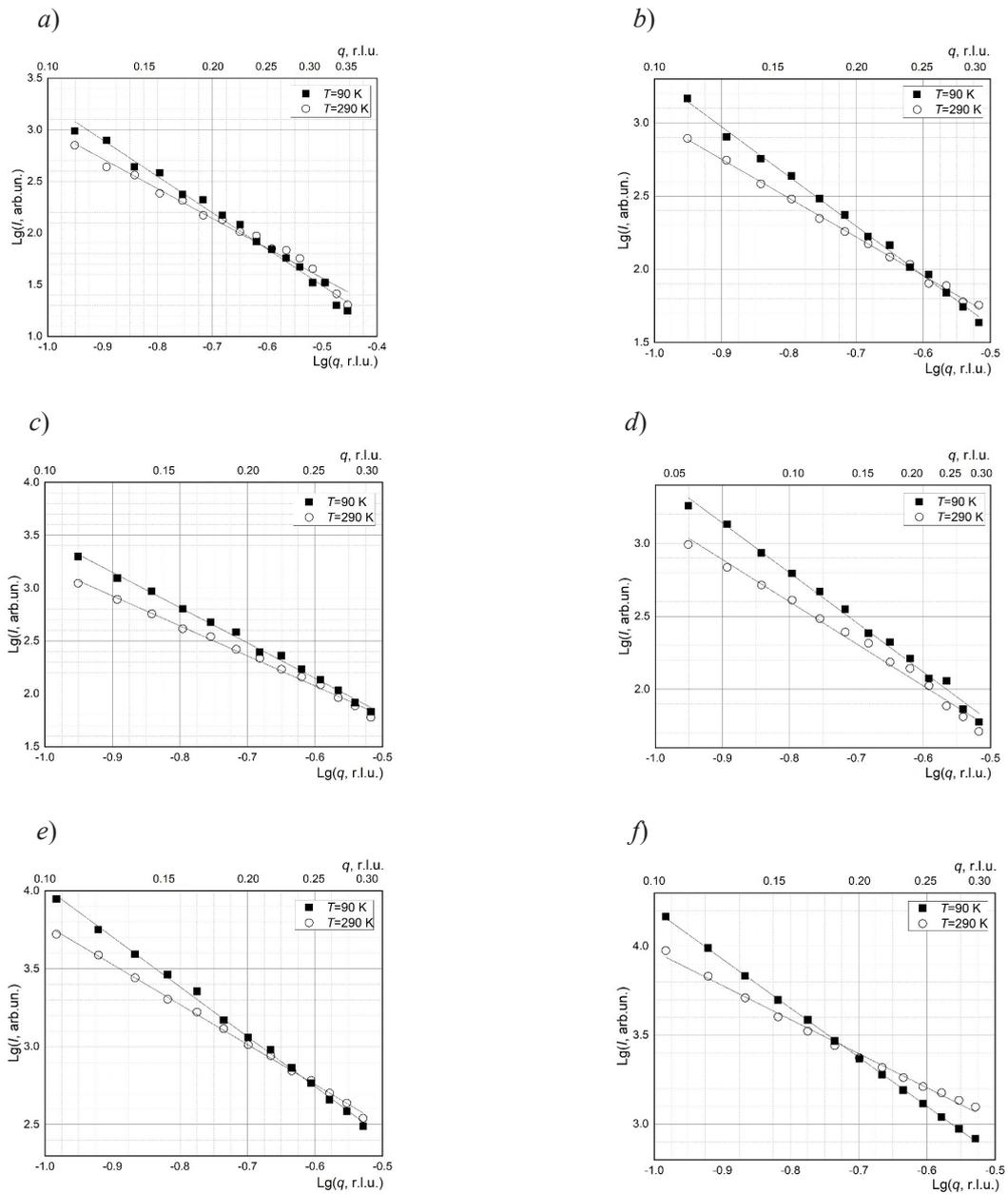


Рис. 4. Зависимости интенсивности DS от приведенного волнового вектора (в дважды логарифмическом масштабе) в SBN-60 при 90 и 290 К вблизи узла (332) в направлениях [010] (a) и [110] (b), узла (412) в направлениях [010] (c) и [110] (d), узла (002) в направлениях [010] (e) и [110] (f).

Значения  $q$  указаны в г.л.у. Линии на рисунках – результат подгонки

Функции  $G_2$  в прямом пространстве соответствует коррелятор вида

$$C_2 = \exp(-kr),$$

в котором нет «обрезающего» множителя, т. е. такая корреляционная функция присуща областям с размытыми границами.

Таким образом, из наблюдаемого роста интенсивности DS-1 и параметра наклона  $\alpha$  при охлаждении можно сделать вывод о том, что при понижении температуры (во всяком случае вплоть до 90 К) продолжается процесс локальной перестройки структуры в SBN-60, при этом происходит рост вклада областей с размытыми границами, как раз и приводя-



щий к увеличению  $\alpha$ . В свою очередь рост интенсивности DS-1 при охлаждении свидетельствует об увеличении «плотности» (общего числа) подобных областей.

Для объяснения отсутствия температурных зависимостей как интенсивности DS-2, так и параметров наклона  $\alpha$  в этом случае, можно воспользоваться подходами, используемыми при интерпретации данных по малоугловому рассеянию нейтронов и рентгеновского излучения. Известно, что в случае массового фрактала с размерностью  $D$  для параметра  $\alpha$  в законе рассеяния  $I(q) \sim q^{-\alpha}$  справедливо соотношение  $D = \alpha$ , где  $1 < \alpha < 3$  [19 – 21]. Так например, для одномерной цепочки массовых сфер  $\alpha = 1$ , а для агрегатов, построенных из сфер без перекрытия,  $1 \leq D \leq 3$ , где  $D$  – нецелое число. Параметр  $D$  соответствует распределению массы в пространстве. При таком подходе полученные экспериментальные значения параметра  $\alpha$  получают вполне логичное объяснение, если, например, в качестве объектов рассеяния рассматривать соответствующие агломераты из цепочек атомов в SBN-60.

### Заключение

В работе исследованы температурные зависимости интенсивности диффузного рассеяния синхротронного излучения  $I_{DS}(T, q)$  ( $q$  – приведенный волновой вектор) в монокристалле ниобата стронция-бария  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$ , вблизи узлов кристаллической решетки (332), (412) и (002), в трех принципиальных направлениях: [001], [010], [1 $\bar{1}$ 0].

Показано, что в дважды логарифмиче-

ском масштабе зависимости  $I_{DS}(T, q)$  хорошо описываются степенным законом  $q^{-\alpha}$ ; при этом получены температурные зависимости параметров  $\alpha$ .

Установлено, что диффузное рассеяние вблизи указанных узлов существенно анизотропно и состоит из двух компонент (DS-1 и DS-2) с принципиально различным поведением температурных зависимостей интенсивности и параметров  $\alpha$ .

Интенсивность компоненты DS-1 и соответствующий параметр  $\alpha$  увеличиваются с понижением температуры, что свидетельствует о продолжающейся при охлаждении эволюции локальной структуры в SBN-60, связанной с размытием границ областей локального упорядочения.

Что касается поведения компоненты DS-2, наблюдаемого в направлении [001], то ни интенсивность, ни параметр  $\alpha$  во всем исследованном интервале (90 – 290 К) не зависят от температуры, однако значение  $\alpha$  зависит от того, в окрестности какого узла обратной решетки проводились измерения. Вполне вероятно, что природа DS-2 связана с рассеянием на массовых фрактальных структурах.

В СПбПУ работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы 0784-2020-0025). За частичную финансовую поддержку исследований по данной тематике Д.Ю. Чернышев благодарит РФФИ (грант 19-29-12023).

Авторы подтверждают, что конфликт интересов отсутствует.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Viehland D., Xu Z., Huang W.-H. Structure – property relationships in strontium barium niobate. I. Needle-like nanopolar domains and the metastably-locked incommensurate structure // *Philos. Mag. A*. 1995. Vol. 71. No. 2. Pp. 205–217.
2. Черная Т.С., Максимов Б.А., Верин И.А., Ивлева Л.И., Симонов В.И. Уточнение кристаллической структуры монокристаллов  $\text{Ba}_{0.39}\text{Sr}_{0.61}\text{Nb}_2\text{O}_6$  // *Кристаллография*. 1997. Т. 42. № 3. С. 421–426.
3. Glass A.M. Investigation of the electrical properties of  $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Nb}_2\text{O}_6$  with special reference to pyroelectric detection // *J. Appl. Phys.* 1969. Vol. 40. No. 12. Pp. 4699–4713.
4. Ewbank M.D., Neurgaonkar R.R., Cory W.K., Feinberg J. Photorefractive properties of

strontium-barium niobate // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. No. 2. Pp. 374–380.

5. **Romero J.J., Aragó C., Gonzalo J.A., Jaque D., Solé J. García.** Spectral and thermal properties of quasiphase-matching second-harmonic-generation in  $\text{Nd}^{3+}$ :  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}(\text{NbO}_3)_2$  multiresonant-frequency-converter nonlinear crystals // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93. No. 5. Pp. 3111–3113.

6. **Simagina L.V., Mishina E.D., Semin S.V., Piyin N.A., Volk T.R., Gainutdinov R.V., Ivleva L.I.** Second harmonic generation in microdomain gratings fabricated in strontium-barium niobate crystals with an atomic force microscope // J. Appl. Phys. 2011. Vol. 110. No. 5. Pp. 052015–052020.

7. **Кузьминов Ю.С.** Сегнетоэлектрические кристаллы для управления лазерным излучением. М.: Наука, 1982. 400 с.

8. **Woike T., Petricek V., Dusek M., Hansen N.K., Fertey P., Lecomte C., Arakcheeva A., Chapuis G., Imlaue M., Pankrathe R.** The modulated structure of  $\text{Ba}_{0.39}\text{Sr}_{0.61}\text{Nb}_2\text{O}_6$ . I. Harmonic solution // Acta Crystallographica. Sec. B. 2003. Vol. 59. Part 1. February. 2003. Pp. 28–35.

9. **Schneck J., Toledano J.C., Whatmore F., Ainger F.W.** Incommensurate phases in ferroelectric tetragonal tungsten bronzes // Ferroelectrics. 1981. Vol. 36. No. 1. Pp. 327–330.

10. **Борисов С.А., Окунева Н.М., Вахрушев С.Б., Набережнов А.А., Волк Т.Р., Филимонов А.В.** Критическое рассеяние нейтронов в одноосном релаксоре  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$  // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. № 2. С. 295–301.

11. **Chillal S., Koulialias D., Gvasaliya S.N., Cowley R.A., Ivleva L.I., Lushnikov S.G., Zheludev A.** Phase transition of chemically doped uniaxial relaxor ferroelectric // J. Phys.: Condens. Matter. 2015. Vol. 27. No. 43. P. 435901 (8 p).

12. **Ondrejko P., Kempa M., Kulda J., Frick B., Appel M., Combet J., Dec J., Lukasiewicz T., Hlinka J.** Dynamics of nanoscale polarization fluctuations in a uniaxial relaxor // Phys. Rev. Lett. 2014. Vol. 113. No. 16. P. 167601.

13. **Ondrejko P., Kempa M., Savinov M., Bednyakov P., Kulda J., Bourges P., Dec J., Hlinka J.** Electric-field influence on the neutron diffuse scattering near the ferroelectric transition of  $\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$  // Phase Transit. 2016. Vol. 89. No. 7–8. Pp. 808–816.

14. **Vanina P.Yu, Vakhrushev S.B., Naberezhnov A.A., Bosak A.A.** Multiscale local ordering in the prototypical uniaxial relaxor  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$  single crystal at room temperature // J. Phys.: Condens. Matter. 2019. Vol. 31. No. 17. P. 175401.

15. **Brönnimann C., Eikenberry E.F., Henrich B., et al.,** The PILATUS 1M detector // J. Synchrotron. Radiat. 2006. Vol. 13. Part 2. March. Pp. 120–130.

16. Agilent, CrysAlis PRO. Agilent Technologies. Yarnton, Oxfordshire, England. 2011.

17. **Willis B.T.M., Pryor A.W.** Thermal vibrations in crystallography. Cambridge: Cambridge University Press, 1975. 296 p.

18. **Andrews S.R.** X-ray scattering study of the random electric dipole system  $\text{KTaO}_3$ : Li // J. Phys. C: Solid State Phys. 1985. Vol. 18. No. 7. Pp. 1357–1376.

19. **Жульен Р.** Фрактальные агрегаты // Успехи физических наук. 1989. Т. 157. № 2. С. 339–357.

20. **Авдеев М.В., Аксенов В.Л.** Малоугловое рассеяние нейтронов в структурных исследованиях магнитных жидкостей // Успехи физических наук. 2010. Т. 180. № 10. С. 339–357.

21. **Cousin F.** Small angle neutron scattering // EPJ Web of Conferences. 2015. Vol. 104. P. 01004 (1–49).

*Статья поступила в редакцию 05.09.2020, принята к публикации 10.09.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ВАНИНА Полина Юрьевна** — кандидат физико-математических наук, старший преподаватель Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
p.yu.vanina@gmail.com

**СИЛИН Никита Сергеевич** — студент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
silin.ns@edu.spbstu.ru

**БОСАК Алексей Алексеевич** — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Европейского центра синхротронного излучения (ESRF), г. Гренобль, Франция.

71, Avenue des Martyrs, Grenoble, 38000, France  
alexei.bossak@esrf.fr

**ЧЕРНЫШОВ Дмитрий Юрьевич** — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-образовательного центра «Физика нанокompозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
chernyshov65@gmail.com

**НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич** — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

## REFERENCES

1. Viehland D., Xu Z., Huang W.-H., Structure-property relationships in strontium barium niobate. I. Needle-like nanopolar domains and the metastably-locked incommensurate structure, *Philos. Mag. A.* 71 (2) (1995) 205–217.
2. Chernaya T.S., Maksimov B.A., Verin I.A., et al., Crystal structure of  $\text{Ba}_{0.39}\text{Sr}_{0.61}\text{Nb}_2\text{O}_6$  single crystals, *Crystallography Reports.* 42 (3) (1997) 375–380.
3. Glass A.M., Investigation of the electrical properties of  $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Nb}_2\text{O}_6$  with special reference to pyroelectric detection, *J. Appl. Phys.* 40 (12) (1969) 4699–4713.
4. Ewbank M.D., Neurgaonkar R.R., Cory W.K., Feinberg J., Photorefractive properties of strontium-barium niobate, *J. Appl. Phys.* 62 (2) (1987) 374–380.
5. Romero, J.J., Aragón C., Gonzalo J.A., et al., Spectral and thermal properties of quasi-phase-matching second-harmonic-generation in  $\text{Nd}^{3+}$ :  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}(\text{NbO}_3)_2$  multiseif-frequency-converter nonlinear crystals, *J. Appl. Phys.* 93 (5) (2003) 3111–3113.
6. Simagina L.V., Mishina E.D., Semin S.V., et al., Second harmonic generation in microdomain gratings fabricated in strontium-barium niobate crystals with an atomic force microscope, *J. Appl. Phys.* 110 (5) (2011) 052015–052020.
7. Kuz'minov Yu.S., Segnetoelektricheskie kristally dlya upravleniya lazernym izlucheniem [Ferroelectric crystals to control laser emission], Nauka, Moscow, 1982 (in Russian).
8. Woike T., Petricek V., Dusek M., et al., The modulated structure of  $\text{Ba}_{0.39}\text{Sr}_{0.61}\text{Nb}_2\text{O}_6$ . I. Harmonic solution, *Acta Crystallographica, Section B.* 59 (Part 1, February) (2003) 28–35.
9. Schneck J., Toledano J.C., Whatmore F., Ainger F.W., Incommensurate phases in ferroelectric tetragonal tungsten bronzes, *Ferroelectrics.* 36 (1) (1981) 327–330.
10. Borisov S.A., Okuneva N.M., Vakhrushev S.B., et al., Critical neutron scattering in a uniaxial relaxor  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$ , *Physics of the Solid State.* 55 (2) (2013) 334–341.
11. Chillal S., Koulialias D., Gvasaliya S.N., et al., Phase transition of chemically doped uniax-

ial relaxor ferroelectric, *J. Phys.: Condens. Matter.* 27 (43) (2015) 435901 (8p.).

12. **Ondrejko P., Kempa M., Kulda J., et al.**, Dynamics of nanoscale polarization fluctuations in a uniaxial relaxor, *Phys. Rev. Lett.* 113 (16) (2014) 167601.

13. **Ondrejko P., Kempa M., Savinov M., et al.**, Electric-field influence on the neutron diffuse scattering near the ferroelectric transition of  $\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$ , *Phase Transit.* 89 (7–8) (2016) 808–816.

14. **Vanina P.Yu., Vakhrushev S.B., Naberezhnov A.A., Bosak A.A.**, Multiscale local ordering in the prototypical uniaxial relaxor  $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$  single crystal at room temperature, *J. Phys.: Condens. Matter.* 31 (17) (2019) 175401.

15. **Brönnimann C., Eikenberry E.F., Henrich B., et al.**, The PILATUS 1M detector, *J. Synchro-*

*tron. Radiat.* 13 (Part 2, March) (2006) 120–130.

16. Agilent, CrysAlis PRO, Agilent Technologies, Yarnton, Oxfordshire, England, 2011.

17. **Willis B.T.M., Pryor A.W.**, Thermal vibrations in crystallography, Cambridge University Press, Cambridge, 1975.

18. **Andrews S.R.**, X-ray scattering study of the random electric dipole system  $\text{KTaO}_3$ : Li, *J. Phys. C. Solid State Phys.* 18 (7) (1985) 1357–1376.

19. **Jullien R.**, Fractal aggregates, *Comm. Cond. Mat. Phys. (Comm. Mod. Phys. Pt. B)*. 13 (4) (1987) 177–205.

20. **Avdeev M.V., Aksenov V.L.**, Small-angle neutron scattering in structure research of magnetic fluids, *Physics Uspekhi.* 53 (10) (2010) 971–993.

21. **Cousin F.**, Small angle neutron scattering, *EPJ Web of Conferences.* 104 (2015) 01004 (1–49).

*Received 05.09.2020, accepted 10.09.2020.*

## THE AUTHORS

### **VANINA Polina Yu.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
p.yu.vanina@gmail.com

### **SILIN Nikita S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
silin.ns@edu.spbstu.ru

### **BOSAK Alexey A.**

*European Synchrotron Radiation Facility*

71, Avenue des Martyrs, Grenoble, 38000, France  
alexei.bossak@esrf.fr

### **CHERNYSHOV Dmitry Yu.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
chernyshov65@gmail.com

### **NABEREZHNOV Alexander A.**

*Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences*

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
alex.naberezhnov@mail.ioffe.ru



DOI: 10.18721/JPM.13403

UDC 538.9

## RHEOLOGICAL PARAMETERS' EFFECT ON THE ELECTRET PROPERTIES OF POLYVINYLIDENE FLUORIDE

**Yu.A. Gorokhovatsky, D.E. Temnov, Yu.I. Sotova**

Herzen State Pedagogical University of Russia,  
St. Petersburg, Russian Federation

It is known that polymer films based on a copolymer of polyvinylidene fluoride and tetrafluoroethylene P(VDF-TFE) have piezoelectric properties, and these properties appear only after preliminary stretching of the films. The polar crystalline  $\beta$ -phase of the copolymer is responsible for the piezoelectric properties in the P(VDF-TFE), the percentage of this phase in the polymer can vary. In this work, we have studied the influence of the orientational stretching rate on the stability of the electret, and, as a consequence, the piezoelectric state. The influence of rheological parameters on the polymer structure and the parameters of electrically active defects responsible for polarization processes is shown.

**Keywords:** electret state, polyvinylidene fluoride, tetrafluoroethylene, piezoelectric effect, thermostimulated spectroscopy

**Citation:** Gorokhovatsky Yu.A., Temnov D.E., Sotova Yu.I., Rheological parameters' effect on the electret properties of polyvinylidene fluoride, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 39–46. DOI: 10.18721/JPM.13403

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## ВЛИЯНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ЭЛЕКТРЕТНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

**Ю.А. Гороховатский, Д.Э. Темнов, Ю.И. Сотова**

Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Известно, что полимерные пленки на основе сополимера поливинилиденфторида и тетрафторэтилена П(ВДФ-ТФЭ) обладают пьезоэлектрическими свойствами, причем эти свойства проявляются лишь после предварительной вытяжки пленок. За пьезоэлектрические свойства в П(ВДФ-ТФЭ) отвечает полярная кристаллическая  $\beta$ -фаза сополимера, процентное содержание которой в полимере может варьироваться. В данной работе исследовано воздействие скорости ориентационной вытяжки на стабильность электретного, и, как следствие, пьезоэлектрического состояния. Показано влияние реологических параметров на структуру данного полимера и параметры электрически активных дефектов, ответственных за процессы поляризации.

**Ключевые слова:** электретное состояние, поливинилиденфторид, тетрафторэтилен, пьезоэффект, термостимулированная спектроскопия

**Ссылка при цитировании:** Гороховатский Ю.А., Темнов Д.Э., Сотова Ю.И. Влияние реологических параметров на электретные свойства поливинилиденфторида // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 39–46. DOI: 10.18721/JPM.13403

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Introduction

The piezoelectric properties of polyvinylidene fluoride (PVDF) and copolymers based on it are used in various piezoelectric elements [1 – 3]. Piezoelectric properties of PVDF were observed for the first time in 1969 by H. Kawai [4]. Even then, it became clear to researchers that piezoelectric properties of PVDF films appear only after their preliminary stretching. Since there are certain difficulties in the production of dielectric films with piezoelectric properties from a PVDF homopolymer associated with a high coercive field of about  $10^8$  V/m (this is two orders of magnitude higher than that of piezoceramics) [5], there are usually used piezoelectric polymers with a lower coercive field based on vinylidene fluoride copolymers with trifluoroethylene (VDF-TrFE) and vinylidene fluoride with tetrafluoroethylene (VDF-TFE), which also have piezoelectric properties after stretching several times in comparison with the original length [6 – 9].

In this work, we have studied thermally stimulated depolarization currents in P(VDF-TFE) films manufactured at different rates of preliminary stretching and electreted in a negative corona discharge field.

It should be noted that prior to this, no proper attention was paid to the effect of the rate of preliminary stretching on charge relaxation in P(VDF-TFE) films.

## Samples and research methods

The subjects of inquiry were copolymers P(VDF-TFE) of the F2ME trademark with different rates of preliminary stretching. The pre-stretching rate (percentage increase in length per minute) was 5, 30, 50 and 200. The samples were examined by IR spectroscopy using the attenuated total reflection (ATR) on the FT-IR spectrometer FSM-1202 to determine the degree of crystallinity.

We also studied the thermally stimulated depolarization currents in P(VDF-TFE) films, in which the corona-electret state was created. The corona-electret state was created as follows: the samples were heated to a temperature of about  $70^\circ\text{C}$ , placed in positive or negative corona discharge (field of about 1 MV/cm) and held at an

elevated temperature for 10 min, then the samples were cooled down in the corona discharge field to room temperature. After that, the depolarization currents were measured in the films using a Setaram TSC II device; measurements were carried out in the linear heating mode at two heating rates:  $6^\circ\text{C}/\text{min}$  and  $9^\circ\text{C}/\text{min}$ .

## Experimental results and their discussion

**IR spectroscopy.** Fig. 1 shows the IR transmission spectra obtained using the ATR method for copolymer P(VDF-TFE) with pre-stretching rates (in % per min): of 5, 30, and 200. To determine the degree of crystallinity of PVDF, we studied the conformationally dependent band at  $840\text{ cm}^{-1}$  (crystalline phase,  $\alpha$  peak in Fig. 1) and the conformationally independent band at  $876\text{ cm}^{-1}$  (amorphous phase,  $\beta$  peak in Fig. 1). Since there are no bands corresponding to the  $\alpha$  phase for copolymers of VDF with TFE, the ratio of the intensities of these bands characterizes the degree of crystallinity of the polymer. By calculating the peak area ratio, it was obtained that the degree of crystallinity of the copolymer increased slightly from 49 % to 57 % as the stretching rate increased. Thus, it can be concluded that an increase in the stretching rate leads to a slight increase in the proportion of the crystalline  $\beta$  phase responsible for the piezoelectric properties of P(VDF-TFE). It should be noted that the quality of a piezoelectric element is determined not only by the magnitude of its piezoelectric modulus, but also by its stability.

**Thermally stimulated depolarization currents.** Fig. 2 shows a comparison of the curves of the depolarization currents P(VDF-TFE) with a preliminary stretching rate of 50 %/min electreted in the field of a positive and negative corona discharge (heating rate was  $6^\circ\text{C}/\text{min}$ ).

The curves show two closely located peaks, the magnitude and temperature position of which strongly depend on the polarity of the corona electrode. It should be noted that for other rates of preliminary stretching, the result was similar, i.e., the peak on the curve for negative polarity of the corona electrode was higher in magnitude and shifted along the temperature axis position compared with the peak for the positive polarity

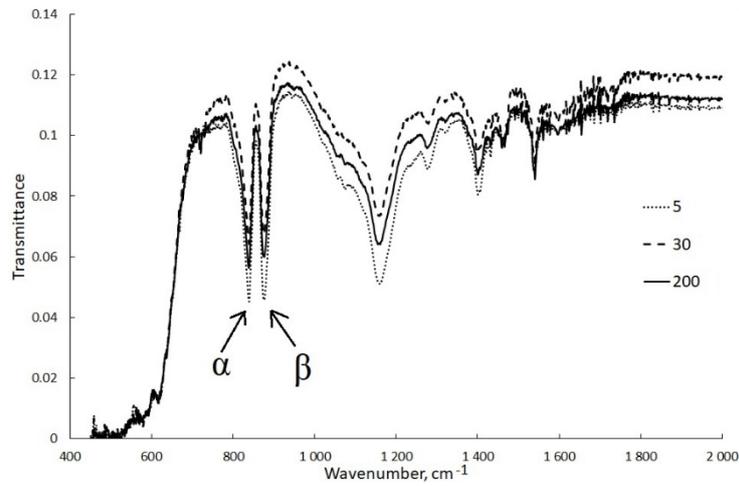


Fig. 1. ATR-IR spectra in copolymer P(VDF-TFE) for different rates of preliminary stretching (in % per min)

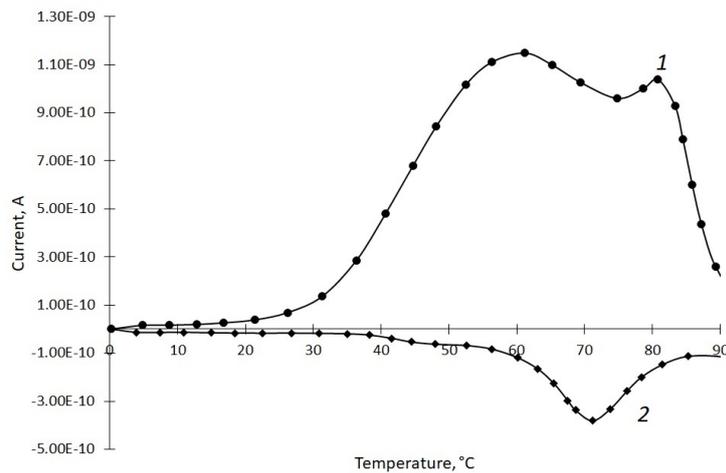


Fig. 2. Thermally stimulated depolarization currents in the P(VDF-TFE) with a preliminary stretching rate of 50 %/min, electreted in the field of the negative (1) and positive (2) corona discharges

of the corona electrode. This difference suggests that these peaks are associated with the relaxation of the homocharge, i.e., with the release of charge carriers from deep subsurface traps. Such traps can be caused, for example, by various defects in the structure of polymer films. Apparently, the number and depth of traps for positive and negative charge carriers are different: for negative charge carriers the traps are deeper and their number is greater. This result is consistent with literature data [10].

The dependence of the depolarization currents in the P(VDF-TFE) electreted in the field

of the negative corona discharge on the rate of preliminary stretching is shown in Fig. 3 (heating rate was 6°C/min). It can be seen that the high-temperature peak increases in magnitude and shifts to the region of higher temperatures with an increase in the stretching rate. Since we concluded earlier that this peak is associated with the release of charge carriers from traps, which, in turn, are caused by structural defects, it can be assumed that with a faster orientation of polymer films, the number of polymer chain defects increases, which means that the number of traps also increases.

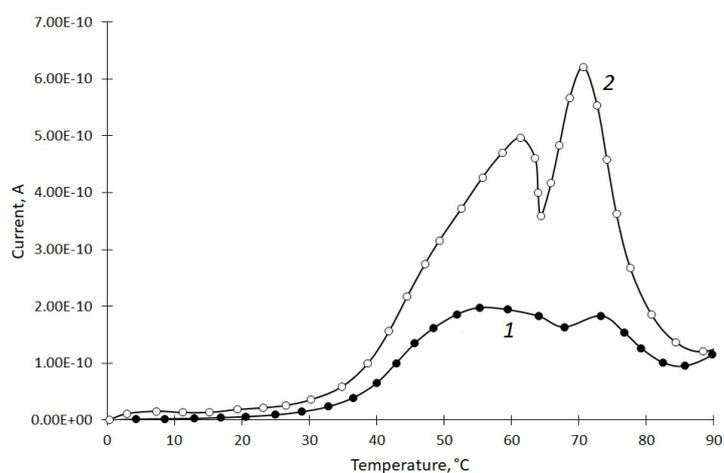


Fig. 3. Depolarization currents in the P(VDF-TFE) electreted in the field of the negative corona discharge at two values of a preliminary stretching rate (%/min): 30 (1) and 200 (2)

Using the method of varying the samples heating rate, the parameters of the traps (activation energy and frequency factor) for negative charge carriers were calculated. For this purpose, we measured the depolarization currents of the P(VDF-TFE) films with a preliminary stretching rate of 30 %/min, electreted in the field of the negative corona discharge, at two different heating rates (6 °C/min and 9 °C/min). The results are shown in Fig. 4, *a*. It is seen that with an increase in the heating rate, the peak increases in magnitude and shifts to the right along the temperature scale. This result is consistent with the theory of thermally stimulated depolarization currents. Calculations revealed that, in this case, the activation energy of traps for negative charge carriers is  $0.89 \pm 0.05$  eV, and the frequency factor is  $10^{12} \text{ s}^{-1}$  (with an accuracy of half a decade).

For the P(VDF-TFE) films with a preliminary stretching rate of 200%, electreted in the field of a negative corona discharge, the depolarization currents obtained for different heating rates are shown in Fig. 4, *b*. The chart also shows a shift in the peak towards higher temperatures with an increase in the heating rate from 6 °C/min to 9 °C/min. In this case, calculations give the following trap parameters: activation energy  $0.93 \pm 0.05$  eV, frequency factor  $10^{13} \text{ s}^{-1}$  (with an accuracy of half a decade). Thus, it can be

concluded that with an increase in the rate of preliminary stretching, the activation energy (depth) of traps for negative charge carriers slightly increases.

The curves in Fig. 3 also show a low-temperature peak (in the region of 50 – 60 °C), which is partially superimposed on the high-temperature peak (in the region of 75 °C). Since the growth of the low-temperature peak correlates with the growth of the high-temperature peak, we assume that the process in the region of 60 °C is associated with the reorientation of polar structures that are present in the amorphous phase. With an increase in the stretching rate, the value of the homocharge, as noted above, increases, which means that the field of this homocharge also increases, and therefore the reorientation of polar structures becomes more and more evident.

It should be noted that it is the presence of the component associated with the reorientation of polar structures present in the amorphous phase of P(VDF-TFE) that determines the stability of the electret state, and, accordingly, the stability of the piezoelectric state. The increase in the tensile rate leads to an increase in this component and, as might be expected, to an improvement in the stability of the electret and piezoelectric properties of the copolymer under study.

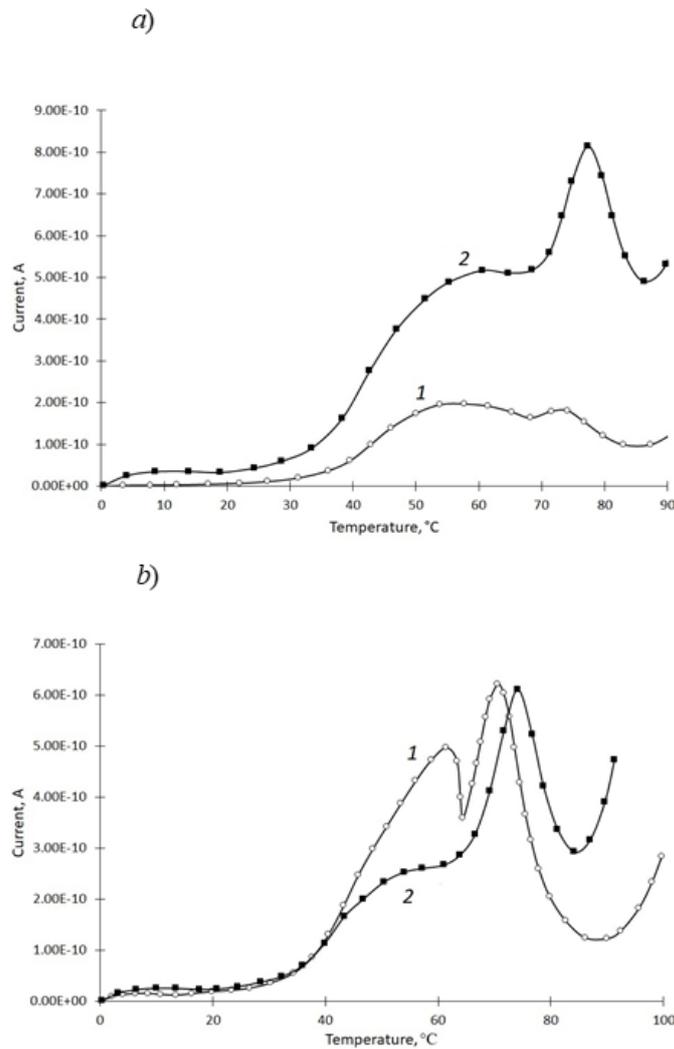


Fig. 4. Thermally stimulated depolarization currents in the P(VDF-TFE) with preliminary stretching rate of 30 %/min (a) and 200 %/min (b), electreted in the negative corona discharge field, for a heating rate of 6°C/min (1) and 9°C/min (2)

### Summary

IR spectroscopy data on the subjects of inquiry showed that with an increase in the stretching rate, the proportion of their ferroelectric  $\beta$ -phases increases. On the curves of thermally stimulated depolarization currents, two closely spaced peaks were found: a low-temperature one with a maximum in the region of 60°C and a high-temperature one with a maximum at 75°C. The high-temperature peak is associated with the release of charge carriers from deep near-surface traps, i.e., with relaxation of homocharge, the

value of which depends on the rate of preliminary stretching. The activation energy of the traps increases with an increase in the stretching rate from 0.89 eV to 0.93 eV. The low-temperature peak is due to the reorientation of polar structures that are present in the amorphous phase. As the stretching rate increases, i.e., with an increase in homocharge, the proportion of oriented polar structures also increases. The presence of a component associated with the reorientation of polar structures determines the stability of the electret and, consequently, the piezoelectric state.

The reported study was funded by RFBR, project number 19-32-90161 and the Ministry of Education of the Russian Federation as part of a state task (project No. FSZN-2020-0026).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 19-32-90161, а также Государственного задания Минобрнауки России (проект № FSZN-2020-0026).

## REFERENCES

1. **Chen X., Han X., Shen Q.D.**, PVDF-based ferroelectric polymers in modern flexible electronics, *Advanced Electronic Materials*. 5 (3) (2017) 1600460 (1–18).
2. **Dong W., Xiao L., Hu W., et al.**, Wearable human-machine interface based on PVDF piezoelectric sensor, *Transactions of the Institute of Measurement and Control*. 39 (4) (2017) 398–403.
3. **Zhukov V.B., Katunin A.A., Seleznev I.A.**, Hydroacoustic transducers based on perspective piezomaterials, In: *Proceedings of the 14<sup>th</sup> All-Russian Conference "Advanced Technologies of Hydroacoustics and Hydrophysics"*. (2018) 11–16.
4. **Kawai H.**, The piezoelectricity of poly (vinylidene fluoride), *Japanese Journal of Applied Physics*. 8 (6) (1969) 975–983.
5. **Lushcheykin G.A.**, New polymer-containing piezoelectric materials, *Physics of the Solid State*. 48 (6) (2006) 963–964.
6. **Tan S., Hu X., Ding S., et al.**, Significantly improving dielectric and energy storage properties via uniaxially stretching crosslinked P(VDF-co-TrFE) films, *Journal of Materials Chemistry A*. 1 (35) (2013) 10353–10361.
7. **Ma S., Ye T., Zhang T., et al.**, Highly oriented electrospun P(VDF-TrFE) fibers via mechanical stretching for wearable motion sensing, *Advanced Materials Technologies*. 3 (7) (2018) 1800033 (1–7).
8. **Kochervinskiy V.V., Bedin S.A., Razumovskaya I.V., et al.**, Molecular mobility and structuring in textured films of the ferroelectric copolymer of vinylidene fluoride with tetrafluoroethylene, *Polymer Science. Series A*. 3 (58) (2016) 255–267.
9. **Tasaka S., Miyata S.**, Effects of crystal structure on piezoelectric and ferroelectric properties of copoly(vinylidene fluoride-tetrafluoroethylene), *Journal of Applied Physics*. 57 (3) (1985) 906–910.
10. **Murayama N., Oikawa T., Katto T., Nakamura K.**, Persistent polarization in poly(vinylidene fluoride). II. Piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride) thermoelectrets, *Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition*. 13 (5) (1975) 1033–1047.

*Received 24.09.2020, accepted 13.10.2020.*

## THE AUTHORS

### **GOROKHOVATSKY Yuriy A.**

*Herzen State Pedagogical University of Russia*  
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation  
gorokh-yu@yandex.ru

### **TEMNOV Dmitry E.**

*Herzen State Pedagogical University of Russia*  
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation  
tde@herzen.spb.ru

### **SOTOVA Yulia I.**

*Herzen State Pedagogical University of Russia*  
48 Moyka Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation  
juliasotova1992@mail.ru



## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Chen X., Han X., Shen Q.D.** PVDF-based ferroelectric polymers in modern flexible electronics // *Advanced Electronic Materials*. 2017. Vol. 5. No. 3. P. 1600460 (1–18).
2. **Dong W., Xiao L., Hu W., Zhu C., Huang Y., Yin Z.** Wearable human-machine interface based on PVDF piezoelectric sensor // *Transactions of the Institute of Measurement and Control*. 2017. Vol. 39. No. 4. Pp. 398–403.
3. **Жуков В.Б., Катунин А.А., Селезнев И.А.** Гидроакустические преобразователи на основе перспективных пьезоматериалов // «Прикладные технологии гидроакустики и гидрофизики». Труды XIV Всероссийской конференции. СПб., 23–25 мая 2018 г. СПб.: Переплетный центр, 2018. С. 11–16.
4. **Kawai H.** The piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride) // *Japanese Journal of Applied Physics*. 1969. Vol. 8. No. 6. Pp. 975–983.
5. **Лушейкин Г.А.** Новые полимерсодержащие пьезоэлектрические материалы // *Физика твердого тела*. 2006. Т. 48. № 6. С. 963–964.
6. **Tan S., Hu X., Ding S., Zhang Z., Li H., Yang L.** Significantly improving dielectric and energy storage properties via uniaxially stretching crosslinked P(VDF-co-TrFE) films // *Journal of Materials Chemistry A*. 2013. Vol. 1. No. 35. Pp. 10353–10361.
7. **Ma S., Ye T., Zhang T., Wang Z., Li K., Chen M., Zhang J., Wang Z., Ramakrishna S., Wei L.** Highly oriented electrospun P(VDF-TrFE) fibers via mechanical stretching for wearable motion sensing // *Advanced Materials Technologies*. 2018. Vol. 3. No. 7. P. 1800033 (1–7).
8. **Кочервинский В.В., Бедин С.А., Разумовская И.В., Щербина М.А., Бузин М.И., Малышкина И.А., Праздничный А.М., Павлов А.С., Василевский О.И.** Молекулярная подвижность и структурообразование в текстурированных пленках сегнетоэлектрического сополимера винилиденфторида с тетрафторэтиленом // *Высокомолекулярные соединения. Сер. А*. 2016. № 3 (58). С. 255–267.
9. **Tasaka S., Miyata S.** Effects of crystal structure on piezoelectric and ferroelectric properties of copoly(vinylidene fluoride-tetrafluoroethylene) // *Journal of Applied Physics*. 1985. Vol. 57. No. 3. Pp. 906–910.
10. **Murayama N., Oikawa T., Katto T., Nakamura K.** Persistent polarization in poly(vinylidene fluoride). II. Piezoelectricity of poly(vinylidene fluoride) thermoelectrets // *Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition*. 1975. Vol. 13. No. 5. Pp. 1033–1047.

*Статья поступила в редакцию 24.09.2020, принята к публикации 13.10.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ГОРОХОВАТСКИЙ Юрий Андреевич** – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48  
gorokh-yu@yandex.ru

**ТЕМНОВ Дмитрий Эдуардович** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48  
tde@herzen.spb.ru

**СОТОВА Юлия Ильинична** – аспирантка кафедры общей и экспериментальной физики Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48  
juliasotova1992@mail.ru



# Математическое моделирование физических процессов

DOI: 10.18721/JPM.13404  
УДК 519.63:621.039

## НЕЯВНЫЙ ЭКОНОМИЧНЫЙ АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ СОСТОЯНИЯ МНОГОФАЗНОГО ПОТОКА С ОБЩИМ ДАВЛЕНИЕМ

**С.В. Булович**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Для модели многофазной среды с общим давлением в жидкостях, в баротропном приближении, предложена экономичная схема численного интегрирования системы дифференциальных уравнений. Алгоритм позволяет рассматривать произвольное количество жидкостей и допускает возможность вырождения по этому параметру (до одной жидкости) в процессе расчета. Уравнения состояния для жидкостей не имеют ограничения, связанного с конечной величиной сжимаемости среды, т. е. жидкость может быть несжимаемой. Используется неявный метод формирования решения. Экономичность обеспечивается тем, что алгоритм построения обратной матрицы базируется на схеме расщепления по физическим процессам и разрешимости уравнений в рамках скалярных прогонок. В качестве примера рассмотрен вариант течения для трех жидкостей.

**Ключевые слова:** многожидкостная модель, баротропное приближение, численное моделирование, корректность задачи Коши, неявный алгоритм

**Ссылка при цитировании:** Булович С.В. Неявный экономичный алгоритм численного интегрирования системы уравнений для описания состояния многофазного потока с общим давлением // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 47–60. DOI: 10.18721/JPM.13404

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## AN IMPLICIT ECONOMICAL ALGORITHM FOR NUMERICAL INTEGRATION OF THE EQUATION SYSTEM DESCRIBING A MULTIPHASE FLOW STATE WITH COMMON PRESSURE

**S.V. Bulovich**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation

An economical scheme for numerical integrating the system of differential equations has been proposed for the model of a multiphase medium with a common pressure (in the barotropic approximation) in liquids. The algorithm allows us to consider an arbitrary number of liquids and admits the possibility of degeneration of this parameter to one liquid in the calculation process. The equations of states for liquids have no restriction related to the finite compressibility of the medium, i.e. the liquid can be incompressible. An implicit method for generating a solution is used. The efficiency is ensured by the fact that the algorithm for constructing the inverse matrix is based on the splitting scheme for physical processes and the solvability of equations within scalar runs. As an example, the flow variant for three liquids is considered.

**Keywords:** multifluid model, barotropic approximation, implicit algorithm, numerical simulation, Cauchy problem

**Citation:** Bulovich S.V., An implicit economical algorithm for numerical integration of the equation system describing a multiphase flow state with common pressure, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 47–60. DOI: 10.18721/JPM.13404

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Понятие взаимопроникающих континуумов, введенное в рассмотрение Х.А. Рахматулиным [1] и относящееся к случаю, когда одна и та же область пространства характеризуется количеством объемной доли вещества, находящегося в различных агрегатных состояниях, следует отнести к наиболее успешному и плодотворному направлению математического моделирования явлений, происходящих в гетерогенных средах. Для идентификации рассматриваемых объектов привлекают понятие жидкостей. В рамках этих представлений сформулирован ряд математических моделей, обладающих определенной иерархией по полноте и адекватности отражения происходящих процессов [2]. Это позволяет даже для одного и того же агрегатного состояния вещества различать состав, уровень и направление скорости, значения температуры и давления.

Для определения термо- и газодинамических функций состояния многофазного потока, используют необходимое количество балансовых соотношений. Формально их число может быть сокращено, если одноименные функции в разных жидкостях находятся в равновесном состоянии. С такой точки зрения, наибольшей полнотой обладает модель Байера и Нунциато [3], полностью неравновесная по температурам, скоростям и давлениям в жидкостях. С учетом того, что время релаксации поля давления в жидкостях существенно меньше, чем время релаксации температуры и скорости, процесс выравнивания давлений можно исключить и рассматривать конечное равновесное состояние. Тогда следующей по полноте описания процессов будет модель, в которой реализовано допущение о равном значении давления в жидкостях. По принятой классификации, это так называемые модели с одним или

общим давлением.

В классе течений, где тепловые процессы не выступают определяющими, возможно дальнейшее упрощение математической модели, связанное с рассмотрением баротропных процессов. В этом случае многожидкостная модель будет состоять из уравнений неразрывности, уравнений количества движения, уравнений связи плотности со значением давления для каждой из жидкостей и алгебраического соотношения баланса объемной доли жидкостей. В квазиодномерной постановке система уравнений, записанная для канала переменного сечения, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k)}{\partial t} + \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k)}{\partial t} + \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k^2 + A\alpha_k p)}{\partial x} - \\ - p \frac{\partial(A\alpha_k)}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\sum_{k=1}^{k=K} \alpha_k = 1, \quad \rho_k = \rho_k(p),$$

где  $\alpha_k$  – объемная доля  $k$ -ой жидкости;  $\rho_k$ , кг/м<sup>3</sup>,  $u_k$ , м/с, – ее плотность и скорость;  $k = 1, 2, \dots, K$  ( $K$  – общее количество жидкостей);  $p$ , Па, – общее для всех жидкостей давление в сечении канала;  $A$ , м<sup>2</sup>, – площадь сечения канала;  $t$ , с, – время;  $x$ , м, – координата вдоль образующей канала.

Система дифференциальных уравнений (1) состоит из слагаемых в виде первых производных по пространству и времени. Источниковые слагаемые, описывающие массообменные процессы в жидкостях и процессы изменения импульса за счет взаимодействия

фаз на межфазной поверхности или взаимодействия жидкостей со стенкой канала, не представлены. Как правило, при конструировании этих слагаемых не используют дифференциальные соотношения и, следовательно, такие слагаемые не будут влиять на тип и свойства системы уравнений (1).

Для получения решения системы уравнений (1) нашли широкое применение численные методы интегрирования системы дифференциальных уравнений. При этом количество алгоритмов и различных разностных схем продолжает возрастать. Совершенствование идет как по полноте и точности описания рассматриваемых процессов, так и по эффективности проводимых вычислений. Это факторы, тесно связанные между собой.

Даже если руководствоваться только сутью решаемой задачи (стационарная или нестационарная постановка, наличие или отсутствие разрывов в виде ударных волн или контактных поверхностей, интенсивный массо- и теплообмен между фазами и т. п.), то невозможно сделать однозначный вывод в предпочтении способа аппроксимации дифференциальных уравнений: явные, полунявные или полностью неявные схемы; центрированные или со смещенным шаблоном начальных данных.

Рассмотрим несколько примеров.

Явные схемы, как правило, базируются на методах Лакса – Фредрикса, Лакса – Вендроффа или на их комбинации, например схема MASTA [4]. По-прежнему популярен метод коррекции потоков [5], обобщенный на многожидкостную модель.

Полунявные методы [6, 7], когда часть слагаемых уравнения аппроксимируется на верхнем временном слое, позволяют частично снять ограничение на значение шага интегрирования по времени.

Полностью неявные алгоритмы основаны на итерационном методе Ньютона – Рафсона, обеспечивающего полное согласование значений функций на верхнем временном слое [8, 9]. Заметим, что на базе именно полностью неявных схем реализованы промышленные коды OLGA и KATARE [10, 11].

Как правило, при выборе того или иного алгоритма и шаблона дискретизации руководствуются характеристическими свойствами решаемой системы дифференциальных уравнений. Существуют хорошо зарекомендовавшие себя методики решения нестационарных задач, которые применимы для систем, демонстрирующих, по общепринятой классификации, гиперболические или параболические свойства. Однако некоторые модели описания нестационарного состояния многофазной среды должны быть отнесены к эллиптическому типу. В первую очередь речь идет о многожидкостной модели с общим давлением. В рамках двухжидкостного подхода ( $K = 2$ ) установлено, что система уравнений (1) всегда негиперболическа, если скорости в жидкостях не равны между собой по величине, а задача Коши для нее некорректна. Другими словами, такую систему уравнений формально нельзя использовать для описания состояния гетерогенной среды [12]. Однако известно несколько приемов, разрешающих эту проблему тем или иным способом.

Следует заметить, что при вырождении (сокращении количества) сжимаемых жидкостей до одной, т. е. при переходе к одножидкостному приближению, для оставшихся уравнений системы восстанавливаются гиперболические свойства. Однако если оставшаяся жидкость несжимаема, то система уравнений сохраняет эллиптические свойства. Поэтому выбор в пользу того или иного алгоритма для решения системы уравнений с общим давлением делает задачу совершенно неочевидной.

В настоящее время для решения такого класса задач закрепилось два подхода, связанных с формированием у системы уравнений либо гиперболических, либо параболических свойств. И в том и другом случае результат достигается при помощи добавления к уравнениям баланса количества движения слагаемых, которые изменяют тип рассматриваемой системы уравнений. Очевидно, что каждый из приемов в той или иной мере возмущает исходную систему уравнений.

В настоящей работе далее рассмотрен подход, когда система уравнений приобретает параболические свойства.

Выбор в пользу параболизации системы уравнений сделан на основании ряда причин. Во-первых, этот способ регуляризации решения в равной степени применим для любого количества рассматриваемых жидкостей. Во-вторых, не накладываемся ограничение на уравнение связи плотности и давления. В-третьих, использование для регуляризации вычислительного процесса повторных производных по форме приближает исходную систему уравнений к системе уравнений Навье – Стокса, хотя и со значением коэффициента переноса, не вытекающим из физической постановки задачи. Следует отметить, что для варианта восстановления гиперболических свойств системы дифференциальных уравнений используют так называемое давление на границе интерфейса (зона контакта жидкостей). Выработаны рекомендации по величине этого давления для двухжидкостной модели. Доказательство эффективности этой методики в рамках модели с общим давлением для системы уравнений в трехжидкостной формулировке или с большим количеством жидкостей автору неизвестно.

Идея регуляризации задачи Коши путем использования повторных производных развивается на протяжении уже более 40 лет. В работе [13] продемонстрировано, что при помощи повторных производных выполняется подавление коротковолновых возмущений. В работе [14] для стратифицированных потоков демонстрируется возможность стабилизации и подавления длинноволновых возмущений. В работе [15] использование повторных производных в уравнениях баланса массы и импульса позволило добиться линейной стабильности для всех значений длины волны (волновых чисел). В работе [16] рассмотрены полностью несжимаемые течения. Различные модели схемной вязкости рассмотрены в работах [17, 18].

В работе [19] предложен алгоритм численного интегрирования системы уравнений (1) для описания многожидкостного течения в

рамках баротропного приближения, равновесного по давлению. Там же содержатся указания на недостатки метода. Если в расчетах опираться на явную аппроксимацию конечно-разностных величин, то метод условно устойчив и имеет ограничение на шаг интегрирования по времени. При этом основное ограничение связано с устойчивостью вычислений при аппроксимации слагаемых диффузионного типа. Обойти это ограничение позволяет использование явно- неявного или полностью неявного алгоритма. Использование явно- неявной аппроксимации и, в частности, диффузионных слагаемых по методу Алена – Чена [20] или Дюффорта – Франкела [21] позволяет сохранить эффективность вычисления явного алгоритма и устранить ограничения на шаг интегрирования по времени, связанного с моделированием процесса диффузии. Однако остаются ограничения из-за явной аппроксимации конвективных слагаемых. Эти ограничения могут быть сняты в рамках полностью неявного алгоритма. Попутно можно ожидать, что использование неявного алгоритма в большей мере отвечает эллиптическим свойствам исходной системы уравнений.

Для решения системы уравнений (1), в настоящей работе использовано два приема, аналогично подходу, использованному нами в работе [19].

Во-первых, за счет дополнения уравнений количества движения повторными производными, тип рассматриваемой системы уравнений заменен параболическим. Необходимый для этого коэффициент переноса (по аналогии с принятыми в вычислительной математике трактовками, его следует называть искусственной вязкостью) определяется параметрами решаемой задачи и шагом дискретизации по пространству.

Во-вторых, вместо алгебраического уравнения баланса объемной доли сформулировано эволюционное дифференциальное уравнение относительно давления.

В результате введенных модификаций система уравнений (1) приобретает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k)}{\partial t} + \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k)}{\partial t} + \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k^2)}{\partial x} + \\ + A\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( vA \frac{\partial(\alpha_k\rho_k u_k)}{\partial x} \right); \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{A}{\rho c^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{k=1}^K \left( \frac{1}{\rho_k} \frac{\partial(A\alpha_k\rho_k u_k)}{\partial x} \right) = 0;$$

$$\rho_k = \rho_k(p), \quad c_k^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho_k}, \quad \rho = \sum_{k=1}^K \alpha_k \rho_k;$$

$$\frac{1}{\rho c^2} = \sum_{k=1}^K \left( \frac{\alpha_k}{\rho_k c_k^2} \right), \quad v = \Delta x c,$$

где  $c_k$ ,  $c$ , м/с, – соответственно скорость звука в  $k$ -ой жидкости и таковая в гетерогенной среде, определенной по формуле Вуда;  $\rho$  – плотность смеси.

Выбор коэффициента искусственной вязкости основан на исследовании, проведенном в работе [17].

### Численный метод

Для численного интегрирования системы уравнений (2) воспользуемся конечно-объемным подходом. Для этого разобьем расчетную область на ячейки равной длины. Все функции определим относительно центра ячейки, значения потоков формируются на границах ячейки. Ведем в рассмотрение переменные

$$q_i = \alpha_i \rho_i \quad \text{и} \quad m_i = \alpha_i \rho_i u_i,$$

а также векторы

$$Q = \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 \\ \vdots \\ \alpha_K \rho_K \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \vdots \\ \alpha_K \rho_K u_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_K \\ m_1 \\ \vdots \\ m_K \end{bmatrix},$$

$$F = \begin{bmatrix} \alpha_1 \rho_1 u_1 \\ \vdots \\ \alpha_K \rho_K u_K \\ \alpha_1 \rho_1 u_1^2 \\ \vdots \\ \alpha_K \rho_K u_K^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_1 \\ \vdots \\ m_K \\ q_1 u_1 \\ \vdots \\ q_K u_K \end{bmatrix},$$

$$G = v \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \partial m_1 / \partial x \\ \vdots \\ \partial m_K / \partial x \end{bmatrix}, \quad H = \frac{\partial p}{\partial x} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_K \end{bmatrix}.$$

Здесь  $Q$  – вектор консервативных переменных;  $F$  – вектор потоков;  $G$  – вектор диффузионного переноса;  $H$  – результирующая сила в канале переменного сечения, связанная с давлением.

Двухслойная конечно-объемная неявная схема для системы уравнений (2), записанная для произвольной  $i$ -ой ячейки, будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{(AQ)_i^{n+1} - (AQ)_i^n}{\Delta t} + \frac{(AF)_{i+1/2}^{n+1} - (AF)_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x} - \\ - \frac{(AG)_{i+1/2}^{n+1} - (AG)_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x} + AH_i^{n+1} = 0; \end{aligned} \quad (3)$$

$$\left( \frac{A}{\rho c^2} \right)_i^n \frac{p_i^{n+1} - p_i^n}{\Delta t} + \sum_{k=1}^K \left( \frac{1}{(\rho_k)_i^n} \frac{(Am_k)_{i+1/2}^{n+1} - (Am_k)_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x} \right) = 0.$$

Сформулируем задачу относительно вектора приращений

$$\Delta Q_i = Q_i^{n+1} - Q_i^n$$

при переходе с известного временного слоя на следующий временной слой:

$$\begin{aligned} & \frac{A\Delta Q_i}{\Delta t} + \frac{(A\Delta F)_{i+1/2} - (A\Delta F)_{i-1/2}}{\Delta x} - \\ & - \frac{(A\Delta G)_{i+1/2} - (A\Delta G)_{i-1/2}}{\Delta x} + A\Delta H_i = \Delta Q_i^n; \\ & \left(\frac{A}{\rho c^2}\right)^n \frac{\Delta p_i}{\Delta t} + \\ & + \sum_{k=1}^K \left( \frac{1}{(\rho_k)_i^n} \frac{(A\Delta m_k)_{i+1/2} - (A\Delta m_k)_{i-1/2}}{\Delta x} \right) = \\ & = \Delta p_i^n, \end{aligned} \quad (4)$$

где правые части уравнений (4)  $\Delta Q_i^n$  и  $\Delta p_i^n$  определяются формулами

$$\begin{aligned} \Delta Q_i^n = & - \left[ \frac{(AF)_{i+1/2}^n - (AF)_{i-1/2}^n}{\Delta x} - \right. \\ & \left. - \frac{(AG)_{i+1/2}^n - (AG)_{i-1/2}^n}{\Delta x} + AH_i^n \right]; \\ \Delta p_i^n = & - \left[ \sum_{k=1}^K \left( \frac{1}{(\rho_k)_i^n} \frac{(Am_k)_{i+1/2}^n - (Am_k)_{i-1/2}^n}{\Delta x} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

В формулах (5) аппроксимация диффузионного переноса на грани ячейки производится стандартными двухточечными разностями. При формировании значения функций на грани ячейки в слагаемых конвективного переноса и слагаемых, связанных с давлением, используется представление о характеристических свойствах уравнений переноса. Для знакоопределенного направления скорости через грань, поток массы и значение давления на правой грани  $i$ -ой ячейки с индексом  $(i + 1/2)$  определяются выражениями

$$\begin{aligned} (u_k)_{i+1/2} & = 0,5 \left( (u_k)_i + (u_k)_{i+1} \right) \geq 0; \\ m_{i+1/2} & = m_i + 0,5 \Delta x l_i^m; \end{aligned}$$

$$M_k^2 \leq 1, \quad p_{i+1/2} = p_{i+1} - 0,5 \Delta x l_{i+1}^p;$$

$$M_k^2 > 1, \quad p_{i+1/2} = p_i + 0,5 \Delta x l_i^p;$$

$$(u_k)_{i+1/2} = 0,5 \left( (u_k)_i + (u_k)_{i+1} \right) < 0;$$

$$m_{i+1/2} = m_{i+1} - 0,5 \Delta x l_{i+1}^m;$$

$$M_k^2 \leq 1, \quad p_{i+1/2} = p_i + 0,5 \Delta x k_i^p;$$

$$M_k^2 > 1, \quad p_{i+1/2} = p_{i+1} - 0,5 \Delta x k_{i+1}^p,$$

где  $M_k^2 = u_k^2 / c_k^2$  – число Маха.

Используется кусочно-линейное представление о поведении функции в ячейке, буквой  $l$  обозначены наклоны функций в ячейках.

Для выбора наклона функции была использована процедура

$$\min \text{mod} \left( \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x}, \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \right)$$

– выбор минимального по модулю значения среди односторонних разностей «назад» и «вперед». На гладких решениях эти формулы обеспечивают второй порядок точности.

Процедура линеаризации вектора потока на грани производилась по упрощенным зависимостям, причем сохранялись только наиболее важные факторы влияния потока на изменение функции в ячейке:

$$\begin{aligned} (u_k)_{i+1/2} \geq 0 \quad & \Delta(\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p)_{i+1/2} \approx \\ & \approx (u_k^n)_{i+1/2} (\Delta m_k)_i + (\alpha_k^n)_{i+1/2} \Delta p_{i+1}; \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (u_k)_{i+1/2} < 0 \quad & \Delta(\alpha_k \rho_k u_k^2 + \alpha_k p)_{i+1/2} \approx \\ & \approx (u_k^n)_{i+1/2} (\Delta m_k)_{i+1} + (\alpha_k^n)_{i+1/2} \Delta p_i. \end{aligned}$$

Использование такого способа линеаризации позволяет сформировать систему уравнений относительно приращений функций на верхнем временном слое, опирающуюся на простейшие двухточечные соотношения между одноименными функциями. С учетом

разнонаправленного движения жидкостей это приводит к трехдиагональным матричным зависимостям.

Используя обозначения

$$\Lambda f_i = (f_i - f_{i-1}) / \Delta x$$

для двухточечного направленного разностного оператора «назад» и

$$\bar{\Lambda} f_i = (f_{i+1} - f_i) / \Delta x$$

для направленного разностного оператора «вперед», сопряженного к  $\Lambda$ , получаем, что система уравнений (4) для случая  $(u_k)_i^n \geq 0$  принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{(A\Delta q_k)_i}{\Delta t} + \Lambda(A\Delta m_k)_i &= (\Delta q_k)_i^n; \\ \frac{(A\Delta m_k)_i}{\Delta t} + \Lambda(Au_k^n \Delta m_k)_i - \\ - \Lambda(Av^n \bar{\Lambda} \Delta m_k)_i + \\ + A\alpha_k^n \bar{\Lambda} \Delta p_i &= (\Delta m_k)_i^n; \\ \left(\frac{A}{\rho c^2}\right)_i \frac{\Delta p_i}{\Delta t} + \\ + \sum \left(\frac{1}{\rho_k^n} \Lambda(A\Delta m_k)_i\right) &= \Delta p_i^n. \end{aligned} \quad (7)$$

Важно отметить, что в каждом уравнении количества движения, для аппроксимации градиента давления использован оператор, сопряженный оператору конвективного переноса. Если в данной точке оказывается, что  $(u_k)_i^n < 0$ , то в формулах (7) применяется циклическая замена  $\Lambda$  на  $\bar{\Lambda}$ .

Решение системы уравнений (7) строится путем расщепления уравнений количества движения на два шага по физическим процессам:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{A}{\Delta t} + \Lambda(Au_k^n \dots) - \right. \\ \left. - \Lambda(Av^n \bar{\Lambda}(\dots)) \right] \Delta m_k^* = (\Delta m_k)_i^n; \end{aligned}$$

$$\frac{A}{\Delta t} \Delta m_k + A\alpha_k \bar{\Lambda} \Delta p = \frac{A}{\Delta t} \Delta m_k^*,$$

где  $\Delta m_k^*$  – вспомогательное значение функции.

Первый шаг учитывает конвективный и диффузионный переносы в уравнениях количества движения, второй учитывает слагаемые, связанные с давлением.

Решение уравнений первого шага реализуется в рамках стандартных скалярных прогонок. Количество этих уравнений определяется количеством жидкостей  $K$  в многожидкостной модели.

Для решения системы уравнений второго шага привлекается эволюционное уравнение для давления. Если сделать подстановку значения  $\Delta m_k$  в эволюционное уравнение для давления, то для определения  $\Delta p$  получаем уравнение следующего вида:

$$\begin{aligned} \left(\frac{A}{\rho c^2}\right)_i \frac{\Delta p}{\Delta t} - \Delta t \sum \frac{1}{\rho_k^n} \Lambda(A\alpha_k \bar{\Lambda} \Delta p) = \\ = \Delta p_i^n - \sum \left(\frac{1}{\rho_k^n} \Lambda(A\Delta m_k^*)\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Заметим, что в зависимости от направления течения жидкости, после проведенных подстановок возникает сочетание последовательности операторов либо  $\Lambda(A\alpha_k \bar{\Lambda} \Delta p)$ , либо  $\bar{\Lambda}(A\alpha_k \Lambda \Delta p)$ , которые являются одним из возможных представлений повторной производной  $\frac{\partial}{\partial x} \left( A\alpha_k \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \right)$  со вторым порядком точности. На разностном уровне оба оператора эквивалентны между собой. Стандартное представление повторной производной приводит к формированию трехдиагональной матрицы коэффициентов перед неизвестными  $\Delta p$ . И тогда система линейных уравнений разрешается в рамках скалярной прогонки.

После определения приращения давления остальные приращения функций  $\Delta m_k$  и  $\Delta q_k$  для всех  $K$  жидкостей определяются по явным формулам

$$\Delta m_k = \Delta m_k^* - \Delta t \alpha_k \bar{\Lambda} \Delta p;$$

$$\Delta q_k = \frac{\Delta t}{A} (\Delta q_k^n - \Lambda (A \Delta m_k)).$$

Формулировка граничных условий зависит от решаемой задачи. Относительно просто граничные условия можно реализовать для непроницаемой границы. Если воспользоваться заграничной ячейкой, то условие нулевого расхода через контрольную поверхность обеспечивается через назначение функций в этой ячейке по следующему правилу: нужно потребовать условия четности для всех функций, кроме значения скорости, которая берется с противоположным знаком. Аналогичными условиями связаны и приращения функций. Проницаемые границы порождают большое разнообразие возможных вариантов; их рассмотрение выходит за рамки настоящего исследования.

### Примеры расчета

Для иллюстрации работы предложенного алгоритма были рассмотрены две постановки задачи о распаде произвольного разрыва. Первый вариант рассматривает поведение функций в трехжидкостном приближении при асимптотическом вырождении второй и третьей жидкостей. Второй вариант охватывает более общий случай.

Можно ожидать, что при малых значениях объемных долей второй, третьей и так далее жидкостей, решение задачи в многожидкостной постановке будет близко к решению задачи в одножидкостной постановке.

Для одной сжимаемой жидкости существует аналитическое решение задачи о распаде произвольного разрыва, которое представлено двухволновой конфигурацией в виде сочетания волн двух типов: волны разрежения и ударной волны. В баротропной постановке отличительная особенность решения этой задачи проявляется в двух моментах. Во-первых, интенсивность ударной волны описывается адиабатой Пуассона. Во-вторых, получаемое решение всегда имеет «сшитую» контактную поверхность,

т. е. для ее идентификации необходим маркер, так как все газодинамические функции на контактной поверхности совпадают. Заметим, что характеристики волны разрежения или волны сжатия передаются моделью баротропного приближения без искажения. Также удовлетворительно описывается ударная волна слабой интенсивности.

**Постановка задачи о распаде разрыва в баротропном приближении.** Если состояние таких газодинамических функций, как давление, плотность и скорость, слева от начального разрыва обозначить переменными  $p_L$ ,  $\rho_L$ ,  $u_L$ , а состояние справа от разрыва —  $p_R$ ,  $\rho_R$  и  $u_R$  соответственно, то значение функций на контактной поверхности  $P$ ,  $R = R(P)$  и  $U$  будет определяться из решения системы уравнений

$$U - u_L + \frac{P - p_L}{a_L} = 0;$$

$$U - u_R - \frac{P - p_R}{a_R} = 0.$$

где  $a_L$ ,  $a_R$  — значения потока массы через газодинамическую особенность в виде волны слева или справа от начального разрыва, соответственно.

Выбор между волной разрежения или ударной волной делается при сравнении текущего значения давления на контактной поверхности  $P$  со значениями давлений  $p_L$  и  $p_R$ . Если слева или справа идентифицируется ударная волна, то поток массы определяется формулой

$$a_{L,R} = \sqrt{\frac{P - p_{L,R}}{\frac{1}{\rho_{L,R}} - \frac{1}{R}}}.$$

Для левой или правой волны разрежения массовый поток определяется выражением

$$a_{L,R} = \frac{\gamma - 1}{2\gamma} \rho_{L,R} c_{L,R} \frac{1 - \frac{P}{p_{L,R}}}{1 - \left(\frac{P}{p_{L,R}}\right)^{\frac{\gamma - 1}{2\gamma}}},$$

где  $\gamma$  – показатель адиабаты для уравнения состояния в виде степенного закона зависимости давления от плотности:

$$\frac{p}{p_0} = \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma,$$

при этом  $p_0, \rho_0$  – значения функций, определяющих уровень отсчета.

Как можно заметить, значения  $a_L$  и  $a_R$  зависят от решения задачи и для своего определения требуют итерационной процедуры.

Используемые количественные значения констант термодинамических функций и их уравнения состояния для жидкостей сведены в таблице.

Приведенный набор зависимости плотности от давления позволяет продемонстрировать возможность алгоритма выполнять вычисления в широком диапазоне значений сжимаемости рассматриваемых веществ.

Рассмотрим замкнутую с двух концов цилиндрическую трубу постоянного сечения длиной 1 м. В начальный момент времени объемное содержание жидкостей составляет

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0,9999998 + 1,0 \cdot 10^{-6} + 1,0 \cdot 10^{-6},$$

значение давления сохраняется постоян-

ным и равно 7,0 МПа, а значение скорости – 100 м/с.

Такая постановка задачи примечательна тем, что указанная двухволновая конфигурация будет реализована в сочетании с граничными условиями задачи – условием непротекания через торцевые поверхности. На левом конце трубы возникает одна волна разрежения, распространяющаяся вправо. На правом конце трубы – одна ударная волна, которая движется влево. Интенсивность волн (изменение давления) определяется уровнем скорости движущегося газа.

В данной работе расчеты были проведены на последовательности сеток, содержащих 1 тыс. (длинный штрих), 2 тыс. (короткий штрих), 4 тыс. (сплошная линия) интервалов дискретизации области. На рис. 1 представлены зависимости давления и скорости жидкости № 1 (см. таблицу) от продольной координаты в начальный момент ( $t = 0$ ) и для двух последующих значений времени:  $t = 0,2$  мс (линия 1) и  $0,4$  мс (линия 2). Полученные численные значения функций соответствуют аналитическому решению задачи. Путем непосредственной проверки можно убедиться, что в обоих случаях до момента взаимодействия волн газ неподвижен в окрестности торцов трубы за каждой из волн.

Таблица  
Уравнения состояния, содержащие термодинамические функции со значениями констант, для трех типов жидкостей

№	Жидкость	Уравнение состояния
1	Пар	$\rho = \left( \frac{p}{1,0e5} \right)^{0,714}$
2	Несжимаемая	$\rho = 1,0e3$
3	Слабосжимаемая	$\rho = 1,0e3 \left( \frac{p}{1,0e6} \right)^{0,13}$

Обозначения:  $\rho$ , кг/м<sup>3</sup>, – плотность;  $p$ , Па, – давление

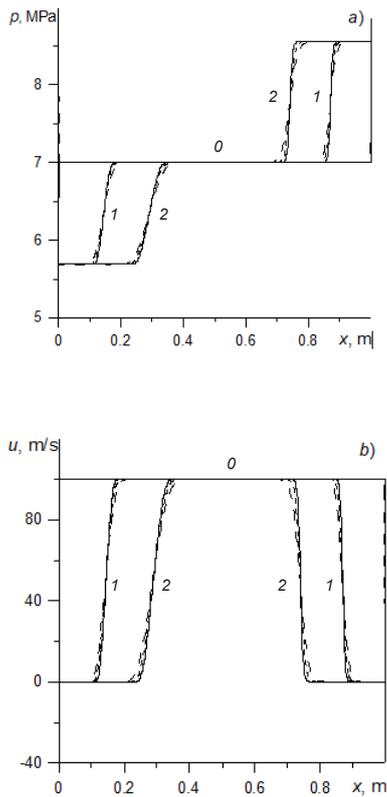


Рис. 1. Расчетные зависимости давления (а) и скорости (б) жидкости № 1 (пара) по продольной координате, для моментов времени  $t = 0, 0, 0, 2$  и  $0, 4$  мс (кривые 0, 1 и 2 соответственно). Данные получены на последовательности сеток, содержащих 1 тыс. (длинноштриховые линии), 2 тыс. (короткоштриховые) и 4 тыс. (сплошные линии) интервалов дискретизации области

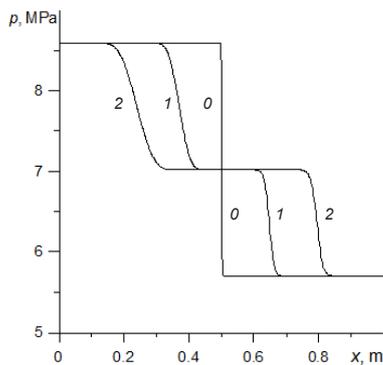


Рис. 2. Расчетные зависимости давления по продольной координате для моментов времени  $t = 0, 0, 0, 2$  и  $0, 4$  мс (кривые 0, 1 и 2 соответственно)

Далее, был проведен расчет течения в ударной трубе в трехжидкостном приближении, на сетке, содержащей 1 тыс. интервалов. Давление слева от диафрагмы было принято равным 8,6 МПа, справа – 5,7 МПа. Содержание объемных долей жидкостей равнялось

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0,8000 + 0,1999 + 1,0 \cdot 10^{-4}.$$

Получены аналогичные зависимости поведения газодинамических функций от продольной координаты в начальный момент и в моменты времени  $t = 0, 2$  и  $0, 4$  мс (кривые 1 и 2 соответственно).

На рис. 2 представлено распределение давления, а на рис. 3 – 5 – распределения скоростей, плотностей и содержания объемных долей. Без слагаемых, учитывающих обменные процессы по импульсу и массе между жидкостями или различные взаимодействия жидкостей со стенкой канала, рассмотренная система уравнений (1) является исключительно модельной и служит только для иллюстрации работоспособности алгоритма. Между тем, одно из явлений она позволяет наглядно проиллюстрировать. Речь идет о задаче распада разрыва на скачке площади сечения канала. В одножидкостном приближении отношение площадей есть параметр задачи, который делает задачу неавтономной, но допускающей параметрическое исследование. Как правило, на скачке площади сечения канала наблюдается формирование еще одного разрыва. Если вернуться к задаче о распаде разрыва в канале постоянного сечения, но для случая многожидкостного течения, то текущие значения объемных долей в сечении можно трактовать как элементы площади. В ситуациях, когда условие динамической совместности решаемых уравнений приводит к развитию скачкообразного изменения объемной доли, можно наблюдать формирование соответствующих разрывов в поведении давления и скоростей течения жидкостей (см. рис. 2 и 3).

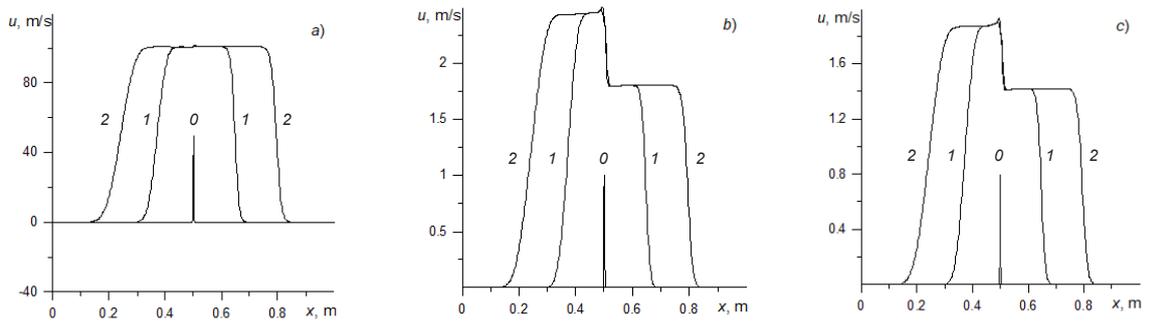


Рис. 3. Распределения скоростей жидкостей № 1 (a), № 2 (b), № 3 (c) (см. таблицу) по продольной координате, для моментов времени  $t = 0, 0, 2$  и  $0, 4$  мс (кривые 0, 1 и 2 соответственно)

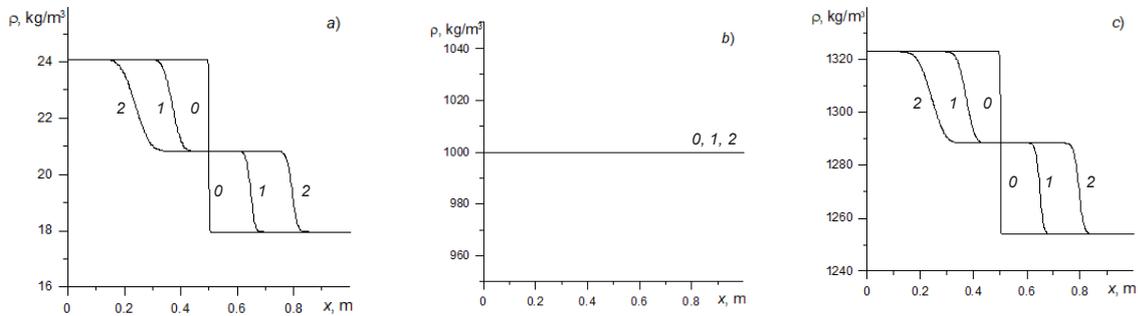


Рис. 4. Распределения плотностей жидкостей № 1 (a), № 2 (b), № 3 (c) (см. таблицу) по продольной координате для моментов времени  $t = 0, 0, 2$  и  $0, 4$  мс (кривые 0, 1 и 2 соответственно)

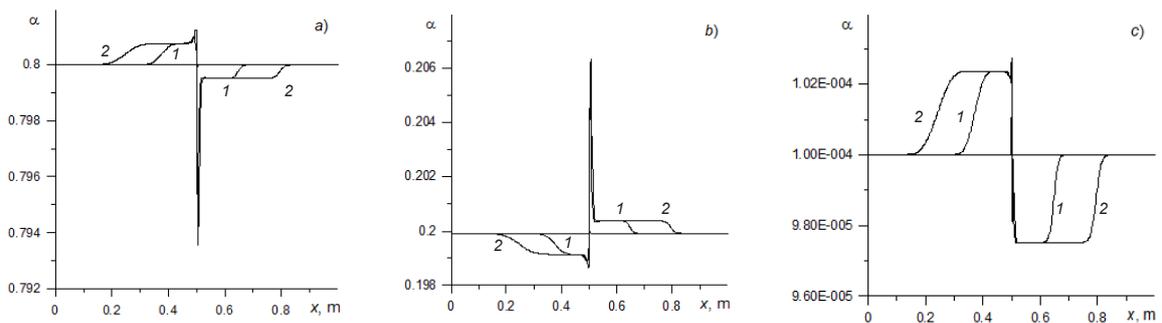


Рис. 5. Распределения объемных долей жидкостей № 1 (a), № 2 (b), № 3 (c) (см. таблицу) по продольной координате для моментов времени  $t = 0, 2$  и  $0, 4$  мс (кривые 1 и 2 соответственно)

### Заключение

В данной работе для модели многофазной среды с общим давлением в жидкостях предложена экономичная схема численного интегрирования системы дифференциальных уравнений. Отметим узловые моменты предложенного алгоритма.

Во-первых, отсутствуют ограничения на количество рассматриваемых жидкостей.

Во-вторых, прием регуляризации задачи Коши при помощи повторных производных позволяет не исказить скорости распространения акустических возмущений.

В-третьих, предложенный алгоритм, по

сравнению с остальными неявными методами, обладает определенными преимуществами. Среди них важно отметить следующие:

алгоритм не требует итераций и не требует привлечения матричной прогонки с размерностью блока, равной  $2K + 1$  по количеству неизвестных в задаче;

вычисления по предлагаемому алгоритму требуют выполнения  $K + 1$  скалярных прогонок и  $2K$  вычислений по явным формулам. Это позволяет, по сравнению с неявным алгоритмом в безытерационном режиме вычислений, уменьшить количество операций на точку дискретизации в  $(2K + 1)^2$  раз.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Рахматулин Х.А.** Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред // Прикладная математика и механика. 1956. Т. 20. № 2. С. 184–195.
2. **Linga G., Flåtten T.** A hierarchy of non-equilibrium two-phase flow models // ESAIM: Proceedings and Surveys. 2019. Vol. 66. No. 9. Pp. 109–143.
3. **Baer M., Nunziato J.** A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials // International Journal of Multiphase Flow. 1986. Vol. 12. No. 6. Pp. 861–889.
4. **Munkejord S.T.** A numerical study of two-fluid models with pressure and velocity relaxation // Advances in Applied Mathematics and Mechanics. 2010. Vol. 2. No. 2. Pp. 131–159.
5. **Figueiredo A.B., Baptista R.M., Rachid F.B.F., Bodstein G.C.R.** Numerical simulation of stratified-pattern two-phase flow in gas pipelines using a two-fluid model // International Journal of Multiphase Flow. 2017. Vol. 88. January. Pp. 30–49.
6. **Evje S., Flatten T.** On the wave structure of two-phase flow models // SIAM Journal on Applied Mathematics. 2007. Vol. 67. No. 2. Pp. 487–511.
7. **Yoon H.Y., Park I.K., Kim Y.I., Hwang Y.D., Jeong J.J.** A fast-running semi-implicit numerical scheme for transient two-phase flows on unstructured grids // Numerical Heat Transfer. Part B. Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology. 2010. Vol. 56. No. 6. Pp. 432–454.
8. **Frepoli C., Mahaffy J.H., Ohkawa K.** Notes on the implementation of a fully-implicit numerical scheme for a two-phase three-field flow model // Nuclear Engineering and Design. 2003. Vol. 225. No. 12. Pp. 191–217.
9. **Nascimento J.C.S., Santos A., Pires A.P.** A fully-implicit solution for the single-pressure two-fluid model with sharp discontinuities // Computers and Fluids. 2018. Vol. 175. 15 October. Pp. 214–229.
10. **Barre F., Bernard M.** The CATHARE code strategy and assessment // Nuclear Engineering and Design. 1990. Vol. 124. No. 3. Pp. 257–284.
11. **Bendiksen K.H., Maines D., Moe R., Nuland S.** The dynamic two-fluid model OLGA: theory and application // SPE Production Engineering. 1991. Vol. 6. No. 2. Pp. 171–180.
12. **Клебанов Л.А., Крошили А.Е., Нигматулин Б.И., Нигматулин Р.И.** О гиперболичности, устойчивости и корректности задачи Коши для системы дифференциальных уравнений двухскоростного движения двухфазных сред // Прикладная математика и механика. 1982. Т. 46. № 1. С. 83–95.
13. **Arai M.** Characteristics and stability analyses for two-phase flow equation systems with viscous terms // Nuclear Science and Engineering. 1980. Vol. 74. No. 2. Pp. 77–83.
14. **Holmas H., Sira T., Nordsveen M., Langtangen H.P., Schulkes R.** Analysis of a 1D incompressible two-fluid model including artificial diffusion // IMA Journal of Applied Mathematics. 2007. Vol. 73. No. 4. Pp. 651–667.
15. **Vreman A.W.** Stabilization of the Eulerian model for incompressible multiphase flow by artificial diffusion // Journal of Computational Physics. 2011. Vol. 230. No. 4. Pp. 1639–1651.
16. **Fullmer W.D., Lee S.Y., Bertodano M.A.L.D.** An artificial viscosity for the ill-posed one-dimensional incompressible two-fluid model // Nuclear Technology. 2014. Vol. 185. No. 3. Pp. 296–308.
17. **Bulovich S.V., Smirnov E.M.** Experience in using a numerical scheme with artificial viscosi-



ty at solving the Riemann problem for a multifluid model of multiphase flow // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 1959, No. 1 P. 050007.

18. **Smirnov S.I., Bulovich S.V., Smirnov E.M.** Calculation of unsteady two-phase quasi-one-dimensional channel flow based on the two-fluid model and the artificial viscosity numerical scheme // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1135. Proceedings of International Conference PhysicA.SPb/2018. Saint-Petersburg, October, 23–25, 2018. Report 012103 (6 p.).

19. **Булович С.В.** Схема численного интегрирования системы уравнений много-

фазных потоков в равновесном баротропном приближении // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 3. С. 17–25.

20. **Allen J.S., Sheng S.I.** Numerical solution of the compressible Navier – Stokes equation for the laminar near wake // Physics of Fluids. 1970. Vol. 13. No. 1. Pp. 37–52.

21. **DuFort E.C., Frankel S.P.** Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations // Mathematical Tables and Other Aids to Computation. 1953. Vol. 7. No. 43. Pp. 135–152.

*Статья поступила в редакцию 15.07.2020, принята к публикации 03.09.2020.*

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**БУЛОВИЧ Сергей Валерьевич** – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

### REFERENCES

1. **Rakhmatulin Kh.A.**, Osnovy gazodinamiki vzaimopronikayushchikh dvizheniy szhimayemykh sred [Gas-dynamics fundamentals of interpenetrating motions of compressible media], Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 20 (2) (1956) 184–195 (in Russian).

2. **Linga G., Flåtten T.**, A hierarchy of non-equilibrium two-phase flow models, ESAIM: Proceedings and Surveys. 66 (9) (2019) 109–143.

3. **Baer M., Nunziato J.**, A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials, International Journal of Multiphase Flow. 12 (6) (1986) 861–889.

4. **Munkejord S.T.**, A numerical study of two-fluid models with pressure and velocity relaxation, Advances in Applied Mathematics and Mechanics. 2 (2) (2010) 131–159.

5. **Figueiredo A.B., Baptista R.M., Rachid F.B.F., Bodstein G.C.R.**, Numerical simulation of stratified-pattern two-phase flow in gas pipelines using a two-fluid model, International Journal of Multiphase Flow. 88 (January) (2017) 30–49.

6. **Evje S., Flåtten T.**, On the wave structure of two-phase flow models, SIAM Journal on Applied Mathematics. 67 (2) (2007) 487–511.

7. **Yoon H.Y., Park I.K., Kim Y.I., et al.**, A fast-running semi-implicit numerical scheme for transient two-phase flows on unstructured grids, Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals: An International Journal of Computation and Methodology. 56 (6) (2010) 432–454.

8. **Frepoli C., Mahaffy J.H., Ohkawa K.**, Notes on the implementation of a fully-implicit numerical scheme for a two-phase three-field flow model, Nuclear Engineering and Design. 225 (12) (2003) 191–217.

9. **Nascimento J.C.S., Santos A., Pires A.P.**, A fully-implicit solution for the single-pressure two-fluid model with sharp discontinuities, Computers and Fluids. 175 (15 October) (2018) 214–229.

10. **Barre F., Bernard M.**, The CATHARE code strategy and assessment, Nuclear Engineering and Design. 124 (3) (1990) 257–284.

11. **Bendiksen K.H., Maines D., Moe R., Nuland S.**, The dynamic two-fluid model OLGA: theory and application, *SPE Production Engineering*. 6 (2) (1991) 171–180.
12. **Klebanov L.A., Kroshilin A.E., Nigmatulin B.I., Nigmatulin R.I.**, O giperbolichnosti, us-toychivosti i korrektnosti zadachi Koshi dlya sistemy differentsialnykh uravneniy dvukhskorostnogo dvizheniya dvukhfaznykh sred [On hyperbolicity, stability and correctness of the Cauchy problem for a differential equations system of the two-speed motion of two-phase media], *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 46 (1) (1982) 83–95 (in Russian).
13. **Arai M.**, Characteristics and stability analyses for two-phase flow equation systems with viscous terms, *Nuclear Science and Engineering*. 74 (2) (1980) 77–83.
14. **Holmas H., Sira T., Nordsveen M., et al.**, Analysis of a 1D incompressible two-fluid model including artificial diffusion, *IMA Journal of Applied Mathematics*. 73 (4) (2007) 651–667.
15. **Vreman A.W.**, Stabilization of the Eulerian model for incompressible multiphase flow by artificial diffusion, *Journal of Computational Physics*. 230 (4) (2011) 1639–1651.
16. **Fullmer W.D., Lee S.Y., Bertodano M.A.L.D.**, An artificial viscosity for the ill-posed one-dimensional incompressible two-fluid model, *Nuclear Technology*. 185 (3) (2014) 296–308.
17. **Bulovich S.V., Smirnov E.M.**, Experience in using a numerical scheme with artificial viscosity at solving the Riemann problem for a multifluid model of multiphase flow, *AIP Conference Proceedings*. 1959 (1) (2018) 050007.
18. **Smirnov S.I., Bulovich S.V., Smirnov E.M.**, Calculation of unsteady two-phase quasi-one-dimensional channel flow based on the two-fluid model and the artificial viscosity numerical scheme, *Journal of Physics: Conference Series*, 2018. Vol. 1135 (Proceedings of International Conference PhysicA.SPb/2018. Saint-Petersburg, October, 23–25) (2018) 012103.
19. **Bulovich S.V.**, The system of multiphase flow equations in the equilibrium barotropic approximation: a numerical scheme, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 12 (3) (2019) 17–25.
20. **Allen J.S., Sheng S.I.**, Numerical solution of the compressible Navier–Stokes equation for the laminar near wake, *Physics of Fluids*. 13 (1) (1970) 37–52.
21. **DuFort E.C., Frankel S.P.**, Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations, *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*. 7 (43) (1953) 135–152.

*Received 15.07.2020, accepted 03.09.2020.*

#### THE AUTHOR

**BULOVICH Sergei V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

bulovic@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.13405  
 УДК 53.072; 53:004

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТИГЕЛЬНЫХ ЛОВУШКАХ РАСПЛАВА КОРИУМА ПРИ АВАРИЯХ РЕАКТОРОВ НА АЭС

**А.Н. Коваленко<sup>1,3</sup>, А.О. Коптюхов<sup>2</sup>,  
 Д.К. Мещеряков<sup>3</sup>, А.П. Щуклинов<sup>3,4</sup>**

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
 Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> НИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ,  
 г. Гатчина Ленинградской области, Российская Федерация;

<sup>3</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
 Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>4</sup> АО «Атомпроект»,  
 Санкт-Петербург, Российская Федерация

Представлена двухстадийная модель изменения теплового и фазового состояний расплава активной зоны в охлаждаемой подреакторной ловушке тигельного типа при взаимодействии с жертвенным материалом и при кристаллизации разбавленного кориума после гравитационной инверсии его оксидной и металлической составляющих. Моделирование базируется на обобщенной формулировке задачи Стефана со свободными границами раздела фаз. Результаты сквозного расчета модели по программному пакету COMSOL Multiphysics свидетельствуют, что рассмотренные термокинетические процессы в целом обеспечивают снижение температуры и плотности кориума, уменьшение тепловых потоков на корпус ловушки, минимизацию выхода водорода и радиоактивных продуктов деления с их удержанием в контролируемом тепловом и фазовом состояниях до полной кристаллизации.

**Ключевые слова:** расплав активной зоны, подреакторная тигельная ловушка, жертвенный материал, тепловое состояние

**Ссылка при цитировании:** Коваленко А.Н., Коптюхов А.О., Мещеряков Д.К., Щуклинов А.П. Моделирование термокинетических процессов в тигельных ловушках расплава кориума при авариях реакторов на АЭС // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 61–76. DOI: 10.18721/JPM.13405

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## THERMOKINETIC PROCESSES IN THE CORIUM TRAPS OF HIGH-TEMPERATURE MELT DURING THE REACTOR ACCIDENTS AT AN A-PLANT: SIMULATION

**A.N. Kovalenko<sup>1,3</sup>, A.O. Koptuyukhov<sup>2</sup>,  
 D.K. Meshcheryakov<sup>3</sup>, A.P. Schuklinov<sup>3,4</sup>**

<sup>1</sup> Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,  
 St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> NRC "Kurchatov Institute" – PNPI,  
 Gatchina of Leningrad region, Russian Federation;

<sup>3</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
 St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>4</sup> JSC "Atomproekt", St. Petersburg, Russian Federation

The two-stage model of changing the thermal and phase state of the active zone melt in the cooled subreactor crucible trap when interacting with the sacrificial material and when crystallizing the diluted corium after the gravitational inversion of its oxide and metal components is presented. The simulation is based on the generalized formulation of Stefan's task. The results of the end-to-end calculation of the COMSOL Multiphysics package show that the thermokinetic processes examined generally reduce the temperature and density of the corium, reduce heat flows on the trap body, minimize the release of hydrogen and radioactive fission products with their retention in a controlled thermal and phase state until full crystallization.

**Keywords:** melt active zone, subreactor crucible trap, sacrificial material, thermal state

**Citation:** Kovalenko A.N., Koptuykhov A.O., Meshcheryakov D.K., Schuklinov A.P., Thermokinetic processes in the corium traps of high-temperature melt during the reactor accidents at an A-plant: simulation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 61–76. DOI: 10.18721/JPM.13405

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

### Введение

Данные по тяжелым авариям на АЭС свидетельствуют, что физические основы их развития связаны с критическим нарушением теплоотвода от активной зоны реактора. Такое нарушение вызывает перегрев и расплавление элементов реактора [1 – 3]. Технические решения по внутриреакторному удержанию образующегося расплава кориума, состоящего из смеси оксидов урана, плутония, циркония, осколков деления ядерного топлива, поглощающих материалов, металлов опорных конструкций (железо, никель, хром и др.), разработанные на базе наружного охлаждения корпуса для реакторов малой и средней мощности [4], не нашли надежного технико-экономического обоснования по предотвращению проплавления стенок у корпусов реакторов большой мощности. В качестве альтернативы [5], для них была разработана концепция внереакторных устройств локализации расплава (УЛР) как дополнительного сдерживающего барьера на пути распространения продуктов аварии с их удержанием в контролируемом тепловом и фазовом состояниях до полной кристаллизации.

Для европейских реакторов типа EPR эта концепция реализуется на основе использования бокового бокса растекания расплава, охлаждаемого сверху подачей воды [6]. Для отечественных реакторов типа ВВЭР используется подреакторная ловушка-теплообменник тигельного типа [7] с наполните-

лем из жертвенного материала (ЖМ), охлаждаемая с внешней стороны водой (рис. 1).

Объединение в УЛР функций водоохлаждаемого тигля для локализации расплава и накопителя с ЖМ значительно расширяет круг рассматриваемых задач, особенно с учетом неопределенности состава поступающего расплава и недостаточности изученных

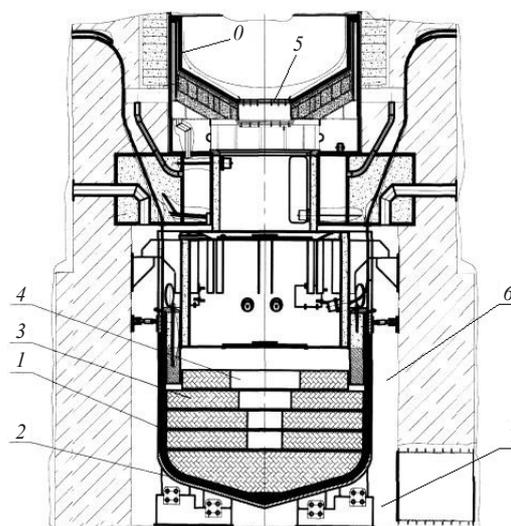


Рис. 1. Схема устройств локализации расплава (УЛР) тигельного типа для российских АЭС с реакторами ВВЭР: 0 – корпус реактора; 1 – охлаждаемый корпус ловушки; 2 – опоры УЛР; 3 – брикеты элементов жертвенного материала (ЖМ); 4 – блоки корзины удержания ЖМ; 5 – выплавляемая заглушка; 6 – боковой теплообменник; 7 – канал подвода охлаждающей воды и нижний теплообменник (по патенту РФ 2514419 [7])

явлений его взаимодействия с жертвенным материалом [8 – 10].

Невозможность натурного изучения этих процессов и ограниченность их экспериментального воспроизведения на стендовых маломасштабных установках выделяют задачу математического моделирования в качестве одной из приоритетных при исследовании физических механизмов удержания расплава кориума, захваченного ловушкой, в контролируемых тепловом и фазовом состояниях, а также обосновании принимаемых технических решений.

Следует отметить значительные затруднения в решении этих задач с применением известных специализированных программных кодов, разработанных для моделирования различных сценариев тяжелых аварий и их отдельных этапов на внутриреакторной ступени развития. Опыт практического использования некоторых из них (СОКРАТ, ГЕФЕСТ-УЛР, КОРСАР, АСТЕС) в расчетных исследованиях проектировщиков тигельных ловушек [11 – 15], а также бенчмарк этих и других кодов в институте «Объединенный исследовательский центр» (“Joint Research Centre”, JRS) Дирекции по энергетике, транспорту и климату Европейской комиссии JRC (г. Петтен, Нидерланды) [16] показывают заметный разброс данных как между различными кодами, так и при использовании одного кода у разных пользователей. Во многом это может быть связано с различиями не только в подходах к построению физико-математических моделей, но и нодализационных схем, вычислительных алгоритмов и критериев оценки получаемых результатов.

Определенные преимущества в этом отношении имеет подход взаимосвязанного учета термокинетических и фазово-химических факторов с возможностью реализации сквозного счета сопряженных мультифизических механических, тепловых, гидродинамических и химических явлений при моделировании процессов взаимодействия ЖМ с расплавом в тигельной ловушке и последующих изменений его состояния вплоть до полной кристаллизации.

### Термокинетические процессы в тигельной ловушке

Процессы взаимодействия между высокотемпературным расплавом кориума и энергопоглощающими компонентами жертвенного материала, плавящимися в кориуме и состоящими из смеси легких оксидов железа  $Fe_2O_3$  и алюминия  $Al_2O_3$ , протекают в водоохлаждаемой тигельной ловушке. Указанные процессы должны отвечать определенным требованиям:

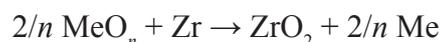
обеспечивать снижение температуры и плотности кориума, а также уменьшение тепловых потоков на корпус ловушки;

сохранять подкритичность расплава;

минимизировать выходы водорода и радиоактивных продуктов деления [9, 10, 17, 18].

Взаимосвязи между массо- и теплопереносом, превращениями вещества и трансформацией различных видов энергии в этих процессах определяются совокупностью сопряженных физических явлений механики, теплофизики, гидродинамики, ядерной физики.

Значительную роль в таких взаимосвязях играют протекающие химические реакции эндотермического восстановления оксидов из состава жертвенного материала и экзотермического окисления недоокисленных элементов расплава, в том числе циркония по окислительно-восстановительной реакции



(Me – металл,  $n$  – степень его окисления), способствующей минимизации выделения водорода при пароциркониевом контакте.

Тепловые эффекты этих реакций сопоставимы по мощности с величиной остаточных тепловыделений продуктов деления и их ядерных превращений [9, 10, 19]. Большой практический интерес представляет механизм процесса взаимодействия жертвенного оксидного материала и расплава, содержащего сильные восстановители, в режиме жидкофазного горения с суммарным эндотермическим эффектом в реакционной зоне [20]. Он может реализовываться, если продукты

химического взаимодействия находятся в жидком или диспергированном в жидкости состоянии как с металлизированной, так и с оксидированной составляющими расплава.

Дополнительное разбавление кориума за счет непрореагировавшей части расплавленных оксидов железа и алюминия из состава ЖМ приводит к заметному уменьшению плотности поступивших изначально, более тяжелых оксидных компонентов расплава, по сравнению с металлическими, и последующей гравитационной инверсии их начальной стратификации. Это создает возможность добавочной подачи охлаждающей воды на поверхность расплава без риска парового взрыва [21].

При этом в условиях неизотермичности может наблюдаться образование тугоплавкой гарнисажной корки, препятствующей массо- и теплообмену как на поверхности кориума, так и между его несмешивающимися оксидным и металлическим слоями. Также возникает опасность образования зон кристаллизации отдельных компонентов расплава с появлением вторичных очагов повышенной радиоактивности при локальном скоплении более тяжелых (относительно всего расплава) оксидов радиоактивного вещества. Для сохранения подкритичности в состав ЖМ включают иммобилизующие радионуклиды-добавки из тугоплавких тяжелых элементов, например оксида гадолиния, поглощающих тепловые нейтроны [18]. Локализация тяжелых оксидов с большим остаточным тепловыделением может также приводить к кипению диоксида урана с выходом компонентов в газовую фазу, к его абляционному взаимодействию со стальной стенкой корпуса самой ловушки и ее проплавлению при недостаточном внешнем охлаждении [8].

Корректный анализ протекающих процессов при взаимодействии кориума и жертвенных материалов связан с учетом фазовых превращений компонентов при изменении состава и термодинамических параметров системы, отражаемых на экспериментальных или расчетных диаграммах фазового состояния.

Высокая трудоемкость экспериментального получения полной диаграммы для данной системы и неопределенность пропорций состава кориума, вследствие большого числа параметров возможного механизма его образования в принимаемой нодализационной схеме (согласно оценкам, проведенным в работе [22], количество параметров составляет порядка  $10^3 - 10^4$ ), заменяется построением расчетных диаграмм «состав – условия – свойство» на основе химической термодинамики фаз переменного состава [9].

### Постановка задачи

В приближении фазового равновесия многокомпонентных термодинамических систем переменного состава, рассматривается двухстадийная математическая модель термокинетических процессов в ловушке расплава кориума, описывающая совокупность происходящих теплофизических, химических и гидродинамических явлений, а также термодинамических факторов их корреляции, с учетом результатов лабораторных исследований на маломасштабных установках [23].

На первой, «доинверсионной», стадии математическая модель формулируется в виде задачи Стефана для вещественной среды кориумной ловушки при подвижных источниках теплоты эндотермического разложения плавящегося ЖМ, теплоты экзотермических реакций химического взаимодействия с ЖМ недоокисленного циркония, хрома и урана, поступающих в расплаве активной зоны в ловушку, а также теплоты остаточного тепловыделения радиоактивных элементов. При этом изотерма, соответствующая температуре плавления компонентов ЖМ, разделяет расчетную область на подобласти, на границе которых ставится условие непрерывности для температуры и условие для изменения плотности теплового потока на величину, равную произведению энтальпии фазового перехода на нормальную компоненту скорости перемещения границы раздела фаз. В обобщенном виде [24] эта задача сводится к единому во всей области расплава нели-

нейному уравнению теплопроводности и массопереноса, включающему указанные неоднородные условия сопряжения для температуры и теплового потока на заранее неизвестных (свободных) границах раздела фаз непосредственно в само уравнение:

$$c_{eff} \rho \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} + \mathbf{v} \text{grad } T \right) = \text{div}(\lambda \text{grad } T) + f. \quad (1)$$

Здесь  $\rho$ , кг/м<sup>3</sup>, – плотность компонента среды;  $T$ , К – температура;  $\tau$ , с, – время;  $\mathbf{v}$ , м/с, – локальная скорость среды (вектор);  $\lambda$ , Вт/(м·К), – коэффициент теплопроводности; член  $(\mathbf{v} \text{grad } T)$  учитывает изменение температуры за счет конвективного переноса среды;  $f$ , Вт, определяет мощность внутренних источников теплоты;  $c_{eff}$ , Дж/(кг·К), определяет эффективную удельную теплоемкость, учитывающую теплоту фазового перехода на его границе в сосредоточенном виде.

При плавлении производная функция для эффективной теплоемкости выглядит следующим образом:

$$c_{eff} = c_{p,sol} \cdot (1 - \varphi(T)) + c_{p,liq} \cdot \varphi(T) + \delta(T - T_{mel}) L \frac{d\varphi}{dT}, \quad (2)$$

где  $c_{p,sol}$ ,  $c_{p,liq}$ , Дж/(кг·К), – величины теплоемкости твердой и жидкой фаз соответственно;  $\varphi(T)$  – долевая функция фазового перехода, определяемая по равновесной фазовой диаграмме системы;  $L$ , Дж/кг, – удельная теплота фазового перехода;  $\delta(T)$  – дельта-функция;  $T_{mel}$ , К, – температура фазового перехода.

В модели учитываются тепловые потоки не только в реакционном слое на подвижных границах фазовых переходов, но также в объеме взаимодействующих материалов, в том числе обусловленные остаточным тепловыделением продуктов ядерных превращений и теплообменом расплава кориума с ЖМ. Интенсивность теплообмена зависит как от ки-

нетики протекающих химических реакций, зависящей в свою очередь от температурных условий активации (прежде всего, начальной температуры поступившего расплава), так и от скорости перемешивания продуктов реакций с расплавом кориума, которая полагается мгновенной.

Учет теплопереноса при естественной конвекции в расплаве базируется на осредненных по Рейнольдсу нестационарных уравнениях Навье – Стокса для вязкой несжимаемой жидкости, определяющих влияние флуктуаций скорости конвекции в виде турбулентной кинетической энергии пульсаций и ее диссипации за счет внутреннего трения:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \tau} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \nabla[-p \mathbf{I} + (\mu + \mu_m)(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] - \left[ -\frac{2}{3}(\mu + \mu_m)(\nabla \mathbf{v}) \mathbf{I} - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] + \rho \mathbf{g}. \quad (3)$$

Здесь  $\rho$ , кг/м<sup>3</sup>, – объемная плотность;  $\mathbf{v}$ , м/с, – скорость течения (вектор);  $p$ , Па, – давление;  $\mu$ , Па·с, – динамическая вязкость;  $\mu_m$ , Па·с, – турбулентная вязкость;  $\mathbf{g}$ , м<sup>2</sup>/с, – ускорение свободного падения (вектор);  $k$ , Дж, – кинетическая энергия турбулентности (турбулентных пульсаций,  $k = \sum_i (V_i'^2) / 2$ ); верхний индекс  $T$  обозначает транспонированный тензор;  $\nabla$  – оператор Гамильтона;  $\mathbf{I}$  – единичный тензор.

Замыкание уравнения для турбулентной кинетической энергии  $k$  и скорости ее диссипации  $\varepsilon$ , вследствие вязкого трения

$$\mu_m = \rho c_\mu k^2 / \varepsilon,$$

производится по стандартной ( $k$ - $\varepsilon$ )-модели турбулентности [25].

В рассматриваемых условиях, когда интенсивность турбулентного теплопереноса обусловлена термогравитационным механизмом генерации энергии турбулентности, ее величина зависит от реализующегося режима тепловой стратификации оксидного

и металлического слоев кориума. Устойчивость тепловой стратификации определяется направлением подвода и отвода тепла через границы слоя относительно вектора силы тяжести.

Уравнение (3) решается совместно с уравнением неразрывности:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (4)$$

Для уравнений гидродинамики задаются обычные условия прилипания на границе контакта с корпусом и условие скольжения на оси симметрии и верхней свободной границе (равенство нулю нормальных компонент скоростей). В случае образования корки, на верхней границе также задается условие прилипания.

Для температурной задачи на боковых и нижней гранях ванны расплава, контактирующих с охлаждаемыми стенками корпуса ловушки, назначаются граничные условия теплообмена третьего рода при заданных температуре охлаждающей воды  $T_{cool}$  и коэффициенте теплоотдачи  $\alpha$ :

$$q_{cool} = -\lambda(\partial T / \partial h) = \alpha(T - T_{cool}), \quad (5)$$

где  $h$  — нормаль к поверхности, расчет коэффициента теплоотдачи  $\alpha$  проводился для развитого стационарного течения в кольцевом канале рубашки водяного охлаждения наружных стенок корпуса ловушки по рекомендациям [26].

Начальное тепловое состояние заполненной ловушки соответствует температуре оксидных и металлических компонентов расплава 3000 К и температуре жертвенного материала 400 К.

На второй, «постинверсионной», стадии поведения ванны расплава при  $L = 0$  и  $\varphi(T) = 1$  моделируются процессы охлаждения компонентов расплава после гравитационной инверсии его оксидной и металлической составляющих с учетом естественной конвекции, внешнего охлаждения корпуса ловушки и

переноса тепла излучением над поверхностью ванны. Оксидная и металлическая компоненты инверсированных слоев расплава полагаются гомогенными по структуре. Сохраняются заданные граничные условия теплообмена третьего рода на боковых и нижней поверхностях ванны расплава, контактирующих с охлаждаемыми стенками корпуса ловушки.

Условия на свободной поверхности ванны, граничащей с выделяющимися аэрозолями, дополняются учетом переноса теплоты излучением

$$\lambda(\partial T / \partial h) + \alpha(T - T_{cool}) + \epsilon \sigma(T^4 - T_{med}^4) = 0, \quad (6)$$

где  $\epsilon$  — коэффициент излучения (степень черноты) поверхности расплава;  $\sigma$ , Вт·м<sup>-2</sup>·К<sup>-4</sup>, — постоянная Стефана — Больцмана;  $T_{med}$ , К, — температура среды над зеркалом кориума.

Коэффициент теплообмена  $\alpha$  учитывался по данным [21] при добавочной подаче охлаждающей воды на поверхность оксидного расплава с использованием зависимости для пленочного кипения воды на твердой обращенной вверх поверхности согласно рекомендациям [26].

Начальные условия для этой стадии моделирования назначаются по результатам расчетов предыдущего модельного этапа.

Понижение температуры компонентов расплава при охлаждении до температуры их кристаллизации на данной модельной стадии снова приводит к задаче Стефана. Ее постановка отличается от представленной выше отсутствием учета теплоты химического взаимодействия расплава с ЖМ, а также учетом возможности образования пространственных зон кристаллизации, в том числе с непостоянной температурой фазового перехода, в зависимости от расположения линий солидуса и ликвидуса на фазовой диаграмме кориумной среды. Для их построения применяются методы термодинамического анализа на основе условной минимизации свободной энергии Гиббса с использованием набора различных моделей растворов [9].

### Вычислительные аспекты

Расчет вычислительной модели проводился численными методами с использованием программного пакета COMSOL Multiphysics, разработанного для моделирования связанных мультифизических механических, тепловых, электромагнитных, химических и гидродинамических явлений и систем [27]. Это позволило осуществить сквозной расчет термокинетических процессов с фазовыми превращениями в охлаждаемом расплаве высокотемпературного кориума при его взаимодействии с жертвенным материалом как на уровне отдельного структурного элемента [28], так и рассматриваемой здесь корзины ЖМ в целом. Совместимость пакета с языками программирования систем Matlab/Simulink, AutoCAD, SolidWorks, Exel позволяет включать дополнительные модели по расчету краевых условий, назначению свойств материалов и др.

Имеющийся в программе набор специальных модулей автоматически обеспечивает для заданной математической модели (1) – (6) подходящую численную дискретизацию и конфигурацию решателя. В данном случае набор реализован на основе метода конечных элементов с использованием метода сквозного счета со сглаживанием коэффициентов без явного выделения свободных границ раздела фаз в задаче Стефана. После нахождения решения эти границы иденти-

фицировались как изотермы, соответствующие температурам рассматриваемых фазовых переходов.

Исходные геометрические параметры ловушки, масса, состав и свойства различных сред и компонентов расплава кориума, значения мощности остаточного тепловыделения, характеристики жертвенного материала и кинетики химических реакций принимались на основании данных проектировщиков УЛР для реакторов ВВЭР мощностью 1000 – 1200 МВт.

Геометрия решаемой задачи полагалась двумерной осесимметричной. Сгенерированные сетки расчетной области для рассматриваемых задач на различных этапах моделирования представлены на рис. 2.

Разрешение пограничного слоя проводилось с использованием анизотропной сетки, шаг которой уменьшался на границах расчетной области. Минимальный размер структурного элемента сетки составлял 0,003 м, максимальный – 0,119 м при общем количестве 4 076 212 элементов и размерах расчетной области  $2,74 \times 2,85$  м. Проведенные расчеты сопоставлялись с результатами, полученными на другом минимальном шаге дискретизации – 0,016 м, при этом практическая сходимость решения оставалась на прежнем уровне.

Расчетное построение привлеченных фазовых диаграмм [9] для компонентов в си-

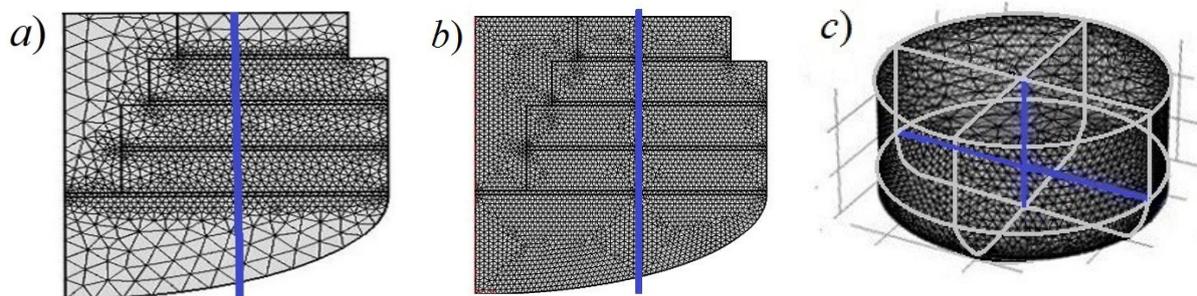


Рис. 2. Сгенерированные сетки конечных элементов для расчетных областей ловушки с выделенными контрольными сечениями (синие линии) на разных модельных этапах: на «доинверсионном», с учетом начального расположения брикетов ЖМ (а) и их плавления (b), а также на «постинверсионном», с учетом расположения более легкого оксидного слоя над более тяжелым металлическим, в ванне расплава кориума относительно выделенной горизонтальной границы раздела (с)

стеме взаимодействия расплава кориума и жертвенного материала базировалось на использовании компьютерной программы термодинамического анализа TernAPI, имеющейся в открытом доступе на сайте химфака МГУ [29], с помощью предложенного там алгоритма выпуклых оболочек.

### Результаты расчетов и их обсуждение

Результаты расчетов изменения теплового и фазового состояний расплава кориума, поступившего в ловушку при его взаимодействии с плавящимся жертвенным материалом на первой, «доинверсионной», стадии моделирования, представлены на рис. 3 и 4.

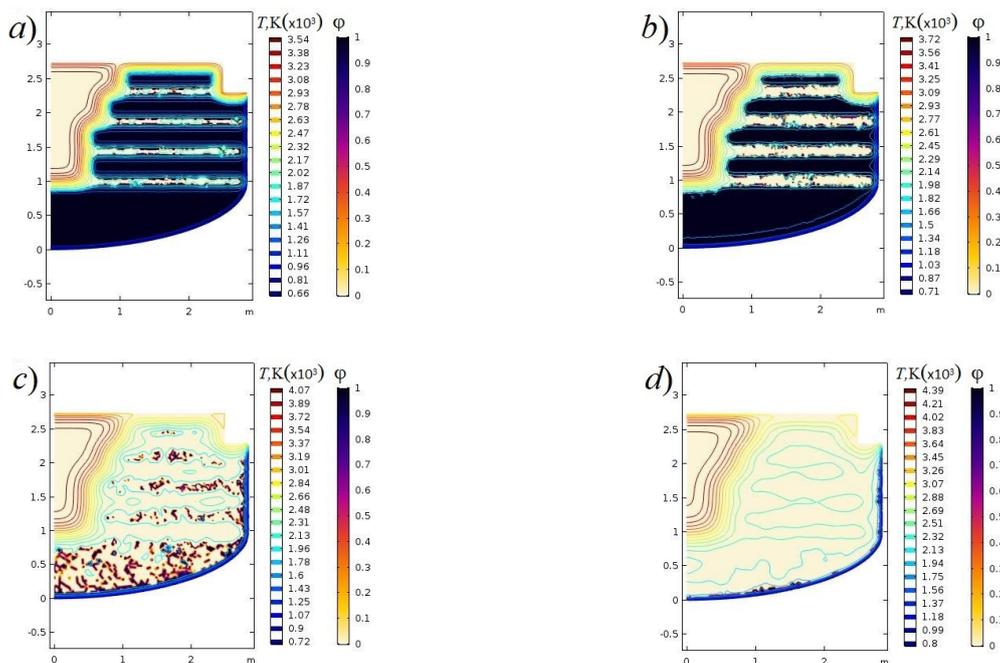


Рис. 3. Динамика изменения полей температуры ( $T$ , К) и соотношений  $\phi$  твердой и жидкой фаз (темная и светлая области соответственно) по расплаву кориума и ЖМ после его поступления в ловушку и до инверсии оксидной и металлической составляющих в разные моменты времени, мин: через 10 (a) 30 (b), 60 (c), 90 (d). Соотношение твердой и жидкой фаз  $\phi$  отражено насыщенностью окраски в пределах от 1 до 0

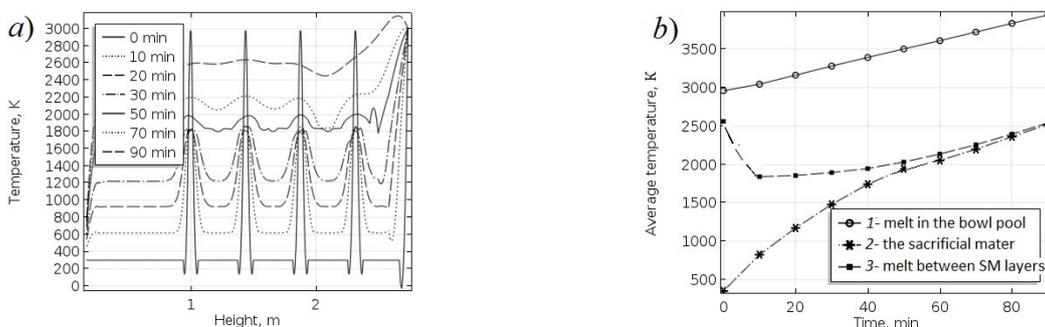


Рис. 4. Профили распределения температуры в контрольном сечении ловушки (см. рис. 2,b) для разных моментов времени (a) и средние значения температуры по расплаву кориума (1) и ЖМ (2) на этапах после поступления в ловушку и до инверсии оксидной и металлической составляющих (b). Отражены этапы: 1 – расплав в чаше ванны, 2 – ЖМ, 3 – расплав между брикетными ярусами ЖМ

Как видно, в начальный период это взаимодействие сопровождается снижением температуры кориума, несмотря на остаточное тепловыделение, за счет затрат теплоты на нагрев и проплавление жертвенного материала. Термокинетические процессы характеризуются достаточно резким охлаждением высокотемпературного расплава между блоками наполнителя, вплоть до его кратковременного затвердевания, сменяющегося общим плавлением вместе со структурными элементами ЖМ при протекании между ними окислительно-восстановительных химических реакций.

Затем наблюдается подъем температуры расплава под действием остаточного энерговыделения радиоактивных элементов. Совместно с дополнительным разбавлением кориума за счет непрореагировавшей части расплавленных оксидов железа и алюминия из состава ЖМ это приводит к заметному уменьшению плотности поступивших изначально, более тяжелых оксидных ком-

понентов расплава, по сравнению с металлическими, и их быстрой обратной гравитационной инверсии. С учетом оценки высокой скорости всплытия оксидированной составляющей и перемещения на дно ловушки металлизированной составляющей [23], продолжительность этих процессов ориентировочно составляет около 20 – 25 мин в стадии начального захлаживания кориума и около 90 – 120 мин до окончательного расплавления ЖМ с инверсией начальной стратификации металлического и оксидного слоев расплава.

Результаты расчетов изменения теплового и фазового состояний расплава кориума после этапа химического реакционного взаимодействия с ЖМ и инверсии несмешивающихся между собой оксидной и металлической составляющих разной плотности, с переходом в верхнюю часть бассейна расплава расплавленных оксидов, а в нижнюю – расплавленных металлов, представлены на рис. 5 и 6.

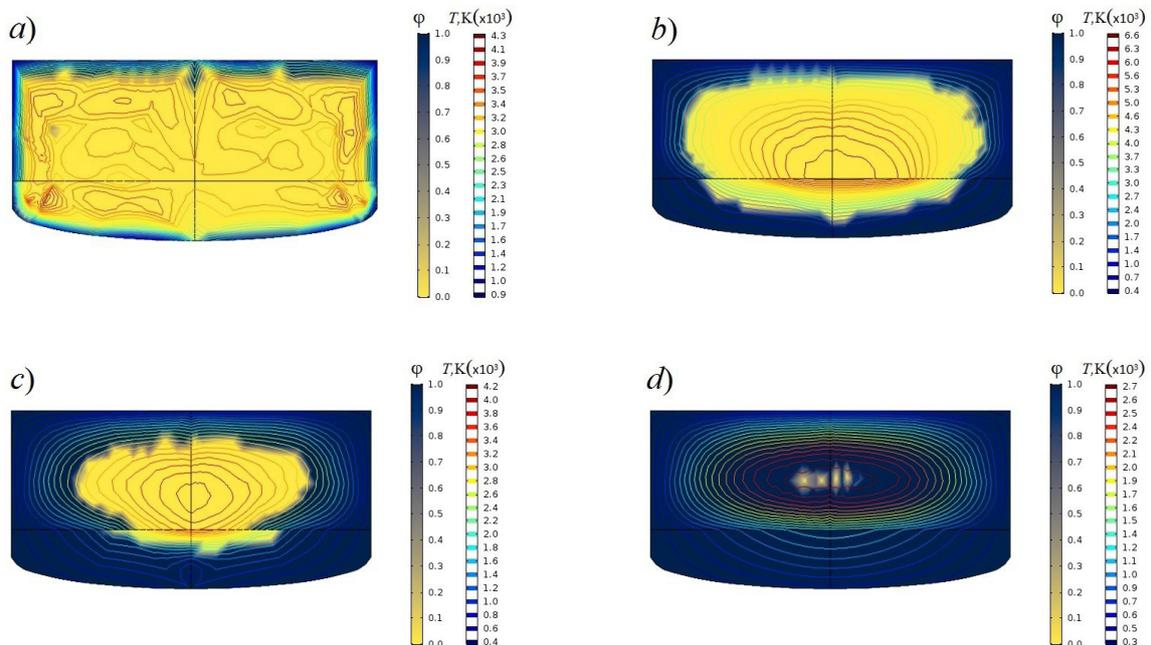


Рис. 5. Динамика изменения полей температуры ( $T$ , К) и соотношений  $\phi$  твердой и жидкой фаз (темная и светлая области соответственно) расплава кориума после его взаимодействия с ЖМ и инверсии оксидной и металлической составляющих в разные моменты времени, ч: через 5 (a) 40 (b), 65 (c), 78 (d)

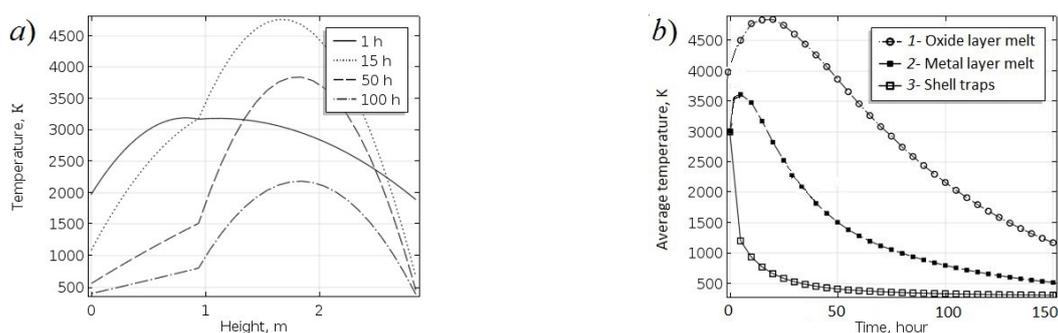


Рис. 6. Профили распределения температуры в контрольном сечении ловушки (см. рис. 2,с) для разных моментов времени (а) и средние значения температуры по расплаву кориума после инверсии оксидной и металлической составляющих (б). Показаны данные для оксидного (1) и металлического (2) слоев расплава, а также для оболочки ловушки (3)

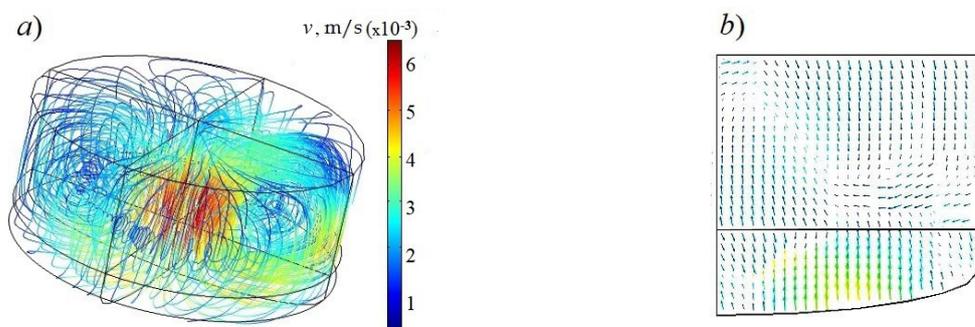


Рис. 7. Линии тока в бассейне расплава (а) и поле скоростей в его вертикальном сечении (б)

Результаты расчетов по уравнениям движения при естественной конвекции компонентов расплава кориума приведены на рис. 7.

Видно, что при реализующихся направлениях подвода и отвода тепла через границы верхнего оксидного слоя расплава относительно вектора силы тяжести, возникает подъемное движение в его центральной области и опускное на периферии вблизи охлаждаемых стенок тигля. Движение потоков в нижнем металлическом слое носит противоположный характер с неустойчивой тепловой стратификацией под границей раздела с оксидным слоем расплава. Согласно экспериментальным данным, приведенным в работе [30], турбулизация течений металлических и оксидных расплавов в свободной термогравитационной конвекции проявляется при величине произведения критериев

Грасгофа и Прандтля более 47 000. Для параметров рассматриваемой задачи это условие выполняется с большим запасом. Аналогичные явления будут наблюдаться и вблизи поверхности раздела затвердевающих фаз, так как расплав всегда перегрет относительно температуры кристаллизации.

После инверсии компонентов расплава температура его оксидного слоя, где преимущественно сосредоточены источники остаточного тепловыделения, некоторое время продолжает расти и после достижения максимума начинает постепенно снижаться под влиянием внешнего охлаждения боковых стенок корпуса ловушки и подачи воды на верхнюю поверхность оксидного слоя расплава без риска парового взрыва [21].

Температура металлического слоя изменяется почти синхронно за счет теплообмена в его поверхностной области, примыкающей



к оксидному слою, оставаясь при этом ниже температуры последнего за счет внешнего охлаждения донной части корпуса ловушки. Стабилизация тепловых процессов происходит спустя 10 – 20 ч, с дальнейшим переходом в квазирегулярный режим охлаждения расплава. Несколько больший темп остывания металлического слоя и более легкоплавкие составляющие обуславливают его опережающее затвердевание, по сравнению с тугоплавкими компонентами оксидного слоя. Там в течение достаточно длительного времени (40 – 65 ч) остается довольно большое расплавленное ядро, и даже к 80 часам в закристаллизовавшихся зонах сохраняются отдельные очаги жидкой фазы. На всем протяжении рассмотренных процессов тепловые потоки от кориума к стенкам ловушки находятся в диапазоне величин от 0,2 до 0,6 МВт/м<sup>2</sup>, которые с достаточным запасом не превышают критическую тепловую нагрузку [14] на внешней охлаждаемой водой поверхности корпуса тигля.

### Заключение

Представленная двухстадийная модель термокинетических процессов и результаты сквозного расчета изменений теплового и фазового состояний расплава кориума активной зоны, поступившего в ловушку, при тяжелых авариях реакторов на АЭС детализируют характеристики его взаимодействия с жертвенным материалом (ЖМ) и закономерности последующего охлаждения до температуры кристаллизации, заложенные проектировщиками ловушек.

Физическим обоснованием выделенных модельных стадий являются фазовые переходы агрегатного состояния компонентов системы, включающие плавление жертвенного материала на основе оксидов железа и алюминия в высокотемпературном расплаве кориума в начальный период их взаимодействия и последующую кристаллизацию продуктов этого взаимодействия в период интенсивного внешнего охлаждения корпуса ловушки. Их математическое моделирование базируется на обобщенной формулировке за-

дачи Стефана со свободными границами раздела фаз, учитывающей остаточное радиоактивное тепловыделение кориума, тепловые эффекты плавления ЖМ и химических реакций восстановления его оксидов при окислении недоокисленных элементов расплава, теплоперенос естественной конвекцией в расплаве, теплопередачу охлаждающей воде через стенки корпуса и тепловое излучение во внутреннем пространстве.

Естественным разграничением модельных стадий служит явление быстрой гравитационной инверсии несмешивающихся между собой оксидной и металлической составляющих разной плотности с переходом расплавленных оксидов в верхнюю часть бассейна расплава, а расплавленных металлов – в нижнюю. Такое изменение структуры бассейна проявляется из-за существенного уменьшения плотности поступивших изначально более тяжелых оксидных компонентов расплава, по сравнению с металлическими, после химического реакционного взаимодействия расплава с ЖМ.

Использованный в расчетах программный пакет COMSOL Multiphysics не создает затруднений в решении рассмотренных задач при сквозном расчете и анализе термокинетических процессов во внекорпусных устройствах локализации расплава тигельного типа, которые отмечены при применении известных специализированных программных кодов, разработанных для моделирования различных сценариев тяжелых аварий и их отдельных этапов на внутриреакторной ступени развития.

Полученные результаты свидетельствуют, что рассмотренные термокинетические процессы в целом обеспечивают снижение температуры и плотности кориума, уменьшение тепловых потоков на корпус ловушки, минимизацию выхода водорода и радиоактивных продуктов деления. Вместе с тем, разброс в оценке режимов и времени охлаждения расплава кориума с неопределенностью его состава требует углубленного рассмотрения термокинетики процессов кристаллизации, крайне важных из-за опасности появления вторичных очагов повышенной радиоак-

тивности при локальном скоплении более тяжелого (относительно всего расплава) радиоактивного вещества, а также выходом компонентов в газовую фазу. Их изучение на следующих этапах проекта связывается с доработкой пространственно-кинетической специфики вычислительной модели в

3D-постановке, ее верификацией и валидацией применимости, в том числе с учетом задач оценки теплового и термонапряженного состояния корпуса ловушки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 19-08-01181).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Walker S.J.** Three-mile island: A nuclear crisis in historical perspective. Berkeley: University of California Press, 2004. 317 p.
2. **Абагян А.А., Аршавский И.М., Дмитриев В.М., Крошилин А.Е., Кравешкин А.В., Халимойчук В.А.** Расчетный анализ начальной стадии аварии на Чернобыльской АЭС // Атомная энергия. 1991. Т. 71. Вып. 4. С. 275–287.
3. **Gonzalez A.J., Akashi M., Voice J.D., Chino M., Homma T., Ishigure N., Kai M., Kusumi S., Lee J.K.** Radiological protection issues arising during and after the Fukushima nuclear reactor accident // Journal of Radiological Protection. 2013. Vol. 33. No. 3. Pp. 497–571.
4. **Theofanous T.G., Lin C., Addition S., Angelini S., Kymaelaeninen O., Salmassi T.** In-vessel coolability and retention of a core melt // Nuclear Engineering and Design. 1997. Vol. 169. No. 1–3. Pp. 1–48.
5. **Kim H.Y., Bechta S., Foit J., Hong S.W.** In-vessel and ex-vessel corium stabilization in light water reactor // Science and Technology of Nuclear Installations. 2018. Vol. 2018. Article ID 3918150 (3 p.).
6. **Fischer M.** Main features of the EPR melt retention concept (Report FZKA-6475) // Forschungszentrum Karlsruhe GmbH Technik und Umwelt (Germany). 2000. Vol. 32. No. 14. Pp. 508–517. Proceedings of the OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability. Alsmeyer H. (Ed.). Karlsruhe, Germany, 15–18 November 1999.
7. **Безлепкин В.В., Сидоров В.Г., Кухтевич В.О., Курчевский А.И., Астафьева В.О., Хабенский В.Б., Грановский В.С., Бешта С.В., Гусаров В.В.** Устройство локализации и охлаждения кориума ядерного реактора. Пат. № 25-14419 Российская Федерация, МПК G21C 9/016.; заявитель и патентообладатель – СПб.
8. **Столяревский А.Я.** Спасает ли ловушка? // Атомная стратегия. 2014. № 4 (89). С. 16–18.
9. **Гусаров В.В., Альмяшев В.И., Хабенский В.Б., Бешта С.В., Грановский В.С.** Физико-химическое моделирование и анализ процессов взаимодействия расплава активной зоны ядерного реактора с жертвенным материалом // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31. № 1. С. 71–90.
10. **Асмолов В.Г., Сулацкий А.А., Бешта С.В., Грановский В.С., Хабенский В.Б., Крушинов Е.В., Витоль С.А., Альмяшев В.И., Гусаров В.В., Стрижов В.Ф.** Взаимодействие расплава активной зоны ядерного реактора с оксидным жертвенным материалом устройства локализации для АЭС с ВВЭР // Теплофизика высоких температур. 2007. Т. 45. № 1. С. 28–37.
11. Разработка и применение интегральных кодов для анализа безопасности АЭС. Под общ. ред. чл.-корр. РАН Большова Л.А. // Труды ИБРАЭ РАН (Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН). Вып. 12. М.: Наука, 2011. 304 с.
12. **Литышев А.В., Пантюшин С.И., Аулова О.В., Гаспаров Д.Л., Букин Н.В., Быков М.А.** Опыт выполнения анализов тяжелых запроектных аварий для РУ ВВЭР с использованием РК СОКРАТ // Материалы 9-й МНТК «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР». Секция 1. г. Подольск, Россия, 19–22 мая 2015. Подольск: ОКБ «Гидропресс», 2015. С. 1–22.
13. **Звонарев Ю.А., Мельников И.А., Шмельков Ю.Б.** Моделирование бассейна расплава на днище корпуса ВВЭР-1000 в условиях тяжелой аварии с плавлением топлива // Материалы 10-й МНТК «Обеспечение безо-

пасности АЭС с ВВЭР»; г. Подольск, Россия, 16–19 мая 2017. Подольск: ОКБ «Гидропресс», 2017. С. 1–11.

14. **Фиськов А.А., Безлепкин В.В., Семашко С.Е., Сидоров В.Г., Астафьева В.О.** Опыт обоснования устройства локализации расплава ЛАЭС-2 // Материалы Отраслевой научно-практической конференции молодых специалистов и аспирантов «Молодежь ЯТЦ: наука, производство, экологическая безопасность». СПб.: ОАО «Атомэнергопроект», 2010. С. 5.

15. **Василенко В.А., Мигров Ю.А., Драгунов Ю.Г., Быков М.А.** Теплогидравлический расчетный код КОРСАР. Состояние разработки и опыт применения. // Сборник трудов 3-й МНТК «Обеспечение безопасности АЭС с РУ ВВЭР»; г. Подольск, Россия, 26–30 мая 2003. Подольск: ОКБ «Гидропресс». 2003. Т. 5. Часть 3. С. 204 – 212.

16. **Sangiorgi M., Grah A., Pascal G., et al.** In-vessel melt retention (IVMR) analysis of a VVER-1000 NPP // JRC Technical Reports EUR 27951. JRC Science Hub, European Union, 2016. 250 p.

17. **Удалов Ю.П., Федоров Н.Ф., Соловейчик Э.Я., Павлова Е.А.** Новые функциональные оксидные материалы для ядерного реакторостроения // Химическая промышленность. 2003. Т. 80. № 12. С. 3–10.

18. **Гусаров В.В., Альмяшев В.И., Хабенский В.Б., Бешта С.В., Грановский В.С.** Новый класс функциональных материалов для устройства локализации расплава активной зоны ядерного реактора // Российский химический журнал. 2005. Т. XLIX. № 4. С. 42–53.

19. **Стивенс Дж.** Послеаварийный отвод тепла от обломков разрушенной активной зоны // Атомная техника за рубежом. 1984. № 12. С. 14–22.

20. **Гусаров В.В., Альмяшев В.И., Хабенский В.Б., Бешта С.В., Грановский В.С.** Физико-химическое моделирование горения материалов с суммарным эндотермическим эффектом // Физика и химия стекла. 2007. Т. 33. № 5. С. 678–685.

21. **Лопух Д.Б., Логинов И.А., Грановский В.С., Бешта С.В., Хабенский В.Б., Мартынов А.П., Крушинов Е.В., Витоль С.А., Кулагин**

**И.В., Печенков А.Ю.** Экспериментальное исследование процессов, возникающих при подаче воды на расплав стали // Теплоэнергетика. 2001. № 9. С. 25–31.

22. **Лагуненко А.С., Краснов В.А., Довыдьков С.А.** Топливо в помещении 305/2. Возможный сценарий образования ядерно-опасных зон // Проблемы безопасности атомных электростанций и Чернобиля. 2015. Вып. 24. С. 51–59.

23. **Альмяшев В.И., Грановский В.С., Хабенский В.Б., Крушинов Е.В., Сулацкий А.А., Витоль С.А., Гусаров В.В., Бешта С.В.** Экспериментальное исследование процессов окисления расплава корнума в корпусе реактора // Научно-технический сборник «Технологии обеспечения жизненного цикла ядерных энергетических установок». г. Сосновый Бор: НИТИ им. А.П. Александрова. 2017. № 4 (10). С. 59–85.

24. **Самарский А.А., Вабищевич П.Н.** Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.

25. **Снегирёв А.Ю.** Численное моделирование турбулентных течений. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. 143 с.

26. **Кутателадзе С.С.** Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. Справочное пособие. М.: Энергоатомиздат, 1990. 367 с.

27. COMSOL Multiphysics. Программные продукты COMSOL. Burlington, MA. Режим доступа: <https://www.comsol.ru/> (дата обращения: 07.07.2020).

28. **Golovacheva V.G., Kovalenko A.N., Meshcheryakov D.K., Schuklinov A.P., Koryukhov A.O.** Correlation between heat-mass transfer, chemical reactions and phase transformations in corium melt localization devices during severe nuclear power plant accidents // Diversity in Nuclear: International Youth Nuclear Congress (NIYNC2020), 8 – 13 March 2020, Sydney, Australia. Conference Proceedings. Sydney, Australia, 2020. Pp. 176–179.

29. **Voskov A.L., Dzuban A.V., Maksimov A.V.** TernAPI program for ternary phase diagrams with isolated miscibility gaps calculation by the convex hull method // Fluid Phase Equilibria. 2015. Vol. 388. 25 February. Pp. 50–58.

30. **Конаков П.К., Веревошкин Г.Е., Горен-**

ков Л.А., Зарувинская Л.А., Кудрявцев В.В., Третьяков Г.А. Тепло- и массообмен при по- лучении монокристаллов. М.: Metallurgiya, 1971. 238 с.

*Статья поступила в редакцию 20.07.2020, принята к публикации 27.08.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОВАЛЕНКО Анатолий Николаевич** – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник Центра физики наногетероструктур Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, профессор Высшей школы атомной и тепловой энергетики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26  
ras-kan@mail.ru

**КОПТЮХОВ Артём Олегович** – инженер-технолог НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, г. Гатчина Ленинградской области, Российская Федерация.

188300 Российская Федерация, Ленинградская область, г. Гатчина мкр. Орлова роща, д. 1  
t44h@yandex.ru

**МЕЩЕРЯКОВ Дмитрий Константинович** – ассистент Высшей школы атомной и тепловой энергетики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
fess\_i@bk.ru

**ЩУКЛИНОВ Алексей Павлович** – кандидат технических наук, ведущий инженер АО «АТОМПРО-ЕКТ», доцент Высшей школы атомной и тепловой энергетики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

197183, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Савушкина, 82а  
mupol@mail.ru

## REFERENCES

1. **Walker S.J.**, Three-mile island: A nuclear crisis in historical perspective, University of California Press, Berkeley, 2004.
2. **Abagyan A.A., Arshavskii I.M., Dmitriev V.M., et al.**, Computational analysis of the initial stage of the accident at the Chernobyl' atomic power plant, Atomic Energy. 71 (4) (1991) 785–795.
3. **Gonzalez A.J., Akashi M., Boice J.D., et al.**, Radiological protection issues arising during and after the Fukushima nuclear reactor accident, Journal of Radiological Protection. 33 (3) (2013) 497–571.
4. **Theofanous T.G., Lin C., Addition S., et al.**, In-vessel coolability and retention of a core melt, Nuclear Engineering and Design. 169 (1–3) (1997) 1–48.
5. **Kim H.Y., Bechta S., Foit J., Hong S.W.**, In-vessel and ex-vessel corium stabilization in light water reactor, Science and Technology of Nuclear Installations. 2018 (2018) ID 3918150 (3 p).
6. **Fischer M.**, Main features of the EPR melt retention concept (Rep. FZKA-6475), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH Technik und Umwelt (Germany). 32 (14) (2000) 508–517; Proceedings of the OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability, Alsmeyer H. (Ed.), Karlsruhe, Germany, 15–18 November, 1999.
7. **Bezlepkin V.V., Sidorov V.G., Kukhtevich**

**V.O., et al.**, Ustroystvo lokalizatsii i okhlazhdeniya koriuma yadernogo reaktora [An arrangement to localize and cool down the nuclear reactor's corium], Pat. No. 2514419, Russian Federation, MPK G21C 9/016.; SPb., OAO «Golovnoy Institut "VNIPIET"» is a declarant and a patentee, No. 2012124161; declar. 20.02.14; publ. 27.04.2014, Bull. No. 23 (II Ch.). 11 p.

8. **Stolyarevskiy A.Ya.**, Spasayet li lovushka? [Does a trap rescue?], Atomnaya Strategiya. (4(89)) (2014) 16–18 (in Russian).

9. **Gusarov V.V., Almjashev V.I., Khabenskiy V.B., et al.**, Physicochemical modeling and analysis of the interaction between a core melt of the nuclear reactor and a sacrificial material, Glass Physics and Chemistry. 31 (1) (2005) 53–66.

10. **Asmolov V.G., Sulatskii A.A., Beshta S.V., et al.**, The interaction of nuclear reactor core melt with oxide sacrificial material of localization device for a nuclear power plant with water-moderated water-cooled power reactor, High Temperature. 2007. T. 45(1) (2007) 22–31.

11. Integral codes development and application for NPP safety analysis, Proceedings of IBRAE RAS, Ed. by L. A. Bolshov; Nuclear Safety Institute (IBRAE) RAS, Nauka, Moscow, 2011, Iss. 12 (in Russian).

12. **Lityshev A.V., Pantyushin S.I., Aulova O.V., et al.**, Experience in carrying out calculations of severe beyond design basis accidents for VVER RP using code SOKRAT, Proceedings of the 9<sup>th</sup> International Scientific and Technical Conference “Safety Assurance of NPP with VVER”, Podolsk, Russia, May 19–22, SCB “Gidropress”, Podolsk (2015) 1–22.

13. **Zvonarev Yu.A., Melnikov I.A., Shmelkov Yu.B.**, Simulation of corium pool behavior on RPV bottom under severe accident for VVER-1000, Proceedings of the 10<sup>th</sup> International Scientific and Technical Conference “Safety Assurance of NPP with VVER”, Podolsk, Russia, May 16–19, SCB “Gidropress”, Podolsk (2017) 1–22.

14. **Fiskov A.A., Bezlepkina V.V., Semashko S.E., et al.**, Opyt obosnovaniya ustroystva lokalizatsii rasplava LAES-2 [An experience on foundation for the arrangement of the melt localization at Leningrad NPP-2], Proceedings of the Industry Research-to-Practice Conference "The Youth

NFC: Science, Production, Ecological Safety", St. Petersburg, "Atomenergoprojekt", 2010. P. 5.

15. **Vasilenko V.A., Migrov Yu.A., Dragunov Yu.G., Bykov M.A.**, Heat-hydraulic design code KORSAR: Development status and experience, Proceedings of the 3<sup>rd</sup> International Scientific and Technical Conference “Safety Assurance of NPP with VVER”, Podolsk, Russia, May 26–30 2003, SCB “Gidropress”, Podolsk. 5 (3) (2003) 204–212.

16. **Sangiorgi M., Grah A., Pascal G., et al.**, In-vessel melt retention (IVMR) analysis of a VVER-1000 NPP // JRC Technical Reports EUR 27951. JRC Science Hub, European Union, 2016. 250 p.

17. **Udalov Yu.P., Fedorov N.F., Soloveychik Ya., Pavlova E.A.**, Novyye funktsionalnyye oksidnyye materialy dlya yadernogo reaktorostroyeniya [New functional materials for nuclear rocket production], Industry & Chemistry. 80 (12) (2003) 3–10 (in Russian).

18. **Gusarov V.V., Almjashev V.I., Khabenskiy V.B., et al.**, Novyy klass funktsionalnykh materialov dlya ustroystva lokalizatsii rasplava aktivnoy zony yadernogo reaktora [A new class of functional materials for making the arrangement for localization the melt's core region], Rossiyskiy Khimicheskiy Zhurnal. XLIX (4) (2005) 42–53 (in Russian).

19. **Stivens J.**, Poslevariynnyy otvod tepla ot oblomkov razrushennoy aktivnoy zony [Post-accident heat removal from the wreckage of the destroyed core], Atomnaya Tekhnika za Rubezhom (12) (1984) 14–22 (in Russian).

20. **Gusarov V.V., Almjashev V.I., Khabenskiy V.B., et al.**, Physicochemical simulation of the combustion of materials with the total endothermal effect, Glass Physics and Chemistry. 33 (5) (2007) 492–497.

21. **Lopukh D.B., Loginov I.A., Granovskii V.S., et al.**, Experimental investigation of processes arising when flooding a steel melt, Thermal Engineering. 48 (9) (2001) 725–731.

22. **Lagunenkov O.S., Krasnov V.O., Dovydkov S.A.**, Fuel in room 305/2. Probable formation scenario for nuclear-dangerous zones, Problemi bezpeki atomnikh yelektrostantsiy i Chornobilya [Safety Problems of Nuclear Power Plants and Chernobyl]. (24) (2015) 51–59 (in Russian).

23. **Almyashev V.I., Granovskiy V.S., Khabenskiy V.B., et al.**, Experimental study of corium melt oxidation processes in the reactor vessel, “Tekhnologii Obespecheniya Zhiznennogo Tsikla Yadernykh Energeticheskikh Ustanovok” [Maintenance Technology of the Life Cycle of Nuclear Power Installations]. (4 (10)) (2017) 59–84 (in Russian).
24. **Samarskiy A.A., Vabishchevich P.N.**, Vy-chislitel'naya teploperedacha [Computational heat transfer], Editorial URSS, Moscow, 2003 (in Russian).
25. **Snegiryov A.Yu.**, Chislennoye modelirovaniye turbulentykh techeniy [Numerical simulation of turbulent flows], Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg, 2009.
26. **Kutateladze S.S., Leontiev A.I.**, Heat transfer, mass transfer, and friction in turbulent boundary layers, Hemisphere, New York, 1990.
27. COMSOL Multiphysics, Software products COMSOL, Burlington, MA. URL: <https://www.comsol.ru>.
28. **Golovacheva V.G., Kovalenko A.N., Meshcheryakov D.K., et al.**, Correlation between heat – mass transfer, chemical reactions and phase transformations in corium melt localization devices during severe nuclear power plant accidents, Diversity in Nuclear: International Youth Nuclear Congress (NIYNC2020), 8–13 March 2020, Sydney, Australia (2020) 176–179.
29. **Voskov A.L., Dzuban A.V., Maksimov A.V.**, TernAPI program for ternary phase diagrams with isolated miscibility gaps calculation by the convex hull method, Fluid Phase Equilibria. 2015. Vol. 388 (25 February) (2015) 50–58.
30. **Konakov P.K., Vervovochkin G.E., Gorenkov L.A., et al.**, Teplo- i massoobmen pri poluchenii monokristallov [Heat and mass exchange when manufacturing monocrystals], Metallurgy Publishing, Moscow, 1971 (in Russian).

Received 20.07.2020, accepted 27.08.2020.

## THE AUTHORS

### **KOVALENKO Anatoliy N.**

*Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences,  
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
ras-kan@mail.ru

### **KOPTYUKHOV Artem O.**

*NRC «Kurchatov Institute» – PNPI*  
Mcr. Orlova Roshcha, Gatchina 1, Leningradskaya oblast, 188300, Russian Federation  
t44h@yandex.ru

### **MESHCHERYAKOV Dmitry K.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
fess\_i@bk.ru

### **SCHUKLINOV Alexey P.**

*JSC “Atomproekt”;*  
*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
82A Savushkina St., St. Petersburg, 197183, Russian Federation  
mupol@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.13406  
 УДК 532.5:536.24

## **ВЛИЯНИЕ УГЛА НАКЛОНА ЛОКАЛЬНО НАГРЕТОЙ ПОВЕРХНОСТИ НА ТЕПЛООБМЕН ПРИ БИФУРКАЦИИ СВОБОДНОКОНВЕКТИВНОГО ФАКЕЛА**

**Е.Ф. Храпунов, Ю.С. Чумаков**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
 Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе представлены результаты численного моделирования автоколебательного режима свободноконвективного факела, который формируется над слегка наклонной (по отношению к горизонту) поверхностью. Рассматриваются фрагменты течения в пристенной области, анализируются поля распределения компонент скорости. Особое внимание уделено анализу картин распределения мгновенных и осредненных во времени значений коэффициента теплоотдачи  $\alpha$ . На основании представленных результатов сделан вывод о существовании оптимального угла наклона поверхности, который обеспечивает наиболее эффективный теплообмен при развитом периодическом режиме течения.

**Ключевые слова:** свободная конвекция, численное моделирование, бифуркация течения, теплообмен, пуффинг

**Ссылка при цитировании:** Храпунов Е.Ф., Чумаков Ю.С. Влияние угла наклона локально нагретой поверхности на теплообмен при бифуркации свободноконвективного факела // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 77–88. DOI: 10.18721/JPM.13406

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## **INFLUENCE OF THE SLOPE ANGLE OF A LOCALLY HEATED SURFACE ON THE HEAT TRANSFER DURING BIFURCATION OF A PURE THERMAL PLUME**

**E.F. Khrapunov, Yu.S. Chumakov**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
 St. Petersburg, Russian Federation

The results of numerical simulation of the puffing regime of a pure thermal plume, which forms above a slightly inclined (with respect to the horizon) surface have been presented. The flow structure in the near-wall region was investigated and the fields of the velocity components were analyzed. Particular attention was paid to the analysis of the distribution of instantaneous, time- and surface-averaged values of the heat transfer coefficient  $\alpha$ . Based on the presented results, it was concluded that there was an optimal angle of inclination of the surface maintaining the most efficient heat transfer with a developed periodic flow regime.

**Keywords:** natural convection, numerical simulation, bifurcation, heat transfer, puffing

**Citation:** Khrapunov E.F., Chumakov Yu.S., Influence of the slope angle of a locally heated surface on the heat transfer during bifurcation of a pure thermal plume, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 77–88. DOI: 10.18721/JPM.13406

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Анализ известных авторам работ, посвященных изучению свободноконвективных течений, показывает, что значительные успехи достигнуты, в первую очередь, при изучении течений, формирующихся вдоль вертикальных нагретых поверхностей, когда вектор ускорения свободного падения  $\mathbf{g}$  параллелен нагретой поверхности [1, 2]. Это во многом связано с появившейся во второй половине двадцатого века возможностью описывать подобные течения в рамках приближения пограничного слоя. Возможность численно решать уравнения позволила проводить подробный анализ характеристик как ламинарного, так и развитого турбулентного пограничного слоя.

В свою очередь исследования потоков, формирующихся над горизонтальными, локально нагретыми поверхностями, перпендикулярными вектору  $\mathbf{g}$ , — свободноконвективных факелов — долгое время представляло значительные трудности [3, 4]. Для подобных течений над малой частью поверхности (около ее центра) наблюдается восходящее течение, а формирование пристенного слоя над остальной поверхностью происходит под действием благоприятного градиента давления, сформированного восходящей струей. Очевидно, что наличие восходящего течения, а также участка плавного перехода от пристенного слоя к восходящей струе, не позволяет использовать приближение пограничного слоя для описания факела в целом. Такое приближение оказывается справедливым над небольшим участком поверхности, удаленным как от ее кромки, так и от ее центра, а также на значительном удалении от поверхности диска в области развитого восходящего течения. Участок факела, заключенный между этими двумя областями (переходная область) принципиально нельзя описать в рамках указанного приближения. Единственным способом численно определить характеристики потока в этой области долгое время оставалось «сращивание» решений, полученных на участках применимости уравнений пограничного слоя.

В настоящее же время существенно возросший уровень экспериментальных и численных методов позволил описывать течение в целом, не разделяя его на фрагменты, в том числе акцентировать внимание на анализе изменения не только осредненных, но и мгновенных характеристик факела. Была обнаружена, в частности, бифуркация решения, в результате которой устойчивый стационарный режим сменяется устойчивым автоколебательным — пуффингом [6 – 9]. Суть пуффинга, который является частным случаем бифуркации Хопфа, заключается в периодическом разрушении пристенного слоя всплывающими торообразными вихревыми структурами [10]. Известны работы [7, 9], посвященные анализу изменения отдельных характеристик факела при бифуркации, однако влияние параметров нагреваемой поверхности (например, наклон относительно горизонтального положения) на течение в целом остается слабо изученным. Остается невыясненным вопрос о механизме возникновения бифуркации. Практически не изучено обратное влияние колебаний в факеле на характеристики теплообмена с нагреваемой поверхностью. При этом отметим, что структура течения у наклонной нагретой поверхности при отсутствии автоколебательного режима течения является, в целом, подробно описанной [11 – 15].

Первой работой, в которой исследуется влияние угла наклона нагреваемой поверхности на теплообмен, по-видимому, является статья [11], где рассматривается течение, формирующееся у нагреваемой прямоугольной пластины, наклоненной относительно вертикального положения. Установлено, что наклон поверхности на углы до  $40^\circ$  практически не оказывает влияния на характеристики формирующегося свободноконвективного пограничного слоя. В результате сделан вывод о том, что характеристики теплообмена при наклоне можно определять с помощью простой замены модуля вектора  $\mathbf{g}$  на модуль его компоненты, параллельной поверхности, в хорошо известных зависимостях, полученных для вертикальных пластин.

В последующих работах было обнаружено, что характеристики течения слабо изменяются и при больших углах наклона [12]. Однако существует предельное значение угла, при котором наблюдается кардинальное изменение структуры потока: на некотором расстоянии от нижней кромки поток отрывается от поверхности, и формируется свободноконвективный факел. Указанное изменение структуры течения, в частности, не позволяет использовать полученные ранее зависимости для описания теплообмена при больших углах наклона поверхности относительно вертикального положения.

Одной из первых работ, в которой исследовалась структура течения над нагреваемой поверхностью, слегка наклоненной по отношению к горизонту, можно считать работу [14]. Температура поверхности варьировалась в широком диапазоне, но так как экспериментальное исследование проводилось в воде, максимальная температура не превышала 368 К. Линии тока визуализировались с использованием алюминиевой пудры, подсвеченной специальным источником. Установлено, что при углах наклона поверхности менее  $10^\circ$  относительно горизонтального положения, точка перехода пристенного слоя в восходящую струю остается на поверхности. При больших углах точка перехода совпадает с граничной точкой пластины. Наиболее актуальные результаты (из известных авторам), представленные в работе [15], также указывают на то, что в случае формирования стационарного свободноконвективного факела, наибольшее влияние на структуру потока оказывает наклон поверхности относительно горизонта на углы до  $10^\circ$ .

Основную роль в существенном влиянии именно малых углов наклона на характеристики факела, на наш взгляд, играет ослабление восходящего течения при формировании потока в пристенной области. При увеличении угла наклона область перехода от пристенного течения к восходящему смещается к краю поверхности, возвышающемуся над горизонтом, и при угле порядка десяти градусов над большей частью поверхности

формируется относительно устойчивое пристенное течение. Угол наклона постепенно перестает влиять на его характеристики. Дальнейшее увеличение этого угла в таком случае приводит к окончательному доминированию пристенного течения.

Цель настоящей работы — получить и проанализировать отдельные мгновенные образы динамических и тепловых полей автоколебательного режима течения свободноконвективного факела, формирующегося над слегка наклонной (в диапазоне углов от  $0^\circ$  до  $5^\circ$  по отношению к горизонту) поверхностью.

В связи с поставленной задачей в работе подробно рассматриваются фрагменты течения в пристенной области, анализируются поля распределения компонент скорости в рамках одного периода пuffsинга. Особое внимание уделено анализу картин распределения мгновенных (в рамках одного периода колебаний) и осредненных во времени значений коэффициента теплоотдачи  $\alpha$ .

### Постановка задачи

В рамках настоящей работы моделируется свободноконвективное течение, формирующееся над нагретым диском радиуса  $R = 95$  мм в неограниченном пространстве. Угол  $\gamma$ , который образует вектор ускорения свободного падения  $\mathbf{g}$  с поверхностью диска, варьируется от значения  $90^\circ$  (соответствует случаю горизонтальной поверхности) до значения  $85^\circ$ . Схема расчетной области и система отсчета угла  $\gamma$  представлены на рис. 1,а. Для проведения численного моделирования использовалась платформа ANSYS Fluent, позволяющая решать уравнения Навье — Стокса в приближении Буссинеска для сжимаемой среды. Высота расчетной области составляла  $H = 1,5$  м, диаметр области  $D = 1$  м.

На основании результатов предварительных экспериментальных исследований, частично представленных в работе [10], был сделан вывод о незначительном вкладе турбулентного перемешивания в процессы, протекающие у поверхности диска при умеренных температурах ее нагрева. По этой причине

моделировался ламинарный трехмерный поток при наличии сопряженного теплообмена между нагреваемым диском и окружающей средой. Теплофизические свойства воздуха в расчетной области оставались постоянными (их значения взяты при комнатной температуре  $T_a$ ), поскольку их изменения в рассматриваемом диапазоне температур не представляются существенными.

Для основных расчетов использовалась квазиструктурированная сетка, включающая  $1,1 \cdot 10^6$  элементов, со сгущением сеточных линий к предполагаемым границам факела и к нижней поверхности расчетной области. Фрагмент расчетной сетки представлен на рис. 1, *b*.

Граничные условия имели следующий вид (см. рис. 1, *a*). Температура нижней поверхности диска задана равной  $T_w = 383$  К и остается постоянной в ходе расчета, температура горизонтальной поверхности расчетной области также остается постоянной, равной температуре окружающего воздуха ( $T_a = 293$  К). Температура верхней поверхности диска определяется из условия сопряженного теплообмена с прилегающим к поверхности воздухом. На всех остальных границах (боковой и верхней) заданы условия нулевого избыточного давления. При этом на воздух, затекающий в расчетную область через эти границы, наложены ограничения: температура воздуха остается постоянной, равной

293 К, а вектор скорости всегда перпендикулярен соответствующей границе затекания.

В рамках настоящей работы анализируется периодический режим течения, установившийся во времени. В качестве критерия того, что такое установление достигнуто, используется информация об изменении во времени температуры в контрольных точках пристенной области, а также изменение во времени коэффициента теплоотдачи, среднего по поверхности диска (как это показано, например, в работе [10]).

Система координат, используемая при представлении результатов, дана на рис. 1, *a*. Для представления полей скорости используются безразмерные компоненты  $v_z^*$  и  $v_r^*$ . В качестве масштаба скорости используется отношение коэффициента кинематической вязкости  $\nu$  к радиусу диска  $R$ .

В качестве основного задаваемого параметра для описания свободноконвективных факелов традиционно используется число Грасгофа  $Gr$ , определяемое по характерному перепаду температуры – ее разностью между поверхностью и окружающим воздухом – и радиусу диска. Поскольку температура верхней поверхности диска определяется условиями сопряженного теплообмена и заранее неизвестна, то для построения числа Грасгофа используется температура нижней поверхности диска  $T_w$ , заданная в качестве граничных условий в рамках численного мо-

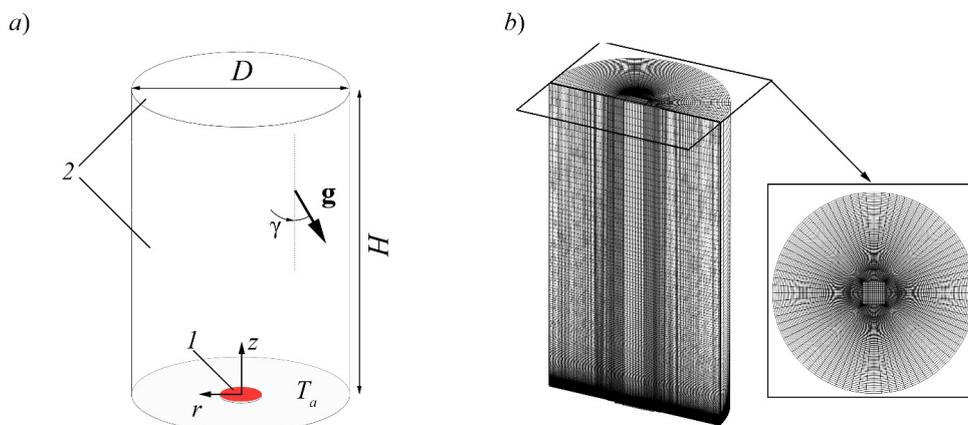


Рис. 1. Схема расчетной области (*a*) и фрагмент расчетной сетки (*b*): 1 – нагреваемый диск (условия сопряженного теплообмена); 2 – свободные границы

делирования. При построении числа Грасгофа учитывается наклон поверхности относительно вектора ускорения свободного падения  $\mathbf{g}$ :

$$Gr_\gamma = \frac{g \cdot \beta \cdot (T_w - T_a) \cdot R^3}{\nu^2} \cdot \cos \gamma, \quad (1)$$

где  $\beta$  – коэффициент теплового расширения воздуха, принимаемый равным  $3,6 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ .

Приводимые результаты соответствуют числу Грасгофа  $Gr = 8,65 \cdot 10^6$ , определенному по зависимости (1) в случае нулевого угла наклона поверхности.

### Анализ результатов

Довольно подробный анализ характеристик стационарных свободноконвективных потоков у наклонных поверхностей, а также представления о бифуркации решения, представленные в работе [10] для случая  $\gamma = 0^\circ$ , позволяют сформулировать предполагаемую схему рассматриваемого течения. Наличие наклона должно привести к ускорению воздуха в пристенной области [16] и смещению области перехода от пристенного течения к восходящему в сторону соответствующей границы поверхности. При этом ответ на вопрос, сохранится ли бифуркация решения, не очевиден. В то же время восходящий поток, смещенный относительно центра нагреваемой поверхности, может оказаться заметным препятствием для ускорившегося пристенного течения.

Для анализа влияния наклона поверхности на бифуркацию рассмотрим кратко особенности течения для случая, когда угол  $\gamma = 0^\circ$  (см. рис. 1).

На рис. 2 представлено изменение характеристик потока в плоскости  $Orz$  для  $\gamma = 0^\circ$  (случай горизонтальной поверхности) в рамках одного периода колебаний факела, а также распределение мгновенных значений коэффициента теплоотдачи по поверхности диска. Хорошо видно, что вблизи поверхности диска получены симметричные поля распределения осевой и радиальной компонент скорости. В работах [9, 10] также

показано, что течение в приповерхностной области является осесимметричным. Осевая симметрия нарушается ниже по течению (вверх от поверхности диска) в результате развития неустойчивости при подъеме нагретых вихревых структур в окружающем холодном пространстве.

Формирование симметричных вихревых структур приводит к возникновению зон повышения коэффициента теплоотдачи по поверхности диска, что хорошо видно на рис. 2,с. Возникновение области повышения коэффициента теплоотдачи связано с процессами увлечения холодного (температура  $T_a$ ) воздуха к нагретой поверхности на место оторвавшегося торообразного вихря. Подобный вывод подтверждают результаты исследований, представленные в работах [6, 8].

Обратим внимание, что в каждый из рассмотренных моментов времени на поверхности диска можно выделить область повышения коэффициента теплоотдачи до значений  $\alpha'_{\max}$  – максимального значения коэффициента на поверхности диска в данный момент времени. При этом максимальное значение коэффициента за полный период колебаний  $\alpha^T_{\max}$  более чем вдвое превосходит значения коэффициента  $\alpha'_{\max}$  в случае стационарного факела [17]. В рамках одного периода колебаний область повышения коэффициента теплоотдачи трансформируется: радиус этой области уменьшается, область сжимается к центру диска.

Следует также отметить, что при визуализации коэффициента теплоотдачи, на поверхности диска (в окрестности центра) проявляется необычная структура, не обладающая осевой симметрией (см. рис. 2,с). Данная структура возникает в области центрального призматического сеточного блока (см. рис. 1,б), однако причиной ее возникновения может быть общая топология сетки. Оценка влияния топологии сетки на получаемое решение выходит за рамки настоящей работы (не проводилась).

На рис. 3 представлено изменение характеристик потока в плоскости  $Orz$  для  $\gamma = 1^\circ$  в рамках одного периода колебаний. Видно,

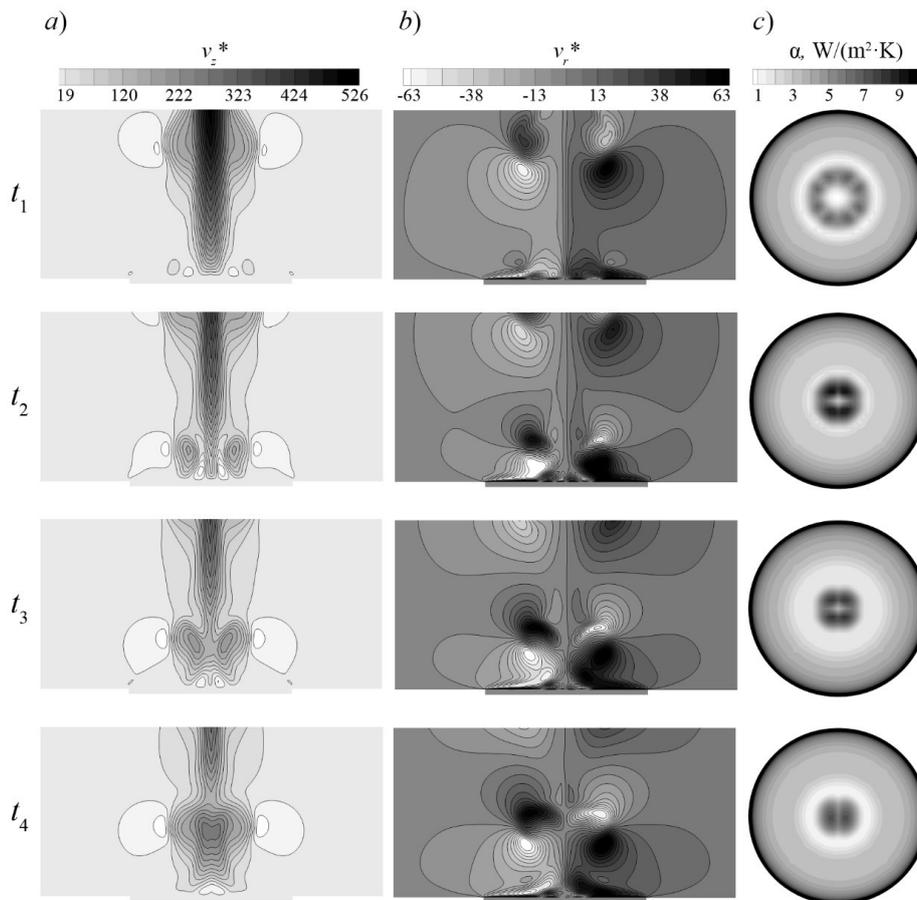


Рис. 2. Изменения осевой (a) и радиальной (b) компонент скорости, а также коэффициента теплообмена (c) в рамках одного периода колебаний при  $\gamma = 0^\circ$

что даже небольшой угол наклона поверхности приводит к заметному изменению структуры потока. Для наглядного представления вихревых структур, на полях компоненты  $v_z^*$  изображены изоповерхности  $Q$ -критерия. Эволюция этих изоповерхностей для случая  $\gamma = 0^\circ$  представлена в работе [10]. При этом подчеркнем, что изоповерхности визуализируют не точные формы и размеры вихря, а только часть потока, обладающую наибольшей интенсивностью вихревого движения. Если выделять области с различным уровнем интенсивности вихревого движения, то можно проводить общий анализ изменения характеристик свободноконвективного факела при наклоне поверхности.

Картины течения, представленные на рис. 3, позволяют заключить, что при наклоне горизонтальной поверхности формиру-

ется не осесимметричный вихрь, а две области повышенной интенсивности вихревого движения, разделенные восходящим потоком. При этом в начальный момент времени формируется вихревая структура, расположенная «под» восходящим потоком. Зажатый в этой области воздух нагрет сильнее, чем воздух в пристенном слое, формирующемся с другой стороны от восходящего факела. В результате наблюдается локальное повышение силы Архимеда, и, как следствие, увеличение осевой скорости  $v_z^*$ .

При дальнейшем развитии вихревого движения в пространстве над нагреваемой поверхностью формируется «вихревая дорожка», в которой чередуются вихревые структуры с различными наклонами. Заметим, что во все моменты времени в рамках одного периода, в области формирования факела

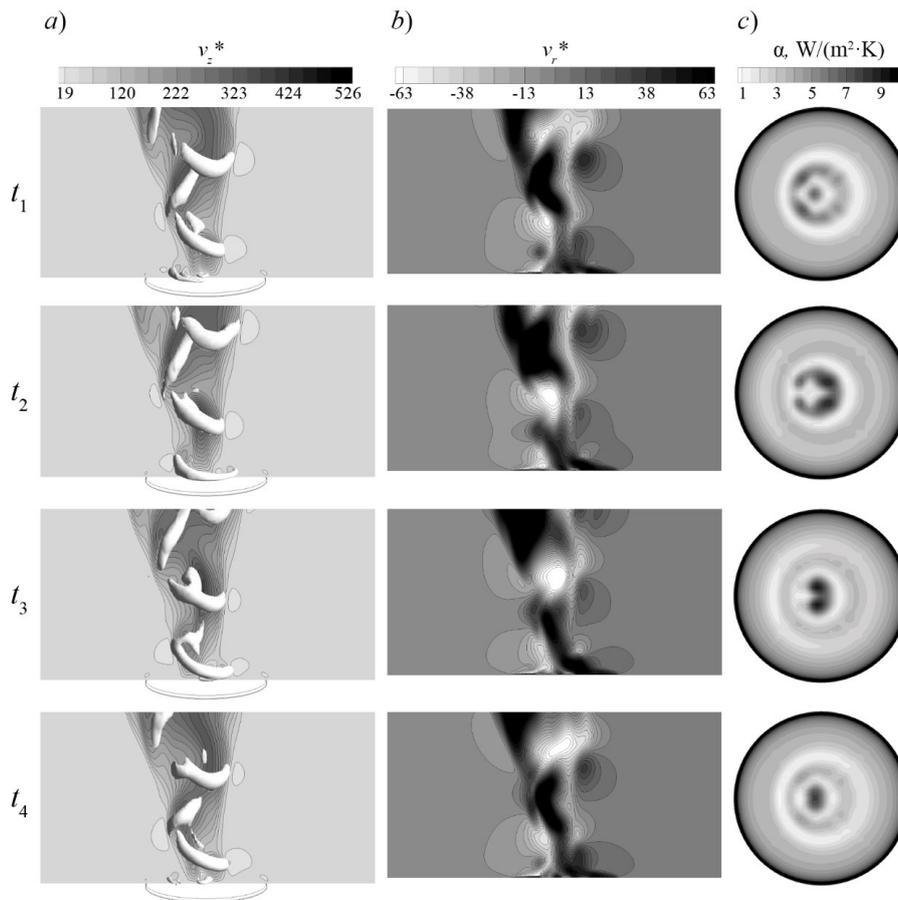


Рис. 3. Изменения осевой (a) и радиальной (b) компонент скорости, а также коэффициента теплообмена (c) при  $\gamma = 1^\circ$  в рамках одного периода колебаний

наблюдается наличие разнонаправленных скоростей  $v_r^*$ . При этом наклон поверхности, действительно, приводит к ускорению потока и к общему доминированию положительных радиальных скоростей (см. систему координат и отсчета углов на рис. 1) в пристенной области.

Обратимся к анализу особенностей распределения коэффициента теплоотдачи по поверхности диска при наклоне на один градус. Размеры и форма области увеличения коэффициента  $\alpha$  существенно изменяются в результате нарушения симметрии течения в пристенной области. Так, на рис. 3, c область максимального значения коэффициента теплоотдачи наблюдается сначала слева, а затем справа от центра диска.

На рис. 4 представлено изменение характеристик потока в плоскости  $Orz$  для значения угла  $\gamma = 3^\circ$  в рамках одного периода колебаний. По сравнению с предыдущим случаем ( $\gamma = 1^\circ$ ), задержка в формировании двух вихревых структур, разделенных восходящим потоком, становится заметнее. В факеле можно выделить вытянутую вихревую структуру, которая огибает восходящий поток и локализованный вихрь, который оказывается «зажатым» между наклонным факелом и поверхностью диска. Соответствующие вихревые структуры отмечены номерами 1 и 2 на рис. 4. Отметим, что точка перехода пристенного течения в восходящее при  $\gamma = 3^\circ$  довольно сильно смещается от центра диска.

Анализ полей распределения коэффициента

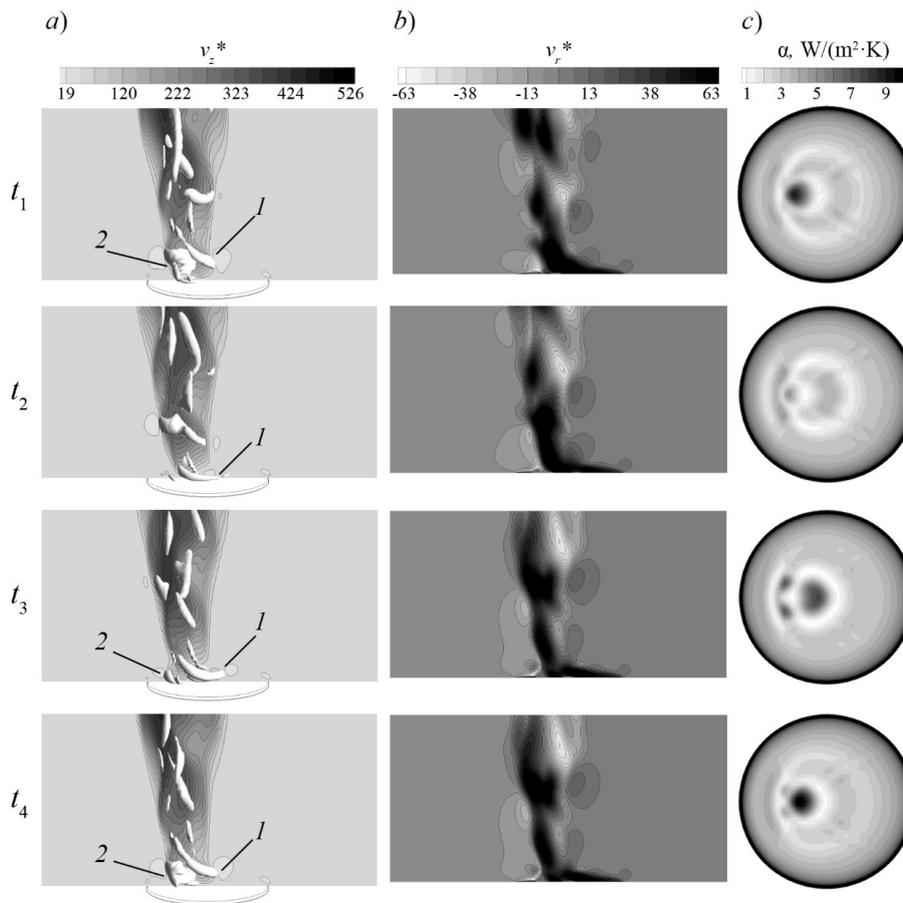


Рис. 4. Изменения осевой (а) и радиальной (b) компонент скорости, а также коэффициента теплообмена (с) в рамках одного периода колебаний при  $\gamma = 3^\circ$ . Показаны вихревые структуры, огибающая факел (1) и локализованная (2)

ента теплоотдачи позволяет утверждать, что увеличение наклона поверхности приводит к уменьшению размеров областей с повышенными значениями коэффициента  $\alpha$ . В рамках одного периода пуффинга можно выделить моменты времени, когда на поверхности диска отсутствует область явно выраженного повышения коэффициента  $\alpha$ , что не характерно для меньших углов наклона поверхности. Отметим также, что область значительного роста  $\alpha$  в данном случае имеет относительно небольшую протяженность.

Значение угла  $\gamma = 5^\circ$  между вектором ускорения свободного падения  $\mathbf{g}$  и поверхностью диска (рис. 5), интересно тем, что это, по-видимому, предельный случай наличия устойчивого периодического режима тече-

ния. Точка перехода от пристенного течения к восходящему смещается практически на границу диска. Подобный вывод сделан и в работе [14]. В пристенной области формируется сложное вихревое движение, которое с использованием  $Q$ -критерия можно представить в виде отдельных областей повышения интенсивности вихревого движения. В результате есть основание предположить, что над диском формируется большое количество мелких разобренных вихревых структур, которые слабо взаимодействуют друг с другом по мере подъема в окружающем пространстве.

Нарушение первоначальной (наблюдаемой при  $\gamma = 0^\circ$ ) торообразной вихревой структуры, и, следовательно, нарушение характера

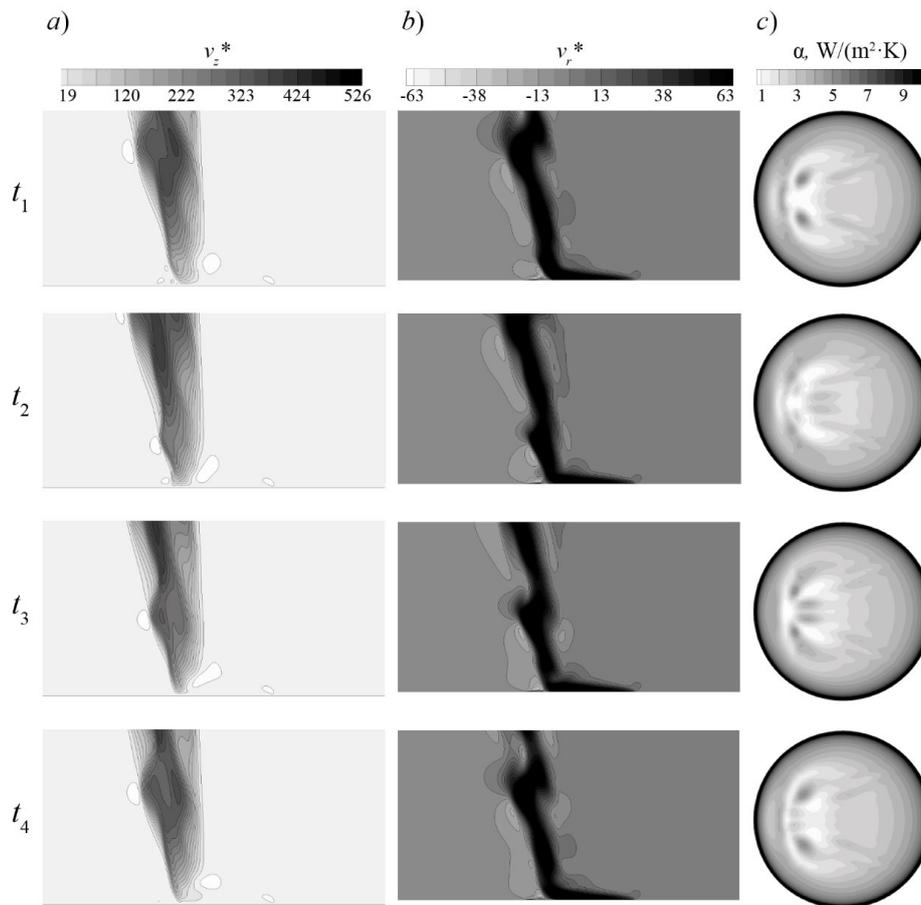


Рис. 5. Изменения осевой (a) и радиальной (b) компонент скорости, а также коэффициента теплообмена (c) при  $\gamma = 5^\circ$  в рамках одного периода колебаний

увлечения холодного воздуха к поверхности диска, приводит тому, что на поверхности диска невозможно выделить локализованную область повышения коэффициента  $\alpha$ . Действительно, области повышения значений коэффициента теплоотдачи оказываются распределенными по поверхности (см. рис. 5,c). При этом не наблюдается резкого повышения значений  $\alpha$ , характерного для меньших углов.

Обычно для практических приложений интерес представляют не столько мгновенные распределения локального коэффициента теплоотдачи, сколько распределение среднего во времени коэффициента  $\alpha$  по

поверхности диска, а также значение интегрального по поверхности диска и осредненного по времени коэффициента  $\langle \bar{\alpha} \rangle$ . В данном случае скобки обозначают осреднение по поверхности диска. Влияние угла наклона горизонтальной поверхности на значение  $\langle \bar{\alpha} \rangle$  представлено на рис. 6. Кроме того, для каждого значения  $\langle \bar{\alpha} \rangle$  показано распределение  $\alpha$  по поверхности диска.

Можно заметить, что зависимость коэффициента  $\langle \bar{\alpha} \rangle$  от угла наклона  $\gamma$  не является монотонной, имеется ярко выраженный максимум в окрестности угла наклона  $\gamma \approx 1^\circ$ , т.е. при таком значении наблюдается увеличение интенсивности теплообмена.

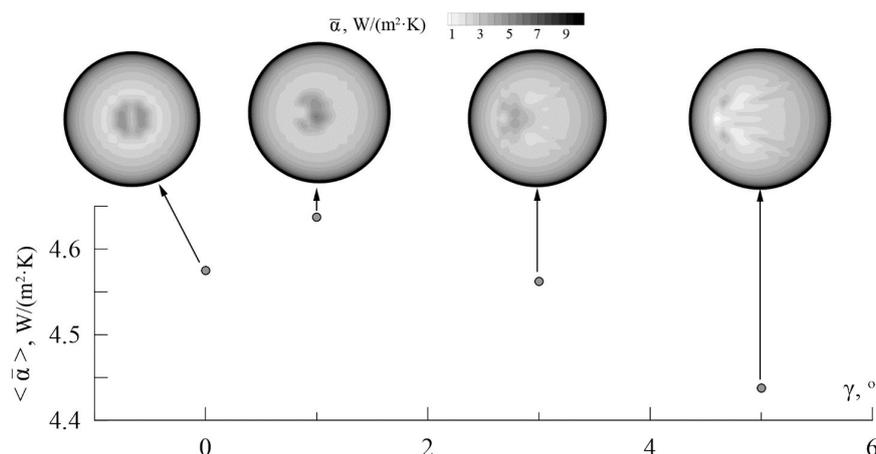


Рис. 6. Влияние угла наклона поверхности  $\gamma$  на значения осредненных коэффициентов теплоотдачи  $\langle \bar{\alpha} \rangle$ ; для каждого значения  $\langle \bar{\alpha} \rangle$  (символы) показано распределение  $\bar{\alpha}$  по поверхности диска

### Заключение

В работе впервые исследовано влияние угла наклона на характеристики пuffedingа в свободноконвективном факеле. При этом установлено, как именно изменение свойств формирующихся вихревых структур влияет на характеристики теплообмена.

По мнению авторов, интерес к анализу нестационарного режима свободноконвективного факела над наклонной поверхностью определяется тем обстоятельством, что подобные исследования позволяют дополнить информацию о модели течения, установить степень влияния ориентации пластины относительно вектора ускорения свободного падения  $\mathbf{g}$  на характеристики нестационар-

ного процесса, главная особенность которого заключается в возникновении пuffedingа.

Проведенное исследование показало, что малый (до пяти градусов) наклон нагреваемой поверхности заметно влияет на процесс пuffedingа, который, в конечном итоге, влияет на теплообмен воздуха с нагретой поверхностью. Есть основания предполагать, что дальнейшее изучение влияния ориентации нагреваемой поверхности относительно вектора  $\mathbf{g}$  на указанный процесс позволит разработать эффективные способы «управления» пuffedingом и тем самым воздействовать на значения локального коэффициента теплообмена над необходимой областью нагреваемой поверхности.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cheesewright R.** Turbulent natural convection from a vertical plane surface // *J. Heat Transfer*. 1968. Vol. 90. No. 1. Pp. 1–6.
2. **Tsuji T., Nagano Y.** Characteristics of a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate // *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 1988. Vol. 31. No. 8. Pp. 1723–1734.
3. **Batchelor G.K.** Heat convection and buoyancy effects in fluids // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. 1954. Vol. 80. No. 345. Pp. 339–358.
4. **Lewandowski W.M., Kubsky P., Khubez J.M.** Natural convection heat transfer from round horizontal plate // *Heat and Mass Transfer (Warme- und Stoffübertragung)*. 1992. Vol. 27. No. 5. Pp. 281–287.
5. **Morton B.R., Taylor G., Turner J.S.** Turbulent gravitational convection from maintained and instantaneous sources // *Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences (London)*. 1956. Vol. 234. No. 1196. Pp. 1–23.

6. **Jaluria Y.** Natural convection: heat and mass transfer. Oxford: Pergamon Press, 1980. 326 p.
7. **Plourde F., Pham M.V., Doan K.S., Balachandar S.** Direct numerical simulations of a rapidly expanding thermal plume: structure and entrainment interaction // *J. of Fluid Mechanics*. 2008. Vol. 604. 10 June. Pp. 99–123.
8. **Lopez J. M., Marques F.** Instability of plumes driven by localized heating // *J. Fluid Mech.* 2013. Vol. 736. 10 December. Pp. 616–640.
9. **Hattori T., Bartos N., Norris S.E., Kirkpatrick M.P., Armfield, S.W.** Experimental and numerical investigation of unsteady behavior in the near-field of pure thermal planar plumes // *Exp. Thermal Fluid Science*. 2013. Vol. 46. April. Pp. 139–150.
10. **Khrapunov E., Chumakov Y.** Structure of the natural convective flow above to the horizontal surface with localized heating // *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 2020. Vol. 152. May. P. 119492 (12 p.).
11. **Rich B.R.** An investigation of heat transfer from an inclined flat plate in free convection // *Transactions – ASME: Journal of Heat Transfer*. 1953. Vol. 75. May. Pp. 489–499.
12. **Kierkus W.T.** An analysis of laminar free convection flow and heat transfer about an inclined isothermal plate // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 1968. Vol. 11. No. 2. Pp. 241–253.
13. **Vliet G.C.** Natural convection local heat transfer on constant-heat-flux inclined surfaces // *J. Heat Transfer*. 1969. Vol. 91. No. 4. Pp. 511–516.
14. **Fujii T., Imura H.** Natural-convection heat transfer from a plate with arbitrary inclination // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 1972. Vol. 15. No. 4. Pp. 755–767.
15. **Kimura F.** Fluid flow and heat transfer of natural convection at a slightly inclined, upward-facing, heated plate // *Heat Transfer – Asian Research*. 2002. Vol. 31. No. 5. Pp. 362–375.
16. **Shaukatullah H., Gebhart B.** An experimental investigation of natural convection flow on an inclined surface // *Int. J. Heat Mass Transfer*. 1978. Vol. 21. No. 12. Pp. 1481–1490.
17. **Khrapunov E.F., Potechin I.V., Chumakov Y.S.** Structure of a free convective flow over a horizontal heated surface under conditions of conjugate heat transfer // *J. Physics: Conf. Series*. 2017. Vol. 891. P. 012081.

*Статья поступила в редакцию 08.08.2020, принята к публикации 05.10.2020.*

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ХРАПУНОВ Евгений Фёдорович** – аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ЧУМАКОВ Юрий Сергеевич** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
chumakov@yahoo.com

### REFERENCES

1. **Cheesewright R.**, Turbulent natural convection from a vertical plane surface, *J. Heat Transfer*. 90 (1) (1968) 1–6.
2. **Tsuji T., Nagano Y.**, Characteristics of a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate, *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 31 (8) (1988) 1723–1734.
3. **Batchelor G.K.**, Heat convection and buoy-

ancy effects in fluids, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. 80 (345) (1954) 339–358.

4. **Lewandowski W.M., Kubsky P., Khubeiz J.M.**, Natural convection heat transfer from round horizontal plate, Heat and Mass Transfer (Wärme- und Stoffübertragung). 27 (5) (1992) 281–287.

5. **Morton B.R., Taylor G., Turner J.S.**, Turbulent gravitational convection from maintained and instantaneous sources, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences (London). 234 (1196) (1956) 1–23.

6. **Jaluria Y.**, Natural convection: Heat and mass transfer, Pergamon Press, Oxford, 1980.

7. **Plourde F., Pham M.V., Doan K.S., Balachandar S.**, Direct numerical simulations of a rapidly expanding thermal plume: structure and entrainment interaction, J. of Fluid Mechanics. 604 (10 June) (2008) 99–123.

8. **Lopez J.M., Marques F.**, Instability of plumes driven by localized heating, J. of Fluid Mech. 736 (10 December) (2013) 616–640.

9. **Hattori T., Bartos N., Norris S.E., et al.**, Experimental and numerical investigation of unsteady behavior in the near-field of pure thermal planar plumes, Exp. Thermal Fluid Science. 46 (April) (2013) 139–150.

10. **Khrapunov E., Chumakov Y.**, Structure of the natural convective flow above to the horizon-

tal surface with localized heating, Int. J. Heat and Mass Transfer. 152 (May) (2020) 119492 (12 p.)

11. **Rich B.R.**, An investigation of heat transfer from an inclined flat plate in free convection // Transactions – ASME: Journal of Heat Transfer. 75 (May) (1953) 489–499.

12. **Kierkus W.T.**, An analysis of laminar free convection flow and heat transfer about an inclined isothermal plate, Int. J. Heat Mass Transfer. 11 (2) (1968) 241–253.

13. **Vliet G.C.**, Natural convection local heat transfer on constant-heat-flux inclined surfaces, J. Heat Transfer. 91 (4) (1969) 511–516.

14. **Fujii T., Imura H.**, Natural-convection heat transfer from a plate with arbitrary inclination, Int. J. Heat Mass Transfer. 15 (4) (1972) 755–767.

15. **Kimura F.**, Fluid flow and heat transfer of natural convection at a slightly inclined, upward-facing, heated plate, Heat Transfer – Asian Research. 31 (5) (2002) 362–375.

16. **Shaukatullah H., Gebhart B.**, An experimental investigation of natural convection flow on an inclined surface, Int. J. Heat Mass Transfer. 21 (12) (1978) 1481–1490.

17. **Khrapunov E.F., Potechin I.V., Chumakov Y.S.**, Structure of a free convective flow over a horizontal heated surface under conditions of conjugate heat transfer, J. Physics: Conf. Series. 891 (2017) 012081.

*Received 08.08.2020, accepted 05.10.2020.*

## THE AUTHORS

**KHRAPUNOV Evgenii F.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

hrapunov.evgenii@yandex.ru

**KAASIK Vladimir P.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

chymakov@yahoo.com

DOI: 10.18721/JPM.13407  
 УДК 532.5+612.13

## ВЛИЯНИЕ УПРУГОСТИ СТенок НА СТРУКТУРУ ТЕЧЕНИЯ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ БИФУРКАЦИИ БРЮШНОЙ АОРТЫ С ПОДВЗДОШНЫМИ АРТЕРИЯМИ

**А.А. Котмакова<sup>1</sup>, Я.А. Гатаулин<sup>2</sup>, А.Д. Юхнев<sup>2</sup>, Д.К. Зайцев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Научно-исследовательский институт оптико-электронного приборостроения,  
 г. Сосновый Бор Ленинградской области, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
 Санкт-Петербург, Российская Федерация

Впервые проведено численное исследование влияния упругости стенок сосудов на течение крови в модели бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями среднестатистической геометрии. Показано, что наибольшее влияние упругости наблюдается в брюшной аорте перед бифуркацией, где исходное овальное сечение сосуда принимает форму круга. При учете упругости стенок структура течения остается неизменной, а максимальный расход в брюшной аорте увеличивается на 40 %. В области бифуркации брюшной аорты осредненные по циклу сдвиговые напряжения уменьшаются на 20 %, а индекс колебаний сдвиговых напряжений увеличивается на 60 %.

**Ключевые слова:** бифуркация брюшной аорты, численное моделирование, упругость стенок, структура кровотока

**Ссылка при цитировании:** Котмакова А.А., Гатаулин Я.А., Юхнев А.Д., Зайцев Д.К. Влияние упругости стенок на структуру течения в трехмерной модели бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 89–101. DOI: 10.18721/JPM.13407

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## THE ABDOMINAL AORTA BIFURCATION WITH ILIAC ARTERIES: THE WALL ELASTICITY EFFECT ON THE FLOW STRUCTURE

**A.A. Kotmakova<sup>1</sup>, Ya.A. Gataulin<sup>2</sup>, A.D. Yukhnev<sup>2</sup>, D.K. Zaitsev<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Scientific Research Institute for Optoelectronic Instrument Engineering,  
 Sosnovy Bor, Leningrad region, Russian Federation;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
 St. Petersburg, Russian Federation

For the first time, a numerical study of the effect of vascular elasticity on blood flow has been carried out using a model of the abdominal aorta bifurcation with iliac arteries of the average statistical geometry. The greatest effect of elasticity was shown to be observed in the abdominal aorta before bifurcation where an initial oval cross-section shaping into a circle. Taking into account the elasticity of the walls, the flow structure remained unchanged, but the maximum flow rate increased by 40 % in the abdominal aorta. In the abdominal-aortic bifurcation region the cycle-averaged shear stresses decreased by 20 %, and their oscillation index increased by 60 %.

**Keywords:** abdominal aorta's bifurcation, numerical simulation, wall elasticity, blood flow structure

**Citation:** Kotmakova A.A., Gataulin Ya.A., Yukhnev A.D., Zaitsev D.K., The abdominal aorta bifurcation with iliac arteries: the wall elasticity effect on the flow structure, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 89–101. DOI: 10.18721/JPM.13407

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Болезни системы кровообращения занимают ведущее место среди причин смерти в большинстве стран мира. Численное моделирование кровотока в трехмерных моделях артерий обеспечивает получение новых данных по структуре течения, которые помогают прогнозировать развитие болезней сосудов, обусловленных гемодинамическими причинами.

Брюшная аорта — это артерия, которая снабжает кровью брюшную полость и нижние конечности. В настоящее время исследования течения в бифуркации брюшной аорты проводятся как экспериментально [1 – 3], так и методами численного моделирования [4 – 9]. Ряд работ посвящен исследованию течений в бифуркации брюшной аорты с последующими бифуркациями подвздошных артерий [6, 8, 9].

Статья [6] посвящена численному моделированию кровотока в трех различных моделях бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями; модели построены на основе анатомических данных магнитно-резонансной ангиографии. В работе [7] скорости кровотока получены из данных магнитно-резонансной томографии, проанализированы распределения сдвиговых напряжений в состоянии покоя для всех трех моделей. В статье [8] представлены данные по давлению и скорости кровотока с использованием моделей как жестких, так и деформируемых стенок брюшной аорты.

Следует отметить, что численные исследования кровотока в брюшной аорте проводятся в основном для моделей с жесткими стенками [10, 11]. Приближение жестких стенок применяется, в значительной степени, из-за сложности решения вычислительной проблемы взаимосвязи между кровотоком и деформацией сосуда. Использование такого приближения оправдывается тем, что деформации стенки существенно не изменя-

ют поля скорости при нормальных условиях. Его применяют для артерий, у которых малы пульсации стенки, однако оно может оказаться недопустимым для артерий с большими деформациями (например, в грудной и брюшной аортах). В клинических исследованиях [12, 13] получены перемещения стенки брюшной аорты, достигающие 4 – 10%.

Анализ литературы показал, что большинство вычислительных работ в трехмерных моделях брюшной аорты с подвздошными артериями используют персонифицированные модели [8, 9], построенные по клиническим данным. В работе [9], где использована модель бифуркации брюшной аорты, показаны картина течения и поле осредненных сдвиговых напряжений. Но при этом авторы не изучали зависимости характеристик течения от упругости стенок.

Параметрические расчеты течений в моделях кровеносных сосудов среднестатистической геометрии помогают ответить на вопрос, стоит ли учитывать в персонифицированных моделях деформацию стенок или изменения структуры течения при деформации стенок незначительны, и без существенной потери точности можно их не учитывать.

Данная работа исследует влияние упругости стенок на структуру течения в модели бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями среднестатистической трехмерной геометрии. Проанализировано влияние указанной упругости на структуру поперечного течения, а также на величину и индекс колебаний сдвиговых напряжений.

## Геометрическая модель бифуркации брюшной аорты

В настоящей работе использована модель бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями (рис. 1,а) из работы [14], где подробно описано ее построение по осредненным клиническим данным. Модель включает брюшную аорту, правую и левую

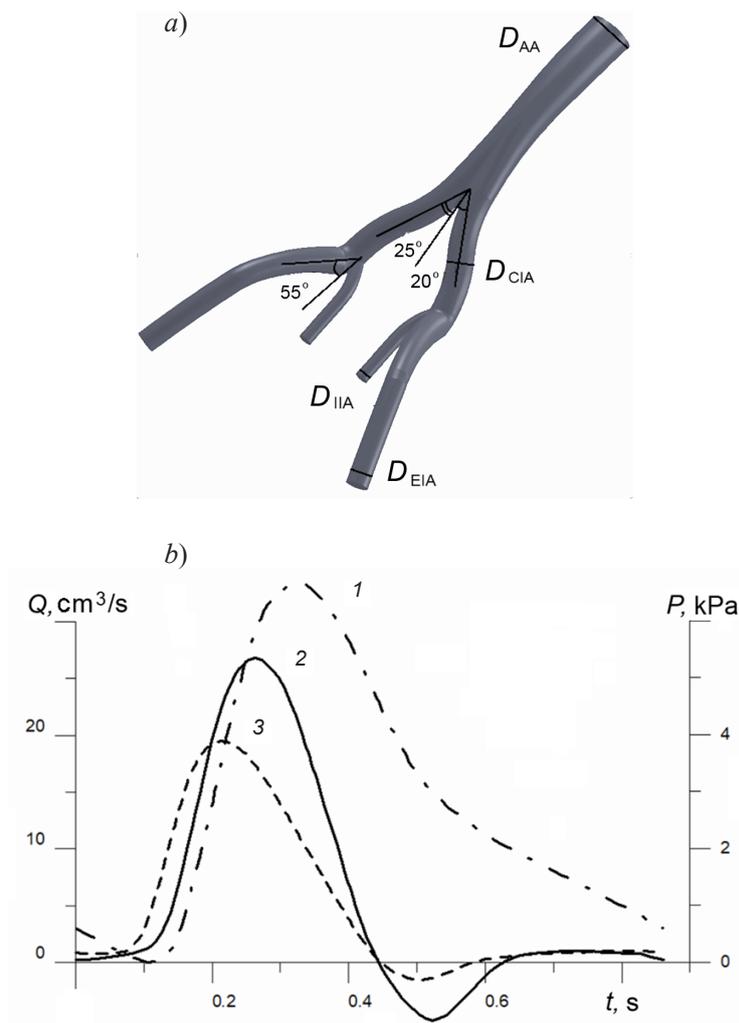


Рис. 1. Трехмерная модель бифуркации сосудов [14] (a) и графическое представление граничных условий для поставленных механической (1) и гидродинамической (2, 3) задач (b). Представлена динамика пульсирующей составляющей давления  $P$  на внутренней стенке брюшной аорты (AA) (1) и расходов  $Q$  на выходе наружных (EIA) (2) и внутренних (IIA) (3) подвздошных артерий;  $D_{CIA}$  – диаметр общей подвздошной артерии

Таблица

**Геометрические характеристики модели бифуркации брюшной аорты**

Отдел бифуркации брюшной аорты	Входной диаметр $D_{in}$ , мм	Выходной диаметр $D_{out}$ , мм	Длина сосуда $L$ , мм
Брюшная аорта (AA)	18,0	15,5	85
Левая и правая подвздошные артерии:			
общие (CIAs)	10,8	10,8	46
наружные (EIAs)	10,8	9,0	62
внутренние (IIAs)	5,5	5,5	38

общие подвздошные артерии, правую и левую внутреннюю и наружную подвздошные артерии.

Геометрические характеристики модели представлены в таблице. Отклонения от оси выходного участка брюшной аорты для общих подвздошных артерий составляют  $25^\circ$  и  $20^\circ$  для левой и правой, соответственно. Угол между внутренней подвздошной артерией и плоскостью наружных подвздошных артерий составляет  $55^\circ$ .

### Математическая модель

Расчет движения жидкости и стенки проводился с помощью технологии Fluid-Structure Interaction (FSI), которая реализована в виде одностороннего (one-way FSI) обмена данных. Для моделирования течения в бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями решались трехмерные нестационарные уравнения Навье – Стокса для несжимаемой вязкой жидкости на перестраиваемой сетке. Расчеты проводились в программе ANSYS CFX со вторым порядком точности по пространству и по времени. Решение уравнения движения твердой стенки выполнялось в программе ANSYS Transient Structural, основанной на методе конечных элементов. Передача данных между солверами выполнялась в модуле ANSYS System Coupling, который передает давление и перемещения между ANSYS CFX и ANSYS Transient Structural. На каждом шаге по времени решается механическая задача с приложенным на внутренней стенке избыточным давлением  $P$  (рис. 1, *b*), которое представляет собой разность между текущим давлением и минимальным (диастолическим). Затем данные о перемещении стенки автоматически передаются в гидродинамическую задачу, где происходит расчет течения жидкости в деформированной модели, далее считается следующий шаг по времени.

Граничные условия получены путем осреднения клинических данных, зарегистрированных у пятнадцати пациентов с помощью магнитно-резонансной томографии [15 – 20]. На входе брюшной аорты задается постоян-

ный уровень давления, а на выходах – четыре пульсирующих расхода, одинаковые для левых и правых ветвей (см. рис. 1, *b*). Период пульсаций составляет 0,86 с, что соответствует нормальной частоте сердечных сокращений в покое (70 уд/мин). Жидкость считается несжимаемой ньютоновской, имеющей свойства, аналогичные таковым для человеческой крови: плотность –  $1000 \text{ кг/м}^3$ , динамическая вязкость –  $0,004 \text{ Па}\cdot\text{с}$ .

Число Рейнольдса  $Re$  на входе в брюшную аорту, в момент максимального расхода, равно 1600, число Уомерсли  $Wo$  равно 24,3. Указанные числа выражаются как

$$Re = \frac{Ud}{\nu}, \quad Wo = d\sqrt{\frac{2\pi}{\nu T}},$$

где  $U$ , м/с, – скорость жидкости;  $d$ , м, – диаметр аорты;  $\nu$ ,  $\text{м}^2/\text{с}$ , – кинематическая вязкость крови;  $T$ , с, – период пульсаций.

### Механические характеристики брюшной аорты

При расчете перемещений стенки цилиндрической трубки использовалась модель изотропной упругой стенки. При этом толщина стенки была принята равной 1 мм [21], ее плотность –  $1000 \text{ кг/м}^3$ , коэффициент Пуассона  $\mu = 0,4$  [22]. Считалось, что стенки на входе и выходах жестко закреплены.

Базовое значение модуля Юнга стенки принято как  $E = 1 \text{ МПа}$ , оно выбрано так, чтобы при максимальном приложенном давлении  $P$  (см. рис. 1, *b*) деформация стенки посередине брюшной аорты составляла около 5 %, что соответствует физиологическому уровню пульсаций стенки [20]. Чтобы оценить величину модуля Юнга, нами использовалась следующая аналитическая формула [20]:

$$E = P \frac{R_0}{h_0} \left(1 - \frac{\mu}{2}\right) \left(\frac{R_0}{R} - \frac{R_0^2}{R^2}\right)^{-1}, \quad (1)$$

где  $R$ ,  $R_0$  – радиусы срединной поверхности трубки при максимальном (систолическом)

и минимальном (диастолическом) давлениях, соответственно;  $h_0$  — толщина стенки трубки.

Помимо базового значения модуля Юнга  $E = 1$  МПа, в работе проведены расчеты для значений  $E = 2, 4, 8$  МПа и решена задача с жесткой стенкой ( $E \rightarrow \infty$ ).

### Вычислительные аспекты

Гидродинамическая сетка (рис. 2) состоит из тетраэдров и имеет слой призматических ячеек со сгущением к стенке. Расчетная сетка для стенки сосуда также состоит из тетраэдров. Для обеих сеток было проведено исследование на сеточную и временную сходимость, по результатам которого для гидродинамических расчетов использовалась сетка из 0,8 млн. элементов; сетка для стенки сосуда — из 50 тыс. элементов. Шаг по времени составил 0,01 с. Для всех вариантов было рассчитано три периода, чтобы исключить влияние начальных условий.

### Результаты расчетов и их обсуждение

**Перемещения стенки.** На рис. 3 показаны рассчитанные перемещения стенки при  $E = 1$  МПа в момент максимума давления  $P$  (см. рис. 1, *b*). Видно, что максимальные перемещения наблюдаются непосредственно перед бифуркацией брюшной аорты, где исходное овальное поперечное сечение сосуда стремится принять круглую форму.

По середине брюшной аорты максимальные перемещения составляют 5 %, что соот-

ветствует предварительной оценке по формуле (1) и обосновывает выбор базового значения модуля Юнга ( $E = 1$  МПа).

**Расход.** На рис. 4, *a* показано изменение во времени рассчитанного расхода на входе в брюшную аорту для модели с жесткими ( $E \rightarrow \infty$ ) и упругими ( $E = 1$  МПа) стенками. Упругость стенок увеличивает амплитуду как положительной, так и отрицательной волн расхода. При увеличении давления стенки сосуда растягиваются, растет поперечное сечение, и поэтому расход в упругой модели превышает значение расхода для модели с жесткими стенками. При уменьшении давления стенки сжимаются, уменьшается площадь поперечного сечения, жидкость выталкивается из сосуда — отрицательный расход увеличивается, по сравнению с расходом для сосуда с жесткими стенками. Кроме того, для деформируемого сосуда длительность фазы положительного расхода уменьшилась на 0,1 с (соответственно длительность фазы отрицательного расхода увеличилась на 0,1 с). Влияние модуля Юнга на изменение амплитуды положительной ( $Q_+$ ) и отрицательной ( $Q_-$ ) волн расхода, по сравнению с результатами применения модели с жесткими стенками, показано на рис. 4, *b*. Для упругой модели со значением  $E = 1$  МПа увеличение амплитуд составило 40 и 95 %, соответственно.

**Продольная скорость.** На рис. 5 представлены поля продольной скорости  $V_n$  (в проекции на направление основного потока) в трех сечениях для фаз роста, максимума и

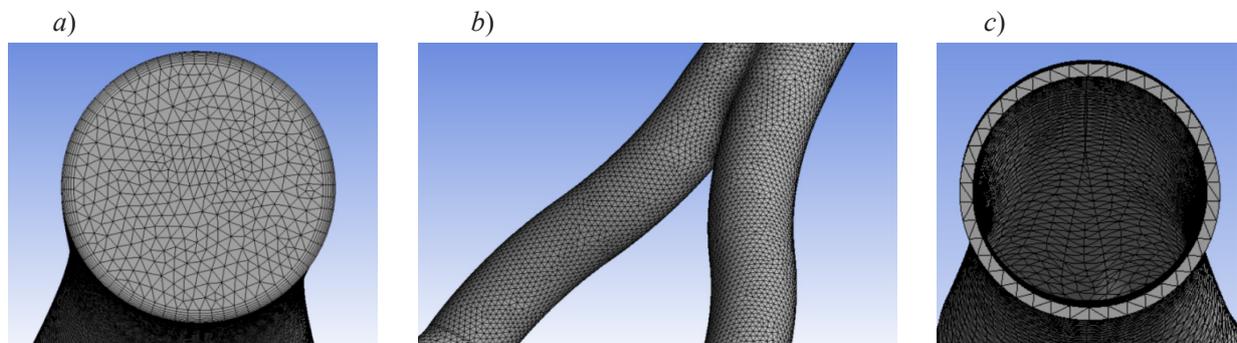


Рис. 2. Расчетные сетки, использованные для жидкости (*a*) и для стенки (*b, c*)

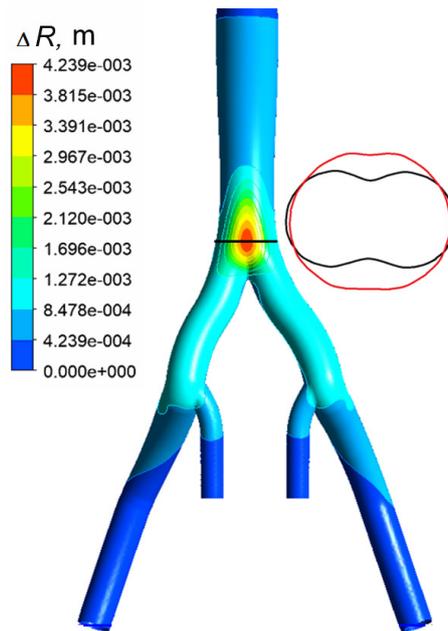


Рис. 3. Поле расчетных перемещений стенки упругой модели в момент максимального давления (вид со стороны задней стенки), а также границы поперечного сечения сосуда в моменты максимума (красная линия) и минимума (черная линия) давления. Базовое значение модуля Юнга  $E = 1$  МПа

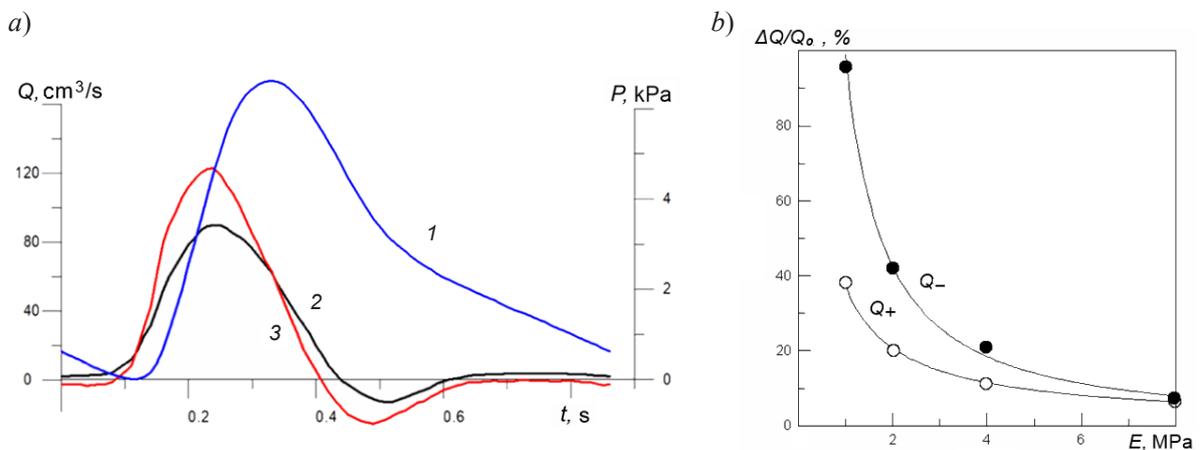


Рис. 4. Динамика пульсаций давления (1) на внутреннюю стенку модели сосуда (механическая задача) и расхода на входе в брюшную аорту, рассчитанного для жестких (2) и упругих (3) стенок при  $E \rightarrow \infty$  и 1 МПа соответственно (гидродинамическая задача) (a), а также зависимости от модуля Юнга относительного увеличения амплитуд положительной ( $Q_+$ ) и отрицательной ( $Q_-$ ) волн расхода (b)

снижения давления для моделей с жесткими и упругими ( $E = 1$  МПа) стенками. Видно, что профиль продольной скорости во всех случаях имеет неравномерную форму. В брюшной аорте (желтое сечение) на перед-

ней стенке скорость выше, так как эта стенка является внешней для искривленной брюшной аорты. На втором этапе фазы снижения давления наблюдается обратное течение. В сечении перед бифуркацией, картина поля

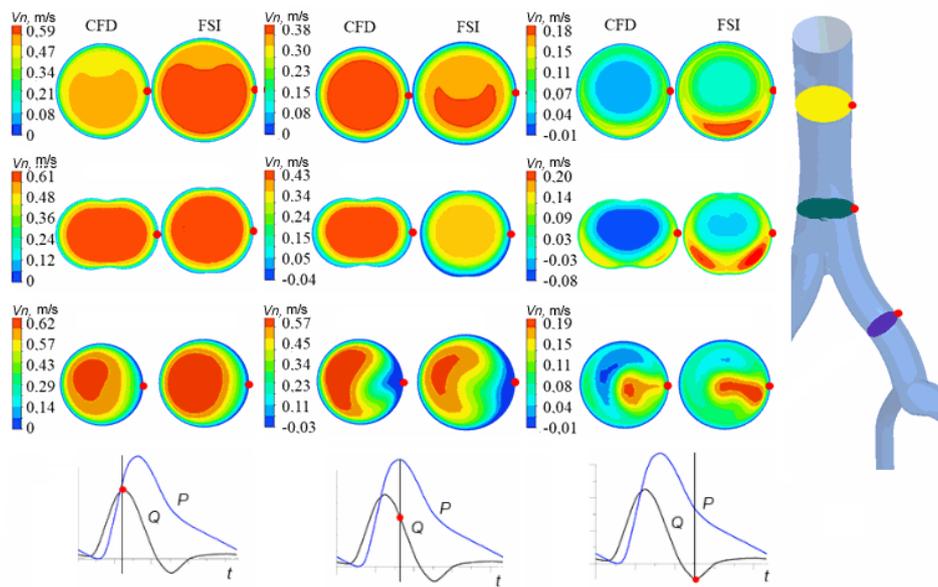


Рис. 5. Картины полей продольной скорости в трех сечениях, рассчитанные по жесткой (CFD,  $E \rightarrow \infty$ ) и упругой (FSI,  $E = 1$  МПа) моделям брюшной аорты; размеры поперечных сечений условно изображены одинаковыми, в нижней части рисунка отмечено поведение давления и расхода для трех фаз цикла

продольной скорости аналогична таковой в середине брюшной аорты, но значения скорости выросли. Для продольной скорости в общей подвздошной артерии в фазу положительного расхода, максимум скорости смещен к внутренней стенке артерии, а в фазу отрицательного, наоборот, — к внешней стенке. В момент максимального давления, на внешней стенке общей подвздошной артерии происходит отрыв потока.

В фазу роста давления (в момент максимума расхода), максимальная по сечению продольная скорость  $V_n$  в модели с упругими стенками выше, чем в модели с жесткими стенками, примерно на 15 % в брюшной аорте, и на 2 % в общей подвздошной артерии. В фазу снижения давления, продольная скорость обратного течения в модели с упругими стенками выше для упругой модели: в брюшной аорте на 25 %, а в общей подвздошной артерии на 15 %.

**Поперечная скорость.** На рис. 6 показаны линии тока в трех поперечных сечениях для моделей с жесткими ( $E \rightarrow \infty$ ) и упругими ( $E = 1$  МПа) стенками. В рассмотренных се-

чениях бифуркаций брюшной аорты и подвздошных артерий, вследствие кривизны сосудов, возникают вихри Дина. При этом и в жесткой, и в упругой моделях наблюдается одинаковая вихревая структура течения, которая различается только значениями скорости поперечного течения ввиду растяжения стенок сосуда. Максимальные значения поперечной скорости для упругой модели превышают значения для жесткой примерно на 10 %.

**Сдвиговые напряжения на стенке.** Известно, что области с низкими сдвиговыми напряжениями и высоким индексом их пульсаций на стенке сосуда связаны с формированием и развитием атеросклероза. Пониженные (опасные с точки зрения развития атеросклероза) сдвиговые напряжения на стенке наблюдаются в областях, где происходит отрыв потока. Там же наблюдаются высокие значения индекса колебаний сдвиговых напряжений. Для оценки влияния упругости стенок на сдвиговые напряжения были рассчитаны величины TAWSS (Time-Averaged Wall Shear Stress) — осредненные сдвиго-

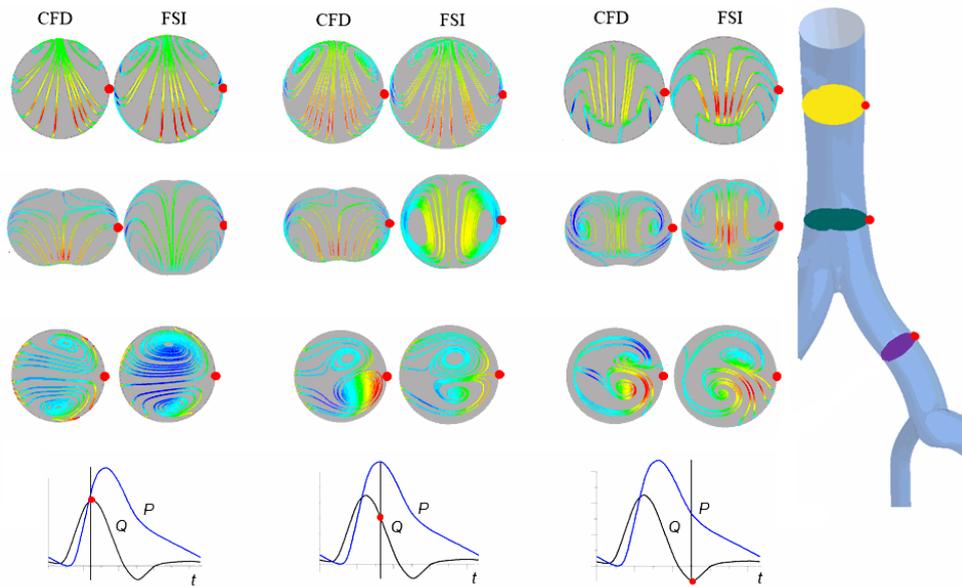


Рис. 6. Линии тока в трех поперечных сечениях в разных фазах цикла, рассчитанные по жесткой (CFD,  $E \rightarrow \infty$ ) и упругой (FSI,  $E = 1$  МПа) моделям бифуркации брюшной аорты; размеры поперечных сечений артерий условно изображены одинаковыми, в нижней части рисунка отмечены значения давления и расхода для трех фаз цикла

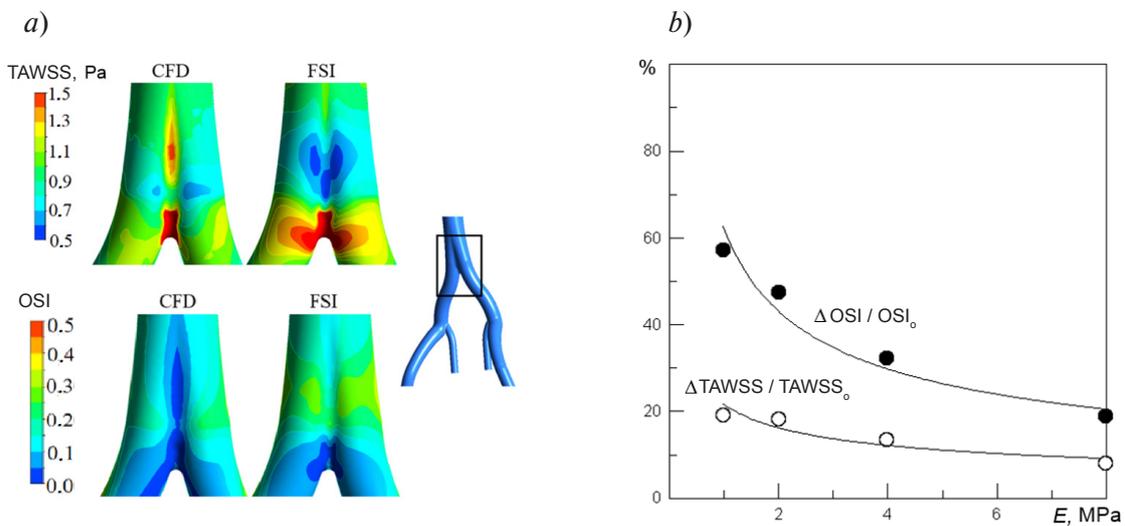


Рис. 7. Результаты расчета по двум моделям (CFD и FSI) распределений сдвиговых напряжений по стенке брюшной аорты, осредненных по времени, (TAWSS (I)) и индекса колебаний сдвиговых напряжений (OSI (II)) в бифуркации брюшной аорты (a), а также зависимости относительных отличий указанных характеристик I и II от значений модуля Юнга (b).  
Использованы жесткая (CFD,  $E \rightarrow \infty$ ) и упругая (FSI,  $E = 1$  МПа) модели, индексом «0» отмечены характеристики жесткой модели

вые напряжения на стенке и OSI (Oscillatory Shear Index) – индекс колебаний сдвиговых напряжений для жесткой и упругой моделей:

$$OSI = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\left| \int_0^T \tau_w dt \right|}{\int_0^T |\tau_w| dt} \right), \quad TAWSS = \frac{1}{T} \int_0^T |\tau_w| dt.$$

где  $\tau_w$  – вектор сдвиговых напряжений на стенке;  $t, c$ , – время;  $T, c$ , – период пульсаций.

На рис. 7,а показаны распределения осредненных по периоду пульсаций сдвиговых напряжений и индекс колебаний сдвиговых напряжений на стенке бифуркации брюшной аорты в жесткой ( $E \rightarrow \infty$ ) и упругой ( $E = 1$  МПа) моделях. Влияние модуля Юнга на эти характеристики показано на рис. 7,б. Наибольшее различие сдвиговых напряжений (на 20 % меньше в упругой модели, по сравнению с жесткой) наблюдается в брюшной аорте, в месте наибольшей деформации стенки. Незначительная разница (отличие не превышает 10 % в упругой модели относительно жесткой) наблюдается в наружных подвздошных артериях; в остальных отделах брюшной аорты влияние упругости ее стенки на осредненные сдвиговые напряжения не превышает 2 %.

Наибольшее различие между значениями индекса колебаний сдвиговых напряжений (OSI) наблюдается перед бифуркацией брюшной аорты: для упругой модели, значение OSI (в среднем по окружности) выше данных для жесткой модели примерно на 60 %. Меньшие отличия от жесткой модели наблюдаются в подвздошных артериях: значения OSI для упругой модели выше на 10 %.

## Заключение

С помощью численного моделирования исследовано влияние упругости стенок на течение крови в среднестатистической бифуркации брюшной аорты с подвздошными артериями. Максимальная деформация стенки посередине брюшной аорты составляла 5 %, что соответствует физиологическому уровню пульсаций стенки. Наибольшее влияние упругости наблюдается в области непосредственно перед бифуркацией, где имеют место большие деформации стенок сосуда, изменяющие форму поперечного сечения от овального к круглому.

Согласно полученным результатам, структура поперечного течения по сосуду не имеет качественных различий при использовании упругой и жесткой моделей бифуркации. Получено, что максимальные значения поперечной скорости для упругой модели примерно на 10 % выше, чем для жесткой.

В связи с изменением площади поперечного сечения сосуда из-за деформации стенок, на этапе роста давления расход увеличивается, а при снижении давления – уменьшается. Сравнительный анализ полученных результатов показал, что амплитуда прямого расхода при использовании упругой модели увеличилась на 40%, а обратного – почти вдвое.

Для модели с упругими стенками осредненные по циклу сдвиговые напряжения (TAWSS) в области бифуркации уменьшились на 20 %, а индекс их колебаний (OSI) увеличился на 60 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №18-01-00629).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chong C.K., How T.V. Flow patterns in an endovascular stent-graft for abdominal aortic aneurysm repair // Journal of Biomechanics. 2004. Vol. 37. No. 1. Pp. 89–97.
2. Ku D.N., Glagov S., Moore Jr. J.E., Zarins C.K. Flow patterns in the abdominal aorta simulated postprandial and exercise conditions: an experimental study// Journal of Vascular Surgery. 1989. Vol. 9. No. 2. Pp. 309–316.
3. Гатаулин Я.А., Зайцев Д.К., Смирнов

- Е.М., Федорова Е.А., Юхнев А.Д. Расчетно-экспериментальное исследование слабо закрученного течения в модели сосуда со стенозом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 4 (230). С. 36–47.
4. **Гатаулин Я.А., Зайцев Д.К., Смирнов Е.М., Юхнев А.Д.** Численное исследование пространственно-временной эволюции вторичного течения в модели общей сонной артерии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2016. № 4 (253). С. 48–55.
5. **Gataulin Y.A., Yuxhnev A.D., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Kulikov V.P., Kirsanov R.I.** Structure of the secondary flow in the bifurcation of a blood vessel: patient specific modeling and clinical Doppler measurements // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. Vol. 1135. P. 012089 (7 p.).
6. **Dalman R.L., Tedesco M.M., Myers J.** AAA disease: mechanism, stratification, and treatment // *Annals of the New York Academy of Sciences*. 2006. Vol. 1085. No. 1. Pp. 92–109.
7. **Tang B.T., Cheng C.P., Tsao P.S., Taylor C.A.** Subject-specific finite element modeling of three-dimensional pulsatile flow in the human abdominal aorta: comparison of resting and exercise conditions // *Proceedings of the 2003 Summer Bioengineering Conference*, June 25 – 29, 2003. Sonesta Beach Resort. Key Biscayne, Florida, USA, 2003. P. 2.
8. **Figuroa C.A., Vignon-Clementel I.E., Jansen K.E., Hughes T.J.R., Taylor C.A.** A coupled momentum method for modeling blood flow in three-dimensional deformable arteries // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2006. Vol. 195. No. 41. Pp. 5685–5706.
9. **Ke L., Wentao J., Yu C., Xiaobao T., Zhihong Z., Ding Y.** Fluid-solid interaction analysis on iliac bifurcation artery: a numerical study // *International Journal of Computational Methods*. Chengdu, China. 17. 2019. Vol. 16. No. 7. P. 1850112 (17 p.).
10. **Javadzadegan A., Simmons A., Barber T.** Spiral blood flow in aorta-renal bifurcation models // *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. 2015. Vol. 19. No. 9. Pp. 964–976.
11. **Mesri Y., Niazmand H., Deyranlou A.** Numerical study on fluid-structure interaction in a patient-specific abdominal aortic aneurysm for evaluating wall heterogeneity and material model effects on its rupture // *Journal of Applied Fluid Mechanics*. 2017. Vol. 10. No. 6. Pp. 1699–1709.
12. **Ahlgren A.R., Hansen F., Sonesson B., Lanne T.** Stiffness and diameter of the common carotid artery and abdominal aorta in women // *Ultrasound in Medicine and Biology*. 1997. Vol. 23. No. 7. Pp. 983–988.
13. **Koullias G., Modak R., Tranquilli M., Korkolis D., Barash P., Elefteriades J.** Mechanical deterioration underlies malignant behavior of aneurysmal human ascending aorta // *The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*. 2005. Vol. 130. No. 3. Pp. 677–683.
14. **Синицына Д.Э., Юхнев А.Д., Зайцев Д.К., Туркина М.В.** Ультразвуковое и численное исследование структуры течения в трехмерной модели бифуркации брюшной аорты // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 50–60.
15. **Yeung J.J., Kim H.J., Abbruzzese T.A., et al.** Aortoiliac hemodynamic and morphologic adaptation to chronic spinal cord injury // *Journal of Vascular Surgery*. 2006. Vol. 44. No. 6. Pp. 1254–1265.
16. **Malossi A.C.I., Bonnemain J.** Numerical comparison and calibration of geometrical multi-scale models for the simulation of arterial flows // *Cardiovascular Engineering and Technology*. 2013. Vol. 4. No. 4. Pp. 440–463.
17. **Alimohammadi M., Pichardo-Almarza C., Tomaso G., Balabani S., Agu O., Diaz-Zuccarini V.** Predicting atherosclerotic plaque location in an iliac bifurcation using a hybrid CFD/biomechanical approach // *Lecture Notes in Computer Science. Bioinformatics and Biomedical Engineering. Part II*. Eds. Ortuño F., Rojas I. 2015. Vol. 9044. Pp. 594–606.
18. **Xiao N.** Simulation of 3-D blood flow in the full systemic arterial tree and computational frameworks for efficient parameter estimation. A dissertation submitted to Stanford University for the degree of PhD. Stanford, 2014. 215 p. [www.isd.ksl.ac.uk/FiguroaLabFiles/papers/NX-thesis](http://www.isd.ksl.ac.uk/FiguroaLabFiles/papers/NX-thesis).

19. Long Q., Xu X.Y., Bourne M., Griffith T.M. Numerical study of blood flow in an anatomically realistic aortic-iliac bifurcation generated from MRI data // Magnetic Resonance in Medicine. 2000. Vol. 43. No. 4. Pp. 565–576.
20. Tang B.T., Cheng C.P., Draney M.T., Wilson N.M., Tsao P.S., Herfkens R.J., Taylor C.A. Abdominal aortic hemodynamics in young healthy adults at rest and during lower limb exercise: quantification using image-based computer modeling // American Journal of Physiology Heart and Circulatory Physiology. 2006. Vol. 291. No. 2. Pp. 668–676.
21. Schriebl A.J., Zeindlinger G., Pierce D.M., Regitnig P., Holzapfel G.A. Determination of the layer-specific distributed collagen fibre orientations in human thoracic and abdominal aortas and common iliac arteries // Journal of the Royal Society Interface. 2012. Vol. 9. No. 71. Pp. 1275–1286.
22. Mbodj C., Altnji H.E., Bou-Said B., Walter-Le Berre H. Analysis of the phenomenon of endoleak of type I A. Influence of the mechanical characterization of the aorta // Journal of Hypertension and Management. 2016. Vol. 2. No. 1. P. 1510014 (7 p.).
23. Бегун П.И., Афонин П.Н. Моделирование в биомеханике. М.: Высшая школа, 2004. 390 с.

Статья поступила в редакцию 01.10.2020, принята к публикации 30.10.2020.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОТМАКОВА Анна Алексеевна** – инженер АО «Научно-исследовательский институт оптико-электронного приборостроения», г. Сосновый Бор Ленинградской области, Российская Федерация.

188540, Российская Федерация, Ленинградская область, г. Сосновый Бор, Ленинградская ул., 29  
 anechka\_kotmakova@mail.ru

**ГАТАУЛИН Яков Александрович** – математик, заместитель директора Института прикладной математики и механики по научно-исследовательской работе студентов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
 yakov\_gataulin@mail.ru

**ЮХНЕВ Андрей Данилович** – заведующий учебной лабораторией Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ЗАЙЦЕВ Дмитрий Кириллович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

#### REFERENCES

1. Chong C.K., How T.V., Flow patterns in an endovascular stent-graft for abdominal aortic aneurysm repair, Journal of Biomechanics. 37(1) (2004) 89–97.
2. Ku D.N., Glagov S., Moore Jr. J.E., Zarins C.K., Flow patterns in the abdominal aorta simulated postprandial and exercise conditions: an experimental study, Journal of Vascular Surgery. 9 (2) (1989) 309–316.
3. 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, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 4(230) (2015) 36–47.
4. **Gataulin Ya.A., Zaitsev D.K., Smirnov E.M., Yukhnev A.D.**, Numerical study of spatial-temporal evolution of the secondary flow in the models of a common carotid artery, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 4 (253) (2016) 48–55.
5. **Gataulin Y.A., Yukhnev A.D., Zaitsev D.K., et al.**, Structure of the secondary flow in the bifurcation of a blood vessel: patient specific modeling and clinical Doppler measurements, *Journal of Physics: Conference Series*. 1135 (2018) 012089.
6. **Dalman R.L., Tedesco M.M., Myers J.**, AAA disease: mechanism, stratification, and treatment, *Annals of the New York Academy of Sciences*. 1085(1) (2006) 92–109.
7. **Tang B.T., Cheng C.P., Tsao P.S., Taylor C.A.**, Subject-specific finite element modeling of three-dimensional pulsatile flow in the human abdominal aorta: comparison of resting and exercise conditions, *Proceedings of the 2003 Summer Bioengineering Conference*, June 25 – 29, 2003, Sonesta Beach Resort, Key Biscayne, Florida, USA (2003) 2.
8. **Figueroa C.A., Vignon-Clementel I.E., Jansen K.E., et al.**, A coupled momentum method for modeling blood flow in three-dimensional deformable arteries, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 195 (41) (2006) 5685–5706.
9. **Ke L., Wentao J., Yu C., et al.**, Fluid-solid interaction analysis on iliac bifurcation artery: a numerical study, *International Journal of Computational Methods*. Chengdu, China. 17. 16 (7) (2019) 1850112.
10. **Javadzadegan A., Simmons A., Barber T.**, Spiral blood flow in aorta-renal bifurcation models, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. 19 (9) (2015) 964–976.
11. **Mesri Y., Niazmand H., Deyranlou A.**, Numerical study on fluid-structure interaction in a patient-specific abdominal aortic aneurysm for evaluating wall heterogeneity and material model effects on its rupture, *Journal of Applied Fluid Mechanics*. 10 (6) (2017) 1699–1709.
12. **Ahlgren A.R., Hansen F., Sonesson B., Lanne T.**, Stiffness and diameter of the common carotid artery and abdominal aorta in women, *Ultrasound in Medicine and Biology*. 23 (7) (1997) 983–988.
13. **Koullias G., Modak R., Tranquilli M., et al.**, Mechanical deterioration underlies malignant behavior of aneurysmal human ascending aorta, *The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*. 130 (3) (2005) 677–683.
14. **Sinitsyna D.E., Yukhnev A.D., Zaitsev D.K., Turkina M.V.**, The flow structure in a three-dimensional model of abdominal aortic bifurcation: ultrasonic and numerical study, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 12 (4) (2019) 50–60.
15. **Yeung J.J., Kim H.J., Abbruzzese T.A., et al.**, Aortoiliac hemodynamic and morphologic adaptation to chronic spinal cord injury, *Journal of Vascular Surgery*. 44 (6) (2006) 1254–1265.
16. **Malossi A.C.I., Bonnemain J.**, Numerical comparison and calibration of geometrical multiscale models for the simulation of arterial flows, *Cardiovascular Engineering and Technology*. 4 (4) (2013) 440–463.
17. **Alimohammadi M., Pichardo-Almarza C., Tomaso G., et al.**, Predicting atherosclerotic plaque location in an iliac bifurcation using a hybrid CFD/biomechanical approach, *Lecture Notes in Computer Science: Bioinformatics and Biomedical Engineering, Part II*, Eds. Ortuño F., Rojas I. 9044 (2015) 594–606.
18. **Xiao N.**, Simulation of 3-D blood flow in the full systemic arterial tree and computational frameworks for efficient parameter estimation, A dissertation submitted to Stanford University for the degree of PhD, Stanford, 2014. [www.isd.ksl.ac.uk/FigueroaLabFiles/papers/NX-thesis](http://www.isd.ksl.ac.uk/FigueroaLabFiles/papers/NX-thesis).
19. **Long Q., Xu X.Y., Bourne M., Griffith T.M.**, Numerical study of blood flow in an anatomically realistic aortic-iliac bifurcation generated from MRI data, *Magnetic Resonance in Medicine*. 43 (4) (2000) 565–576.
20. **Tang B.T., Cheng C.P., Draney M.T., et al.**, Abdominal aortic hemodynamics in young healthy adults at rest and during lower limb exercise: quantification using image-based computer mode-



ling, American Journal of Physiology Heart and Circulatory Physiology. 291(2) (2006) 668–676.

21. **Schrieffl A.J., Zeindlinger G., Pierce D.M., et al.**, Determination of the layer-specific distributed collagen fibre orientations in human thoracic and abdominal aortas and common iliac arteries, Journal of the Royal Society Interface. 9 (71) (2012) 1275–1286.

22. **Mbodj C., Altnji H.E., Bou-Said B., Walter-Le Berre H.**, Analysis of the phenomenon of endoleak of type I A. Influence of the mechanical characterization of the aorta, Journal of Hypertension and Management. 2 (1) (2016) 1510014.

23. **Begun P.I., Afonin P.N.**, Modelirovaniye v biomekhanike [Modeling in biomechanics], Vysshaya Shkola, Moscow, 2004 (in Russian).

*Received 01.10.2020, accepted 30.10.2020.*

### THE AUTHORS

**KOTMAKOVA Anna A.**

*Scientific Research Institute for Optoelectronic Instrument Engineering*

29 Leningradskaya St., Sosnovy Bor, Leningrad region, 188540, Russian Federation

www.anechka\_kotmakova@mail.ru

**GATAULIN Yakov A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

yakov\_gataulin@mail.ru

**YUKHNEV Andrey D.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

a.yukhnev@mail.ru

**ZAITSEV Dmitri K.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

zaitsev-aero@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.13408

УДК 537.534.3:621.384.8 (075.8)

## ИДЕАЛЬНО ФОКУСИРУЮЩИЕ СИСТЕМЫ С ОДНОРОДНЫМИ МАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ

**К.В. Соловьев**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;  
Институт аналитического приборостроения Российской академии наук,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Рассмотрены случаи идеальной фокусировки пучка заряженных частиц в присутствии постоянного магнитного поля. Показано, что идеальная пространственно-временная фокусировка по одному из направлений сохраняется в магнитном поле только при однородности последнего и совмещении его направления с направлением квадратичного нарастания потенциала электрического поля. В качестве примера рассмотрено наложение магнитного поля на осесимметричные электростатические поля, практически применяемые в масс-спектрометрии. Сделан вывод о необходимости линейности хотя бы одного из уравнений отделяемого движения для обеспечения идеальной пространственно-временной фокусировки.

**Ключевые слова:** масс-спектрометрия, идеальная фокусировка, ионная ловушка, однородное магнитное поле

**Ссылка при цитировании:** Соловьев К.В. Идеально фокусирующие системы с однородными магнитными полями // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 102–109. DOI: 10.18721/JPM.13408

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## IDEAL FOCUSING SYSTEMS WITH HOMOGENOUS MAGNETIC FIELDS

**K.V. Solovyev**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;  
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences,  
St. Petersburg, Russian Federation

Cases of charged-particle beam's ideal focusing in the presence of a constant magnetic field have been considered. One-directional ideal space-time focusing was shown to remain only on conditions that a magnetic field being homogenous and its direction being the same as the one of quadratic potential growth. Axially symmetric electrostatic fields with superimposed magnetic field were taken as an example because of their practical importance in the mass spectrometry. It was concluded that at least one equation with separated motion should be linear to maintain the ideal space-time focusing.

**Keywords:** spectrometry, ideal focusing, ion trap, homogenous magnetic field

**Citation:** Solovyev K.V., Ideal focusing systems with homogenous magnetic fields, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 102–109. DOI: 10.18721/JPM.13408

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)



## Введение

Полевые структуры, обеспечивающие идеальную пространственно-временную фокусировку (ИПВФ) пучка заряженных частиц по одному из направлений, являются в настоящее время теоретической основой синтеза широкого класса высокоразрешающих масс-спектрометрических приборов [1, 8 – 11]. В работе [2] впервые указана вся совокупность электростатических полей, обладающих квадратичной зависимостью потенциала от одной из координат. Именно такие поля и обеспечивают ИПВФ пучка. Электростатические интегрируемые системы с идеальной пространственно-временной фокусировкой по одному из направлений к настоящему времени достаточно полно изучены [3 – 7]; среди неинтегрируемых вариантов особое внимание было обращено на так называемые ловушки Кассини [8 – 11], дающие в ряде случаев возможность совместить функционал собственно ловушки и системы подготовки ионного пакета [11].

Возможности синтеза разнообразных, идеально фокусирующих систем, реализуемых в электростатике, практически ничем не ограничены. Однако для полноты картины целесообразно снова рассмотреть проблему сохранения ИПВФ в присутствии магнитного поля (более ранее обсуждение вопроса см., например, в статье [12]).

### Анализ идеально фокусирующих систем

Для начала перейдем к построению безразмерной модели поставленной задачи. Как известно, движение заряженной частицы в электрическом поле с потенциалом  $\Phi$  и магнитном поле с вектором магнитной индукции  $\mathbf{B}$  описывается уравнением

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = -q \cdot \text{grad } \Phi + q \frac{d \mathbf{R}}{dt} \times \mathbf{B}, \quad (1)$$

где  $m, q$  – масса и заряд иона;  $\mathbf{R}$  – радиус-вектор частицы;  $t$  – время.

Введем безразмерные переменные  $\mathbf{r}, \tau, \phi, \mathbf{b}, \mu$  через следующие соотношения:

$$\mathbf{R} = l \mathbf{r}, \quad t = T \tau, \quad \Phi = \Phi_0 \phi,$$

$$\mathbf{B} = B_0 \mathbf{b}, \quad m = m_0 \mu,$$

где  $l$  – характерный габарит системы;  $\Phi_0, B_0$  – ее характерный потенциал и индукция магнитного поля;  $T$  – единица времени;  $m_0$  – единица массы;

$$\mathbf{r} = (x, y, z), \quad \mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$$

– соответственно безразмерный радиус-вектор и безразмерный вектор магнитного поля, всюду единичный для однородного поля и единичный в выбранной точке пространства для неоднородного поля.

Подставив новые переменные в уравнение (1), получим:

$$\begin{aligned} & m_0 \mu \cdot \frac{l}{T^2} \cdot \frac{d^2 \mathbf{r}}{d \tau^2} = \\ & = -q \cdot \frac{\Phi_0}{l} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} + q \cdot \frac{l}{T} \cdot \frac{d \mathbf{r}}{d \tau} \times (B_0 \mathbf{b}), \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \mu \frac{d^2 \mathbf{r}}{d \tau^2} & = -q \cdot \frac{T^2 \Phi_0}{m_0 l^2} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} + \\ & + q \cdot \frac{T B_0}{m_0} \cdot \frac{d \mathbf{r}}{d \tau} \times \mathbf{b}. \end{aligned}$$

Принимая в качестве константы измерения времени величину  $T$ , необходимо выбрать один из трех вариантов: сделать единицей коэффициент при первом слагаемом правой части, либо то же при втором слагаемом, либо потребовать определенной связи между величинами этих коэффициентов.

Остановимся на первом варианте, положив

$$T = l \sqrt{\frac{m_0}{q \Phi_0}}. \quad (2)$$

Тогда получим уравнение движения в виде

$$\mu \ddot{\mathbf{r}} = -\nabla \phi + \beta \cdot \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{b}, \quad (3)$$

где точка над символом обозначает дифференцирование по  $\tau$ , а градиент берется уже по компонентам вектора  $\mathbf{r}$ . Параметр  $\beta$  определяется выражением

$$\beta = l B_0 \sqrt{\frac{1}{m_0} \left| \frac{q}{\Phi_0} \right|}. \quad (4)$$

Для случая однородного магнитного поля, направленного вдоль оси  $z$ , очевидно,  $\mathbf{b} = \mathbf{e}_z$ . Данная схема введения безразмерных переменных отличается от принятой в работах [3 – 7], поскольку наличие магнитного поля влияет на геометрию траекторий частиц различной массы. Безразмерный потенциал идеально фокусирующей электростатической системы имеет вид [2]:

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= z^2 + f(x, y), \\ f_{xx} + f_{yy} + 2 &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Благодаря аддитивному члену  $z^2$  в потенциале (5), движение по направлению  $z$  в поле с потенциалом (5) при значении параметра  $\beta = 0$  отделено от движения по направлениям  $x, y$  и подчиняется уравнению гармонических колебаний:

$$\mu \ddot{z} = -2z, \quad (6)$$

решение которого имеет вид

$$z = z_0 \cos\left(\sqrt{\frac{2}{\mu}} \tau\right) + \dot{z}_0 \sqrt{\frac{\mu}{2}} \sin\left(\sqrt{\frac{2}{\mu}} \tau\right). \quad (7)$$

Решение (7) гарантирует идеальную пространственно-временную фокусировку пучка в плоскостях  $z = \pm z_0$  при старте заряженных частиц из плоскости  $z_0$  с любыми  $\dot{z}_0$  либо фокусировку пучка в плоскости  $z = 0$  при их старте из различных точек  $z_0$  с нулевой  $z$ -компонентой начальной скорости.

Наложение внешнего магнитного поля видоизменяет уравнение движения по  $z$ :

$$\mu \ddot{z} = -2z + \beta(\dot{x}b_y - \dot{y}b_x). \quad (8)$$

Очевидно, что только при  $\mathbf{b} = \mathbf{e}_z$  уравнение (8) сохраняет вид (6), характерный для случая электростатики, обеспечивая независимость колебаний по оси  $z$  от движения в плоскости, ортогональной  $z$ . При условии  $b_x \neq 0$  либо  $b_y \neq 0$  имеет место «перепутывание» координат в системе (3), ввиду чего движение по направлению  $z$  не отделяется, нарушается линейность (если только потенциал не является квадратичной формой и система уравнений движения не является полностью линейной; см., например, работу [13]). Поле должно быть однородным, поскольку зависимость любой компоненты вектора  $\mathbf{b}$  от координат влечет за собой отличие от нуля и зависимость от координат еще одной (по крайней мере) компоненты вектора в силу уравнения  $\text{div } \mathbf{b} = 0$ .

Таким образом, расширение класса полей с идеальной пространственно-временной фокусировкой становится возможным, лишь если включить в него системы следующего вида:

*электростатическое поле типа (5) +  
+ однородное магнитное поле,  
направленное вдоль оси  $z$ .*

Здесь же напомним, что однородное магнитное поле обеспечивает идеальную пространственно-временную фокусировку пучка и в следующих хорошо известных случаях, которые рассмотрим в размерных координатах в предположении  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ .

1.  $\mathbf{E} = 0, \mathbf{B} \neq 0$ . Период вращения частиц в однородном магнитном поле

$$T = \frac{2\pi m}{qB} \quad (9)$$

не зависит от начальных данных и определяется величиной поля и отношением заряд/масса.

Таким образом, в проекции на плоскость, ортогональную вектору магнитной индукции, через время, равное периоду  $T$ , осуществ-



вляется идеальная фокусировка пучка в точке, совпадающей с точкой старта. В ней фокусируются частицы всех масс, но в разные моменты времени. Движение вдоль вектора  $\mathbf{V}$  – равномерное. При ненулевой  $z$ -компоненте начальной скорости частиц источник становится пространственно (по координате  $z$ ) разделенным с детектором. Времяпролетный спектрометр, действующий на этом принципе, описан в статье [14].

2.  $\mathbf{E} \neq 0$ ,  $\mathbf{V} \neq 0$ , вектор  $\mathbf{E}$  параллелен вектору  $\mathbf{V}$ . Этот случай аналогичен первому, но движение по  $z$  – равноускоренное, поэтому можно управлять размером изображения на детекторе.

3.  $\mathbf{E} \neq 0$ ,  $\mathbf{V} \neq 0$ , вектор  $\mathbf{E}$  не параллелен вектору  $\mathbf{V}$ . Пусть для определенности вектор электрического поля ориентирован следующим образом:

$$\mathbf{E} = (-E_x, 0, E_z).$$

Это обобщение случая скрещенных полей (известен из элементарного курса физики), также обеспечивающего идеальную одномерную пространственно-временную фокусировку через время, кратное периоду  $T$  (см. формулу (9)), в плоскости, проходящей через точку старта ортогонально оси  $x$ . В отличие от случая 2, точка фокусировки смещена относительно точки старта на расстояние  $2\pi m E_x / (qB^2)$  в направлении  $y$ . Линии спектра масс разворачиваются в виде отрезков, параллельных вектору  $\mathbf{V}$ . Времяпролетные свойства циклоидального масс-спектрометра использованы в патенте [15].

Среди комбинаций электрического поля, квадратичного по одной из координат потенциала, и однородного магнитного поля, направленного вдоль того же координатного направления, интересен случай полей с осевой симметрией. Он обсуждался в работах [16, 17], но в другом контексте.

Дальнейшее рассмотрение проблемы будет вестись только в безразмерных координатах (2) – (4).

Наиболее общий вид потенциала (5) в осесимметричном случае следующий:

$$\begin{aligned} \phi(r, z) &= z^2 - \frac{r^2}{2} + \alpha \cdot \ln r, \\ \alpha &\in \{-1, 0, 1\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Данное выражение включает в себя поле орбитальной ловушки [1] ( $\alpha = 1$ ), удерживающее частицы при определенных начальных скоростях, а также поле гиперboloида ( $\alpha = 0$ ) и поле квадрологарифмического типа ( $\alpha = -1$ ), принципиально не удерживающие частицы по координате  $r$  в отсутствие магнитного поля. Потенциал (10) обеспечивает гармонические колебания иона по направлению  $z$  (гарантируя ИПВФ) и его радиально-азимутальное движение в поле эффективного потенциала, имеющего вид

$$U_0(r) = \mu \frac{r_0^4 \dot{\gamma}_0^2}{2r^2} - \frac{r^2}{2} + \alpha \ln r. \quad (11)$$

Возникшая в данном варианте безразмеривания зависимость  $U_0$  от массы  $\mu$  исчезнет, если учесть, что полная энергия частицы связана с начальными данными соотношением

$$\begin{aligned} \mu \left( \frac{\dot{r}_0^2}{2} + \frac{r_0^2 \dot{\gamma}_0^2}{2} + \frac{\dot{z}_0^2}{2} \right) &= \\ &= E = E_r + E_\gamma + E_z. \end{aligned} \quad (12)$$

Тогда  $\mu \frac{r_0^2 \dot{\gamma}_0^2}{2} = E_\gamma$  и

$$U_0(r) = E_\gamma \frac{r_0^2}{r^2} - \frac{r^2}{2} + \alpha \ln r. \quad (13)$$

Погружение системы (10) в однородное магнитное поле приводит к замене эффективного потенциала (11) потенциалом

$$\begin{aligned} U_\beta(r) &= \left( \dot{\gamma}_0 + \frac{\beta}{2\mu} \right)^2 \frac{\mu r_0^4}{2r^2} + \\ &+ \left( \frac{\beta^2}{4\mu} - 1 \right) \frac{r^2}{2} + \alpha \ln r \end{aligned} \quad (14)$$

и, соответственно, вызывает деформацию исходного радиально-азимутального движения при сохранении идеальной пространственно-временной фокусировки пучка по координате  $z$ . Границы области радиального движения здесь существенно зависят от массы.

Нулевому значению параметра  $\alpha$  соответствует хорошо известная ловушка Пеннинга (см., например, монографию [18]). Этот случай достаточно изучен, поэтому сосредоточимся на вариантах  $\alpha = \pm 1$ .

Обозначив

$$a = \left( \dot{\gamma}_0 + \frac{\beta}{2\mu} \right)^2 \frac{\mu r_0^4}{2}, \quad c = \left( \frac{\beta^2}{4\mu} - 1 \right), \quad (15)$$

запишем выражение (14) в виде

$$U_\beta(r) = \frac{a}{r^2} + \frac{c r^2}{2} + \alpha \ln r. \quad (16)$$

Поскольку  $a > 0$ ,  $U_\beta(r) \rightarrow +\infty$  при  $r \rightarrow 0$ . Поведение  $U_\beta(r)$  при  $r \rightarrow +\infty$  определяется знаком параметра  $c$ . Для  $c > 0$   $U_\beta(r) \rightarrow +\infty$  при  $r \rightarrow +\infty$ , а зависимость  $U_\beta(r)$  имеет минимум, образуя потенциальную яму, удерживающую ионы. Для  $c < 0$   $U_\beta(r) \rightarrow -\infty$  при  $r \rightarrow +\infty$  и яма эффективного потенциала существует лишь при наличии как минимума, так и максимума  $U_\beta(r)$ ; удержание же иона в яме возможно лишь при выполнении определенных условий, связывающих начальные данные иона с параметрами полей, аналогичных случаю электростатики [19].

Итак, для случая  $c < 0$  уравнение  $\partial U_\beta(r) / \partial r = 0$  имеет два вещественных корня:

$$r^2 = \frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 8ac}}{2c}$$

при условии положительности дискриминанта, а именно, при  $8ac > -\alpha^2$ .

Тогда

$$-\alpha^2 / (8a) < c < 0. \quad (17)$$

Условие  $r^2 > 0$  приводит к неравенству

$$-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 8ac} < 0,$$

которое, при соблюдении соотношения (17), всегда выполняется для  $\alpha = 1$  и никогда для  $\alpha = -1$ . Используя выражения (15), (17) для  $\alpha = 1$ , получаем неравенства

$$-1 < 4\mu r_0^4 \left( \frac{\beta^2}{4\mu} - 1 \right) \cdot \left( \dot{\gamma}_0 + \frac{\beta}{2\mu} \right)^2 < 0. \quad (18)$$

Требование отрицательности средней части выражения (18) (то есть правая часть двойного неравенства (18)) обеспечивается выполнением условия  $\beta^2 < 4\mu$ , всегда верном при нулевом магнитном поле. Выполнение левой части двойного неравенства (18) реализуется соответствующим выбором начальных данных.

Равенство  $c = 0$  для  $\alpha = 1$  делает возможным существование ямы эффективного потенциала (16) при любых начальных данных. Если же  $c > 0$ , яма гарантирована для ионов с произвольными условиями старта при любом значении  $\alpha$ . Таким образом, вариант  $\alpha = 1$  соответствует системе, способной удерживать ионы с любыми массами  $\mu$ , но для  $\mu \geq \beta^2/4$  — лишь при определенных начальных данных.

Для системы с  $\alpha = -1$  выполнение условия  $c > 0$  создает возможность удерживать ионы, отсутствующую в чисто электрическом поле. При этом требование  $\mu < \beta^2/4$ , эквивалентное неравенству  $c > 0$ , устанавливает предельное значение массы ионов, радиально устойчивых в магнитном поле величины  $\beta$ . Устройство на базе таких полей также применимо в масс-спектрометрии.

В заключение укажем на упомянутый в статье [13] случай слабо меняющегося однородного магнитного поля, также расширяющий исследуемый класс полей с ИПВФ.

### Заключение

В результате настоящего рассмотрения можно сделать вывод о том, что необходи-



мым условием идеальной пространственно-временной фокусировки в системе хотя бы по одному из направлений является либо линейность уравнения с отделяемым движением по этому направлению, либо, при перемешанности координат, линейность всей системы уравнений движения (в том числе, при соблюдении кратности частот колебаний дающая фокусировку по нескольким направлениям). Магнитное поле обязано

быть только однородным, можно использовать его воздействие на ионы в качестве удерживающего, в том числе в качестве компенсатора расталкивающих сил электрического поля.

Работа частично выполнена в рамках НИР 0074-2019-0009, входящей в состав гос. задания № 075-01073-20-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Zubarev R., Makarov A.** Orbitrap mass spectrometry // *Analytical Chemistry*. 2013. Vol. 85. No. 11. Pp. 5288–5296.
2. **Галль Л.Н., Печалина Е.Э., Голиков Ю.К.** Об одном классе электростатических полей с пространственно-временной фокусировкой // *Научное приборостроение. Электронно-ионная оптика*. Л.: Наука, 1989. С. 3–7.
3. **Голиков Ю.К., Краснова Н.К., Соловьев К.В., Никитина Д.В.** Интегрируемые ионные ловушки // *Прикладная физика*. 2006. № 5. С. 51–57.
4. **Голиков Ю.К., Соловьев К.В.** Электростатические ионные ловушки с разделением переменных в параболических координатах // *Письма в ЖТФ*. 2010. Т. 36. Вып. 7. С. 82–88.
5. **Голиков Ю.К., Соловьев К.В.** Критерий поперечной устойчивости в ионных ловушках с интегрируемым в эллиптических координатах движением // *Письма в ЖТФ*. 2011. Т. 37. Вып. 22. С. 43–49.
6. **Соловьев К.В., Виноградова М.В.** Условия финитности движения иона в электростатической ловушке с разделением переменных в параболических координатах // *Письма в ЖТФ*. 2018. Т. 44. Вып. 14. С. 34–41.
7. **Соловьев К.В., Виноградова М.В.** Двухэлектродная реализация электростатической ионной ловушки, интегрируемой в полярных координатах // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2019. Т. 12. № 1. С. 96–104.
8. **Никитина Д.В.** Ионные ловушки в динамической масс-спектрометрии. Автореферат дисс. ... канд. физ.-мат. наук. СПб. 2006. 16 с.
9. **Köster C.** The concept of electrostatic non-orbital harmonic ion trapping // *Int. J. Mass Spectrom.* 2009. Vol. 287. No. 1–3. Pp. 114–118.
10. **Köster C.** Twin trap or hyphenation of a 3D Paul- and Cassinian ion trap // *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 2015. Vol. 26. No. 3. Pp. 390–396.
11. **Nikolaev E., Sudakov M., Vladimirov G., Fernando L., Velásquez-García, Borisovets P., Fursova A.** Multi-electrode harmonized kingdom traps // *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 2018. Vol. 29. No. 11. Pp. 2173–2181.
12. **Makarov A.A.** Ideal and quasi-ideal time focusing of charged particles // *J. Phys. D.: Appl. Phys.* 1991. Vol. 24. No. 4. Pp. 533–540.
13. **Гликман Л.Г.** Фокусирующие свойства скрещенных однородного магнитного и гиперболоидального электрических полей // *ЖТФ*. 1971. Т. 41. Вып. 10. С. 2009–2015.
14. **Hays E.E., Richards P.I., Goudsmit S.A.** Mass measurements with a magnetic time-of-flight mass spectrometer // *Phys. Rev.* 1951. Vol. 84. No. 4. Pp. 824–829.
15. **Voss G.F., Celso A.B., Duryea A.N.** Cycloidal mass spectrometer with time of flight characteristics and associated method. Pat. No. 6,617,576 B1, United States, Int. Cl. B01D 59/44, Assignee: Monitor Instruments Company, LLC, Cheswick, PA (US), Appl. No.: 10/085542, Filed: 28.02.2001 (Provisional appl. No. 60/273062, filed: 2.03.2001). Date of Patent: 9.09.2003. 12 p.
16. **Бородкин А.С.** Движение заряда в специальном случае статического электромагнитно-

го поля // ЖТФ. 1961. Т. 31. Вып. 5. С. 582–587.

17. **Бородкин А.С.** Движение заряженной частицы в смешанном электрическом и однородном магнитном полях // ЖТФ. 1971. Т. 41. Вып. 9. С. 1845–1850.

18. **Major F.G., Gheorghe V.N., Werth G.**

Charged particle traps. Physics and techniques of charged particle field confinement. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. 354 p.

19. **Голиков Ю.К., Соловьев К.В.** Осесимметричная ионная ловушка // Научное приборостроение. 2014. Т. 24. № 1. С. 36–49.

*Статья поступила в редакцию 05.10.2020, принята к публикации 26.10.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

**СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович** – кандидат физико-математических наук, доцент Инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

## REFERENCES

1. **Zubarev R., Makarov A.**, Orbitrap mass spectrometry, Analytical Chemistry. 85 (11) (20) (2013) 5288–5296.

2. **Gall L.N., Pechalina E.E., Golikov Yu.K.**, Ob odnom klasse elektrostatičeskikh poley s prostanstvenno-vremennoy fokusirovkoj [About an electrostatic field class with space-time focusing], Nauchnoye Priborostroyeniye, Elektronno-Ionnaya Optika, Nauka, Leningrad. (1989) 3–7 (in Russian).

3. **Golikov Yu.K., Krasnova N.K., Solovyev K.V., Nikitina D.V.**, Integrating electrostatic traps, Prikladnaya Fizika. (5) (2006) 51–57.

4. **Golikov Yu.K., Solov'ev K.V.**, Electrostatic ion traps with separation of variables in parabolic coordinates, Technical Physics Letters. 36 (4) (2010) 333–336.

5. **Golikov Yu.K., Solov'ev K.V.**, Criterion of transverse stability for ion traps, Technical Physics Letters. 37 (11) (2011) 1062–1064.

6. **Solov'ev K.V., Vinogradova M.V.**, Conditions of ion motion confinement in an electrostatic trap with separation of variables in parabolic coordinates, Technical Physics Letters. 44 (7) (2018) 618–621.

7. **Solovyev K.V., Vinogradova M.V.**, Two-electrode design for electrostatic ion trap integrable in polar coordinates, St. Petersburg State Poly-

technical University Journal. Physics and Mathematics 12 (1) (2019) 96–104.

8. **Nikitina D.V.**, Ionnyye lovushki v dinamicheskoy mass-spektrometrii [Ion traps in dynamical mass spectrometry], PhD Thesis autoabstract, St. Petersburg, 2006 (in Russian).

9. **Köster C.**, The concept of electrostatic non-orbital harmonic ion trapping, Int. J. Mass Spectrom. 287 (1–3) (2009) 114–118.

10. **Köster C.**, Twin trap or hyphenation of a 3D Paul- and Cassinian ion trap, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 26 (3) (2015) 390–396.

11. **Nikolaev E., Sudakov M., Vladimirov G., et al.**, Multi-electrode harmonized kingdon traps, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 29 (11) (2018) 2173–2181.

12. **Makarov A.A.**, Ideal and quasi-ideal time focusing of charged particles, J. Phys. D.: Appl. Phys. 24 (4) (1991) 533–540.

13. **Glikman L.G.**, Fokusiruyushchiye svoystva skreshchennykh odnorodnogo magnitnogo i giperboloidalnogo elektricheskogo poley [Focusing properties of crossed homogeneous magnetic and hyperboloidal electric fields], Soviet Physics – Technical Physics. 41 (10) (1971) 2009–2015 (in Russian).

14. **Hays E.E., Richards P.I., Goudsmit S.A.**, Mass measurements with a magnetic time-of-flight mass spectrometer, Phys. Rev. 84 (4) (1951) 824–829.



15. **Voss G.F., Celo A.B., Duryea A.N.**, Cycloidal mass spectrometer with time of flight characteristics and associated method, Pat. No. 6,617,576 B1, United States, Int. Cl. B01D 59/44, Assignee: Monitor Instruments Company, LLC, Cheswick, PA (US), Appl. No.: 10/085542, Filed: 28.02.2001 (Provisional appl. No. 60/273062, filed: 2.03.2001), Date of Patent: 9.09.2003.

16. **Borodkin A.S.**, Dvizheniye zaryada v spetsialnom sluchaye staticheskogo elektromagnitnogo polya [A charge propagation in the special case of a static electromagnetic field], Soviet Physics – Technical Physics. 31 (5) (1961) 582–587 (in Russian).

17. **Borodkin A.S.**, Dvizheniye zaryazhennoy chastitsy v smeshannom elektricheskom i odnorodnom magnitnom polyakh [A charged particle's propagation in the mixed electric and homogeneous magnetic fields], Soviet Physics – Technical Physics. 41 (9) (1971) 1845–1850 (in Russian).

18. **Major F.G., Gheorghe V.N., Werth G.**, Charged particle traps. Physics and techniques of charged particle field confinement, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005.

19. **Golikov Yu.K., Solovyev K.V.**, Axisymmetric ion trap, Nauchnoye priborostroyeniye. 24 (1) (2014) 36–49 (in Russian).

*Received 05.10.2020, accepted 26.10.2020.*

#### THE AUTHOR

**SOLOVYEV Konstantin V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

k-solovyev@mail.ru

## ТЕРМИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ОПТИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ СТЕКОЛ

**И.В. Решетов<sup>1,2</sup>, В.П. Каассик<sup>1,2</sup>, А.А. Липовский<sup>1,2</sup>,  
Д.К. Таганцев<sup>1,2</sup>, В.В. Журихина<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский академический университет  
имени Ж.И. Алферова Российской академии наук,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Исследования термической релаксации оптической нелинейности второго порядка, возникающей в приповерхностном слое поляризованного натриево-силикатного стекла, показали, что отжиг стекла при температурах ниже температуры стеклования приводит к полной релаксации нелинейности. В то же время выполненные измерения термостимулированного тока деполаризации продемонстрировали, что образовавшийся в результате поляризации объемный электрический заряд преимущественно релаксирует в области более высоких температур. Это указывает на то, что сформированная в результате термической поляризации оптическая нелинейность не индуцируется этим объемным зарядом.

**Ключевые слова:** стекло, оптическая нелинейность, поляризация, полинг, релаксация, деполаризация, термостимулированный ток деполаризации

**Ссылка при цитировании:** Решетов И.В., Каасик В.П., Липовский А.А., Таганцев Д.К., Журихина В.В. Термическая релаксация оптической нелинейности поляризованных стекол // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 110–118. DOI: 10.18721/JPM.13409

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## THERMAL RELAXATION OF OPTICAL NONLINEARITY IN THE POLED GLASSES

**I.V. Reshetov<sup>1,2</sup>, V.P. Kaasik<sup>1,2</sup>, A.A. Lipovskii<sup>1,2</sup>,  
D.K. Tagantsev<sup>1,2</sup>, V.V. Zhurikhina<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Alferov University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation

The thermal relaxation of second-order optical nonlinearity in the subsurface layer of a poled soda-lime silicate glass has been studied. The glass annealing below glass transition temperature was shown to lead to full relaxation of the nonlinearity. At the same time, the measurements of thermostimulated depolarization current demonstrated that spatial electric charge formed in the course of the glass polarization relaxed above the glass transition temperature. This allowed concluding that the second-order optical nonlinearity in the poled glasses was not induced by the spatial electric charge.

**Keywords:** glass, optical nonlinearity, polarization, poling, relaxation, depolarization, thermostimulated depolarization current



**Citation:** Reshetov I.V., Kaasik V.P., Lipovskii A.A., Tagantsev D.K., Zhurikhina, V.V., Thermal relaxation of optical nonlinearity in the poled glasses, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 110–118. DOI: 10.18721/JPM.13409

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Нелинейные оптические явления второго порядка (такие как генерация второй гармоники (ГВГ)), которые наблюдаются в многокомпонентных стеклах после их термической поляризации [1, 2], вызывают несомненный научный интерес исследователей, и помимо этого, должны найти свое коммерческое применение в фотонике, интегральной оптике и др. В связи с этим сегодня исследование термической релаксации оптической нелинейности поляризованных стекол является весьма актуальным.

В большинстве публикаций, посвященных этому вопросу (см., например, статьи [3, 4]), появление ГВГ в поляризованных стеклах связывается с тем, что при поляризации в стеклах образуется объемный электрический заряд, который в свою очередь создает в объеме стекла «замороженное» электрическое поле. Это поле приводит к нарушению исходно изотропной (центросимметричной) структуры стекла, т. е. последняя становится анизотропной, а само стекло приобретает свойства одноосных кристаллов, демонстрирующих оптическую нелинейность второго порядка. Однако недавно [5] нами было показано, что релаксация основной части объемного электрического заряда, образовавшегося в стекле при его поляризации, происходит при температурах выше температуры стеклования.

В настоящей работе мы представляем

результаты исследований, в которых сопоставляется кинетика релаксации ГВГ с данными по релаксации объемного заряда, полученными на основе измерений спектров термостимулированных токов деполяризации (ТСТД) [6].

Такие сравнительные исследования были направлены на расширение наших представлений о связи процессов, происходящих при поляризации стекол, с возникновением оптической нелинейности в поляризованных стеклах. Однако было установлено, что релаксация объемного заряда и релаксация ГВГ являются независимыми процессами.

## Экспериментальная часть

В работе использовалось промышленное щелочно-силикатное стекло, приобретенное в компании Agar Scientific (предметные стекла Menzel glasser). Состав стекла представлен в таблице, температура стеклования данного объекта составляла 530 °С [7].

Образцы имели толщину 1 мм. Поляризацию проводили при температуре 300 °С в течение 50 мин при постоянном электрическом напряжении 1 кВ. После поляризации образцы охлаждали до комнатной температуры под приложенным напряжением, после чего напряжение отключалось. Схема эксперимента по поляризации стекла представлена на рис. 1. Мы использовали электроды из нержавеющей стали размером 10 × 20 мм, прижатые к поверхности стекла.

Таблица

**Состав исследованного промышленного щелочносиликатного стекла**

Химический состав, % вес.						
SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	MgO	CaO	Другие оксиды
72,2	1,2	14,3	1,2	4,3	6,4	0,33

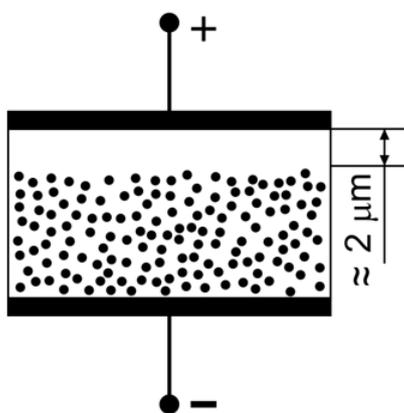


Рис. 1. Схема проведения поляризации стекол: напряжение поляризации  $U \approx 300$  В, температура поляризации  $T \approx 250$  °С, электрическое поле в сформированном обедненном слое  $E \approx 0,2$  В/нм. Точками показаны подвижные катионы в образце; его область толщиной около 2 мкм после поляризации становится обедненной подвижными катионами

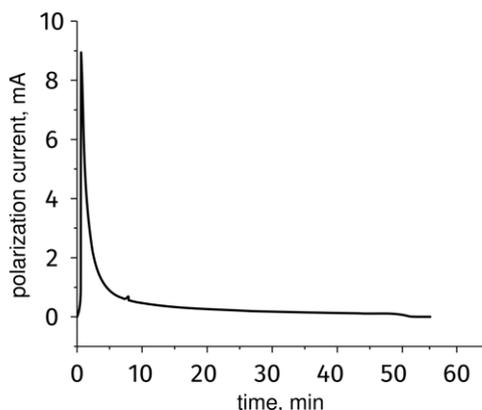


Рис. 2. Типичная зависимость тока поляризации в исследуемом стекле от времени

При такой температуре подвижность щелочных и щелочноземельных катионов, содержащихся в стекле, возрастает настолько, что приложенное электрическое поле заставляет эти катионы заметно смещаться в сторону катода [8, 9], в результате чего образуется пространственный объемный заряд. Как уже было отмечено выше, наличие объемного заряда приводит к появлению электрического

поля, которое компенсирует внешнее приложенное поле, и ток через стекло падает. Типичная зависимость тока поляризации от времени показана на рис. 2. После охлаждения до комнатной температуры под приложенным напряжением, объемный заряд «замораживается» в стекле и уже не может исчезнуть (релаксировать) из-за кинетических ограничений, т. е. экстремально низких подвижностей катионов при комнатной температуре.

Эффективность ГВГ в образцах поляризованных стекол определялась методом полос Мейкера [10]. Схема измерений, использованная для определения характеристик ГВГ, показана на рис. 3. Измерялся сигнал второй гармоники излучения лазера Litron Nano L, работающего на длине волны 1064 нм и генерирующего импульсы длительностью 6 нс. Угол падения лазерного луча на образец был равен  $63^\circ$  и зафиксирован, указанный угол соответствовал максимальной величине сигнала ГВГ. На рис. 3 также представлена полная мейкеровская картина, полученная в поляризованном стекле, из которой видно, что при значении угла  $63^\circ$  величина сигнала ГВГ действительно максимальна.

Поляризованные образцы стекол подвергались изотермическому отжигу при двух температурах (275 и 400 °С). В процессе отжига измерялся уровень сигнала ГВГ, т. е. определялась кинетика изотермической релаксации ГВГ.

После отжига измерялись ТСТД-спектры в широком интервале температур (от комнатной до температуры стеклования и выше). Эти спектры должны были свидетельствовать либо о полной релаксации объемного заряда после отжига при температурах ниже 400 °С (отсутствие каких-либо пиков), либо определять область температур, в которой действительно происходит релаксация «замороженного» объемного заряда, т. е. движение обратно в прианодную область носителей заряда, создающих в объеме стекла электрическое поле.

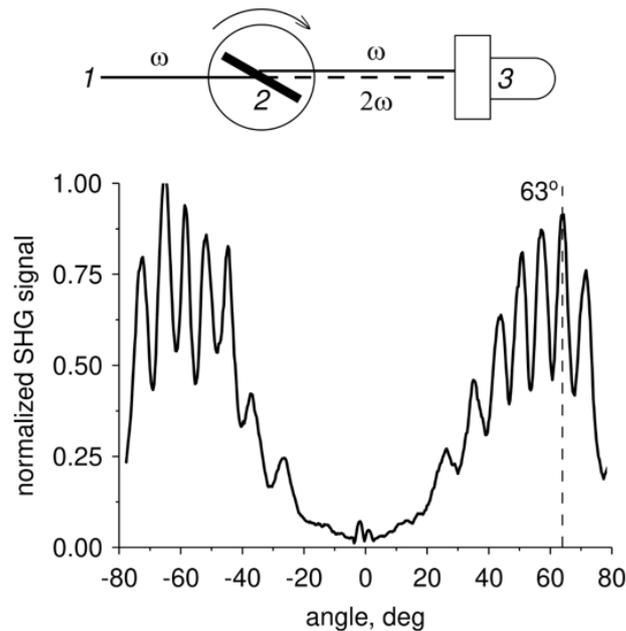


Рис. 3. Схема измерения эффективности ГВГ в поляризованных стеклах: 1 – подаваемое импульсное лазерное излучение ( $\omega$ ); 2 – образец, 3 – фотоприемник; пунктиром показана вторая гармоника ( $2\omega$ ). Представлен также вид измеренной зависимости ГВГ (интенсивности второй гармоники) от угла поворота образца относительно лазерного излучения

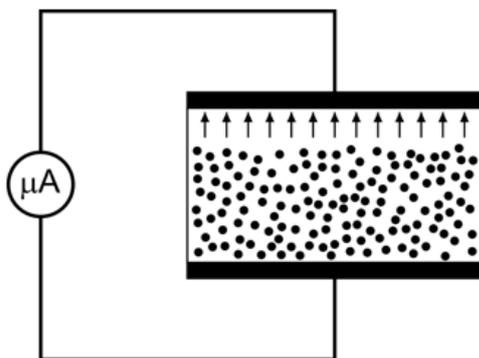


Рис. 4. Схема измерения ТСТД-спектров поляризованных стекол; образцы подвергались линейному нагреву, токи деполяризации измерялись микроамперметром ( $\mu A$ ). Стрелками показано направление движения подвижных катионов (см. рис. 1)

Схема измерений ТСТД-спектров представлена на рис. 4. Спектры измерялись при линейном нагреве со скоростью  $10^\circ C/мин$ , при этом использовались прижимные графитовые электроды.

### Экспериментальные результаты

На рис. 5 (кривая 1) представлена зависимость (в логарифмическом масштабе) интенсивности сигнала ГВГ, нормированной на ее максимальное значение, которая имеет вид  $\ln[I(t)/I_{max}]$ , в поляризованном стекле от времени отжига при  $400^\circ C$ . Можно видеть, что сигнал ГВГ почти полностью релаксировал примерно за 35 мин и снизился до уровня сигнала ГВГ, генерируемого поверхностью неполяризованного стекла.

Линейный характер этой зависимости указывает на то, что релаксация ГВГ подчиняется кинетике первого порядка и в процессе релаксации участвует только один тип релаксатора.

Измерения кинетики релаксации сигнала ГВГ, проведенные с поляризованным образцом стекла при более низкой температуре отжига, а именно при  $275^\circ C$ , показали, что в этом случае кинетика релаксации ГВГ не описывается реакцией первого порядка

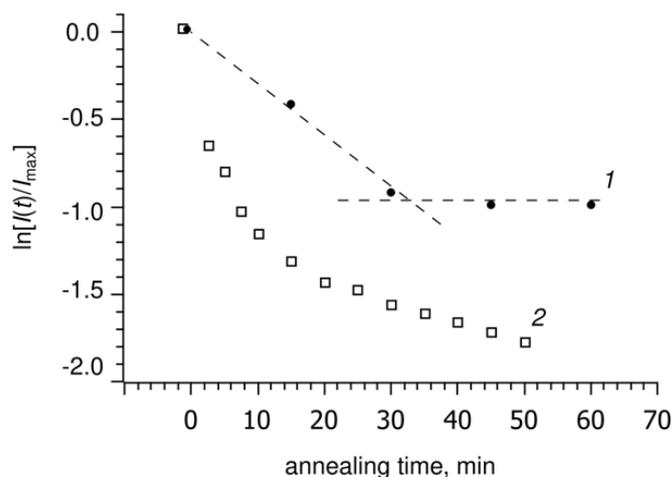


Рис. 5. Кинетика релаксации нормированной ГВГ при температурах отжига стекла 400 °С (1) и 275 °С (2)

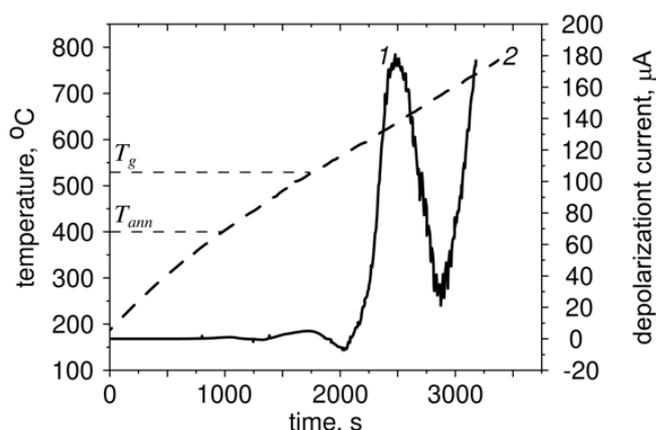


Рис. 6. ТСТД спектр (1) поляризованного стекла после его отжига при 400 °С; наклонным пунктиром (2) показана температурная динамика (температуры отжига  $T_{ann}$  и стеклования  $T_g$  показаны горизонтальными пунктирами)

и число релаксаторов, участвующих в процессе, больше одного (см. рис. 5 (кривая 2)). Сравнение кинетики релаксации ГВГ при температурах 275 и 400 °С позволяет сделать вывод, что при отжиге при 275 °С, в отличие от отжига при 400 °С, в стекле протекает процесс, который невозможно зарегистрировать при 400 °С, поскольку при такой температуре он протекает слишком быстро.

На рис. 6 представлены результаты измерения ТСТД-спектра поляризованного стекла, отожженного при температуре 400 °С в течение 50 мин. Можно видеть, что замет-

ный ток деполяризации появляется только при температурах выше температуры стеклования. Положению первого пика соответствует температура 640 °С. Поскольку ток деполяризации связывают с движением катионов, создающих «замороженный» объемный заряд, пики ТСТД-спектра следует связать именно с процессом релаксации объемного заряда.

### Обсуждение результатов

Согласно общепринятому мнению, которое было упомянуто во введении, появле-



ние ГВГ в поляризованных стеклах связано с тем, что при поляризации заряженные частицы (катионы) сдвигаются в сторону катода, образуя объемный электрический заряд и «замороженное» электрическое поле. Именно это поле нарушает изотропную структуру стекла и приводит к появлению оптической нелинейности второго порядка. Однако настоящее исследование показало, что в ТСТД-спектре стекла, поляризованного и затем отожженного при 400 °С, т. е. при температуре, значительно превышающей температуру отжига, присутствует высокий пик. Этот пик наблюдается при 640 °С (см. рис. 6). Напомним, что появление пиков на спектрах ТСТД поляризованных стекол связано именно с релаксацией объемного заряда. В то же время, 50-минутный отжиг поляризованного стекла при температуре 400 °С приводит к полной деградации сигнала ГВГ (см. рис. 5). Это указывает на то, что ГВГ в поляризованном стекле не связана непосредственно с объемным зарядом, поскольку, согласно данным ТСТД, объемный заряд релаксировал при температуре выше 530 °С (температура стеклования), в то время как температура отжига, обеспечивающая полную релаксацию ГВГ, составляла только 400 °С. Можно предположить, что за ГВГ

ответствен другой механизм, который обусловлен ориентацией дипольных структур, образованных катионами щелочных (или щелочноземельных) элементов, связанными с немостиковыми атомами кислорода.

### Заключение

Таким образом, выполненные эксперименты показали, что 50-минутный отжиг исследованного поляризованного стекла при 400 °С приводит к исчезновению генерации второй гармоники в образце, характерное время релаксации при этом составляет около 30 мин. Измерение термически стимулированного тока деполяризации, протекающего через этот образец, демонстрирует независимость процессов релаксации объемного заряда, вызванного поляризацией стекла, и релаксации генерации второй гармоники. Эти релаксационные процессы происходят при существенно разных температурах и, соответственно, характеризуются различными временами релаксации.

Работа выполнена в рамках Государственного задания «Исследование структур микро- и нанопластики, формируемых в аморфных диэлектриках под действием сильных полей» (код темы 0791-2020-0001).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Poirier G., Dussauze M., Rodriguez V., Adamietz F., Karam L., Cardinal T., Fargin E. Second harmonic generation in sodium tantalum germanate glasses by thermal poling // The Journal of Physical Chemistry. C. 2019. Vol. 123. No. 43. Pp. 26528–26535.
2. Lepicard A., Adamietz F., Rodriguez V., Richardson K., Dussauze M. Demonstration of dimensional control and stabilization of second harmonic electro-optical response in chalcogenide glasses // Optical Materials Express. 2018. Vol. 8. No. 6. Pp. 1613–1624.
3. Nasu H., Suzuki Y., Ohta H., Yamamoto Y., Ito Y., Hashimoto T., Kamiya K., Narasaki A., Tanaka K., Hirao K. Second-harmonic generation from thermally poled mixed alkali silicate glasses containing various alkaline-earth oxides // Japanese Journal of Applied Physics. Part 1: Regular Papers and Short Notes and Review Papers. 2000. Vol. 39. No. 12A. Pp. 6530–6534.
4. Le Calvez A., Freysz E., Ducasse A. A model for second harmonic generation in poled glasses // The European Physical Journal. D. Atomic, Molecular and Optical Physics. 1998. Vol. 1. No. 2. Pp. 223–226.
5. Lipovskii A., Morozova A., Tagantsev D. Giant discharge current in thermally poled silicate glasses // The Journal of Physical Chemistry. C. 2016. Vol. 120. No. 40. Pp. 23129–23135.
6. Menczel J.D., Prime R.B. (Eds.) Thermal analysis of polymers: Fundamentals and applica-

tions. Hoboken (USA, New Jersey): John Wiley & Sons, Inc., 2009. 688 p.

7. **Raskhodchikov D., Reshetov I., Brunkov P., Kaasik V., Lipovskii A., Tagantsev D.** Mechanism of thermal charge relaxation in poled silicate glasses in a wide temperature range (from liquid nitrogen to glass melting temperature) // The Journal of Physical Chemistry. B. 2020. Vol. 124. No. 36. Pp. 7948–7956.

8. **Smith N., Regier T., Dutta I.** Structure and composition of surface depletion layers in poled aluminosilicate glasses // Journal of the American

Ceramic Society. 2019. Vol. 102. No. 6. Pp. 1–26.

9. **Karam L., Adamietz F., Rodriguez V., Bondu F., Lepicard A., Cardinal T., Fargin E., Richardson K., Dussauze M.** The effect of the sodium content on the structure and the optical properties of thermally poled sodium and niobium borophosphate glasses // Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 128. No. 4. P. 043106.

10. **Maker P.D., Terhune R.W., Nesenoff M., Savage C.M.** Effects of dispersion and focusing on the production of optical harmonics // Physical Review Letters. 1962. Vol. 8. No. 1. Pp. 21–22.

*Статья поступила в редакцию 14.09.2020, принята к публикации 20.09.2020.*

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**РЕШЕТОВ Илья Валентинович** – инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, инженер Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
reshetov\_iv@spbstu.ru

**КААСИК Владимир Паулович** – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
vkaasik@yandex.ru

**ЛИПОВСКИЙ Андрей Александрович** – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, профессор Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
lipovskii@mail.ru

**ТАГАНЦЕВ Дмитрий Кириллович** – доктор химических наук, профессор Высшей школы физики и технологий материалов Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, ведущий научный сотрудник Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
tagan@dt1386.spb.edu



**ЖУРИХИНА Валентина Владимировна** – доктор физико-математических наук, директор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, ведущий научный сотрудник Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

## REFERENCES

1. **Poirier G., Dussauze M., Rodriguez V., et al.**, Second harmonic generation in sodium tantalum germanate glasses by thermal poling, *The Journal of Physical Chemistry*, C. 123 (43) (2019) 26528–26535.
2. **Lepicard A., Adamietz F., Rodriguez V., et al.**, Demonstration of dimensional control and stabilization of second harmonic electro-optical response in chalcogenide glasses, *Optical Materials Express*. 8 (6) (2018) 1613–1624.
3. **Nasu H., Suzuki Y., Ohta H., et al.**, Second harmonic generation from thermally poled mixed alkali silicate glasses containing various alkaline-earth oxides, *Japanese Journal of Applied Physics, Part 1: Regular Papers and Short Notes and Review Papers*. 39 (12 A) (2000) 6530–6534.
4. **Le Calvez A., Freysz E., Ducasse A.**, A model for second harmonic generation in poled glasses, *The European Physical Journal D: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 1 (2) (1998) 223–226.
5. **Lipovskii A., Morozova A., Tagantsev D.**, Giant discharge current in thermally poled silicate glasses, *The Journal of Physical Chemistry C*. 120 (40) (2016) 23129–23135.
6. **Menczel J.D., Prime R.B.** (Eds.), *Thermal analysis of polymers: Fundamentals and applications*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken (USA, New Jersey), 2009.
7. **Raskhodchikov D., Reshetov I., Brunkov P., et al.**, Mechanism of thermal charge relaxation in poled silicate glasses in a wide temperature range (From liquid nitrogen to glass melting temperature), *The Journal of Physical Chemistry B*. 124 (36) (2020) 7948–7956.
8. **Smith N., Regier T., Dutta I.**, Structure and composition of surface depletion layers in poled aluminosilicate glasses, *Journal of the American Ceramic Society*. 102 (6) (2019) 1–26.
9. **Karam L., Adamietz F., Rodriguez V., et al.**, The effect of the sodium content on the structure and the optical properties of thermally poled sodium and niobium borophosphate glasses, *Journal of Applied Physics*. 128 (4) (2020) 043106.
10. **Maker P.D., Terhune R.W., Nesenoff M., Savage C.M.**, Effects of dispersion and focusing on the production of optical harmonics, *Physical Review Letters*. 8 (1) (1962) 21–22.

*Received 14.09.2020, accepted 20.09.2020.*

## THE AUTHORS

**RESHETOV Ilya V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

*Alferov University*

8/3 Khlopina, St. Petersburg, 194021, Russian Federation

reshetov\_iv@spbstu.ru

**KAASIK Vladimir P.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

*Alferov University*

8/3 Khlopina, St. Petersburg, 194021, Russian Federation

vkaasik@yandex.ru

**LIPOVSKII Andrey A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

*Alferov University*

8/3 Khlopina, St. Petersburg, 194021, Russian Federation

lipovskii@mail.ru

**TAGANTSEV Dmitry K.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

*Alferov University*

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

tagan@dt1386.spb.edu

**ZHURIKHINA Valentina V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

*Alferov University*

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

jourikhina@mail.ru



DOI: 10.18721/JPM.13410

УДК 621.373.8

## ЭФФЕКТИВНЫЙ МОДОВЫЙ ОБЪЕМ И ОЦЕНКА МОЩНОСТИ ВЫХОДНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ГЕЛИЙ-НЕОНОВОГО ЛАЗЕРА

**В.А. Кожевников, В.Е. Привалов, А.Э. Фотиади**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В статье на примере He-Ne лазера рассмотрена связь генерируемой мощности с модовым объемом основной моды резонатора типа плоскость – сфера. Предложен метод оценки мощности излучения газоразрядного лазера с произвольной формой поперечного сечения активного элемента, в основе которого лежит величина объема генерирующей моды. Показано, что результаты расчетов генерируемой мощности, проводимых на основе эффективного модового объема, учитывающего поперечное распределение инверсии населенностей активной среды, находятся в лучшем согласии с экспериментальными данными и результатами оценок, использующих другие методики.

**Ключевые слова:** эффективный модовый объем, инверсия населенностей, мощность гелий-неонового лазера, лазерное излучение

**Ссылка при цитировании:** Кожевников В.А., Привалов В.Е., Фотиади А.Э. Эффективный модовый объем и оценка мощности выходного излучения гелий-неонового лазера // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 119–132. DOI: 10.18721/JPM.13410

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## THE EFFECTIVE MODE VOLUME AND ESTIMATION OF HELIUM-NEON LASER OUTPUT POWER

**V.A. Kozhevnikov, V.E. Privalov, A.E. Fotiadi**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation

The relationship between the generated power and the mode volume of the fundamental mode of a plane-sphere resonator is considered in the article exemplified a He-Ne laser. A novel technique based on the volume of the generating mode has been proposed to estimate the output radiation power of a gas-discharge laser with an arbitrary cross-sectional shape of an active element. It was shown that the results of calculations of the generated power, carried out on the basis of the effective mode volume, which took into account the transverse distribution of the population inversion of the active medium, were in better agreement with the experimental data and the results of estimates using other methods.

**Keywords:** mode volume, effective mode volume, population inversion, He-Ne laser power

**Citation:** Kozhevnikov V.A., Privalov V.E., Fotiadi A.E., The effective mode volume and estimation of helium-neon laser output power, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 119–132. DOI: 10.18721/JPM.13410

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Широкое применение гелий-неонового лазера в настоящее время в метрологии (эталоны времени, частоты и длины), спектроскопии, промышленных и исследовательских задачах (лазерные интерферометры), обусловленное высочайшей когерентностью его излучения, делает крайне актуальной задачу поиска резервов повышения мощности излучения таких объектов. Исследования [1, 2] показывают, что изменение геометрии поперечного сечения разрядной трубки может привести к росту как коэффициента усиления, так и выходной мощности лазера.

В данном исследовании нами предложен и реализован метод оценки мощности газоразрядных лазеров, основанный на понятии эффективного модового объема генерирующей моды; предложенный метод учитывает поперечное распределение инверсии в активном элементе с произвольным поперечным сечением.

В данной работе мы ограничиваемся рассмотрением модового объема основной моды резонатора типа плоскость – сфера и цилиндрической геометрией лазерного активного элемента с различным поперечным распределением инверсии населенности. С этой целью используется понятие конфокального резонатора. Однако предварительный анализ применимости нашего метода для оценки уровня генерируемой мощности показал хорошие результаты и для других сечений.

### Основные теоретические предпосылки

Напомним основные результаты, полученные в классических работах [3 – 7]. Для оптического резонатора с радиусами кривизны зеркал  $R_1$  и  $R_2$  и расстоянием между зеркалами  $d$  радиус кривизны соответствующего эквивалентного конфокального резонатора  $R_e$  находится по формуле

$$R_e = \{4S(R_1 - S)\}^{1/2},$$

где  $S = d(R_2 - d)/(R_1 + R_2 - 2d)$ .

Для резонатора плоскость – сфера ( $R_1 = \infty$ ,  $R_2 = R$ ) отсюда получим следующее выражение:

$$R_e = 2\{d(R - d)\}^{1/2},$$

где  $R$  – радиус кривизны сферического зеркала.

В конфокальном резонаторе модуль электрического поля  $|E_{00}|$  основной гауссовой моды  $TEM_{00}$  в цилиндрических координатах ( $r$ ,  $z$ ,  $\varphi$ ) имеет вид:

$$|E_{00}| = E_0 \sqrt{\frac{2}{1 + \xi^2}} \times \exp\left[-\frac{kr^2}{R_e(1 + \xi^2)}\right], \quad (1)$$

где  $\xi = 2z/R_e$ ,  $k = 2\pi/\lambda$ , а координата  $z$  отсчитывается от перемычки гауссового пучка (для резонатора плоскость – сфера она будет у плоского зеркала);  $E_0$  – значение  $|E_{00}|$  при  $\xi = 1$  и  $r = 0$ .

Поперечный размер генерируемой моды (радиус пучка  $w_z$  в точке с координатой  $z$ ) определяется значением координаты  $r$  до боковой поверхности модового объема, где напряженность электрического поля меньше таковой на оси, в данном поперечном сечении, в  $e$  раз:

$$w_z^2 = w_0^2 \left[ 1 + \left( \frac{2z}{R_e} \right)^2 \right],$$

где  $w_0^2 = \frac{R_e \lambda}{2\pi} = \frac{R_e}{k}$ .

Соответственно, радиус пучка на плоском зеркале  $w_1$  выражается как

$$w_0 = \sqrt{R_e \lambda / 2\pi} = \{\lambda R_e / (2\pi)\}^{1/2},$$

а на сферическом  $w_2$  он будет в  $\{R/(R - d)\}^{1/2}$  раз больше.

Энергетической характеристикой основной моды принято считать модовый объем (MV) резонатора [6]:



$$MV = \int_0^{2\pi} \int_0^d \int_0^{w_z} d\varphi dz r dr, \quad (2)$$

где  $w_z$  – радиус пучка;

$$w_z = \sqrt{\frac{1}{k} \left( R_e + \frac{4}{R_e} z^2 \right)}.$$

Из формул (1) и для  $w_z$  следует, что значения интенсивностей поля на оси у плоского и сферического зеркал не одинаковы, а различаются в  $\{R/(R-d)\}^{1/2}$  раз, и соответственно так же отличаются интенсивности на боковых границах модового объема у зеркал.

Мощность выходного излучения лазера определяется уровнем взаимодействия активного вещества в модовом объеме с полем, т. е. зависит как от распределения поля в модовом объеме генерирующей моды, так и от распределения в нем инверсии населенностей активной среды  $\Delta N$ . В первом приближении теории возмущений мощность индуцированного излучения можно считать пропорциональной произведению  $E^2 \Delta N$ .

Одной из первых работ, где было обращено внимание на связь мощности излучения с распределением поля в генерирующей моде, была статья [8]. В ней был введен эффективный модовый объем, обозначенный как EMV и ограниченный линиями равной интенсивности, соответствующей значению интенсивности поля на границе MV, находящейся на сферическом зеркале.

Из формулы (1) и условия  $|E|^2 = E_0^2 / e^2$  можно получить уравнение границы модового объема EMV. Это фигура вращения с сечением в виде круга радиуса  $\sigma$ , зависящим от  $z$ :

$$\sigma^2 = \frac{w^2}{2} \left( 2 + \ln 2 - \ln \frac{w^2 k}{R_e} \right).$$

Тогда выражение для EMV примет вид:

$$\begin{aligned} EMV &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^d dz \int_0^{\sigma} r dr = \\ &= \left( 1 + \frac{\ln 2}{2} \right) MV - \\ &- \frac{\pi R_e^2}{k} \left\{ \frac{d}{2R_e} \left( 1 + \frac{4d^2}{3R_e^2} \right) \ln \left( 1 + \frac{4d^2}{R_e^2} \right) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{3} \arctg \frac{2d}{R_e} - \frac{2d}{3R_e} - \frac{4d^3}{9R_e^3} \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Хотя в работе [8] и считалось возможным влияние распределения инверсии населенностей активной среды на величину модового объема, но в самом определении модового объема EMV это распределение не учитывалось.

В связи с вышеизложенным, в данной работе мы предлагаем новую величину для оценки выходной мощности излучения лазера, вводя новый эффективный модовый объем, учитывающий оба указанных факта.

### Понятие нового эффективного модового объема

Определим новый эффективный модовый объем (NMV) как тело, ограниченное поверхностью, где величина  $|E|^2 \Delta N$  спадает в  $e^2$  раз, по сравнению с величиной  $E_0^2 \Delta N_0$  ( $\Delta N_0$  – инверсия населенностей на оси).

Иными словами, значение  $E_0^2 \Delta N_0$  – это значение величины  $|E|^2 \Delta N$  на оси на расстоянии  $R_e/2$  от перемычки гауссова пучка, т. е. для полуконфокального резонатора это значение величины  $|E|^2 \Delta N$  на оси у сферического зеркала.

Таким образом, для цилиндрической разрядной трубки с осевой симметрией инверсии населенностей, эффективный модовый объем NMV является фигурой вращения, которая имеет сечение в виде круга радиуса  $\rho$ , зависящее от  $z$ :

$$NMV = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^d dz \int_0^{\rho} r dr; \quad (4)$$

при этом радиус  $\rho$  должен быть таким, что

$$\Delta N(\rho, z) |E(\rho, z)|^2 = \Delta N_0 E_0^2 / e^2.$$

### Пример оценки выходной мощности лазера

Рассмотрим для примера алгоритм оценки выходной мощности излучения гелий-неонового лазера. При оптимальном соотношении компонентов смеси и оптимальных разрядных условиях [9], разряд такого лазера можно считать диффузионным. Концентрация электронов  $n_e$  в таком разряде удовлетворяет следующему диффузионному уравнению (однородное уравнение Гельмгольца):

$$\begin{aligned} \Delta n_e + \frac{1}{D_a \tau} n_e &= \Delta n_e + \frac{1}{\Lambda^2} n_e = \\ &= \Delta n_e + \lambda^2 n_e = 0, \end{aligned}$$

где  $D_a$  – коэффициент амбиполярной диффузии,  $\tau$  – время диффузионного ухода.

Распределение инверсии населенностей  $\Delta N$  в гелий-неоновом лазере можно считать (в первом приближении) подобным распределению электронов в активной среде. В указанных средах цилиндрической геометрии, радиальное распределение концентрации электронов, а следовательно, и инверсной заселенности  $\Delta N$  гелий-неоновой смеси, получаемое как решение диффузионного уравнения, имеет следующий вид [10 – 14]:

$$\Delta N = \Delta N_0 J_0(\mu_1^{(0)} r/a),$$

где  $a$  – радиус трубки;  $r$  – расстояние до оси;  $J_0$  – функция Бесселя нулевого порядка;  $\mu_1^{(0)}$  – первый корень функции  $J_0$ ,  $\mu_1^{(0)} = 2,4048$ .

В первом приближении и для нецилиндрической геометрии активного элемента, распределение инверсии населенностей  $\Delta N$  в рассматриваемом лазере можно полагать подобным распределению электронов в диф-

фузионном разряде. Следовательно, можно приближенно считать, что и в этом случае распределение инверсии населенностей активной среды  $\Delta N$  для лазера удовлетворяет однородному уравнению Гельмгольца

$$\Delta(\Delta N) + \lambda^2 \Delta N = 0 \quad (5)$$

с однородным граничным условием

$$\Delta N|_{\Gamma} = 0, \quad (6)$$

где  $\Gamma$  – граница поперечного сечения активного элемента.

В статье [15] нами предложен метод нахождения приближенного решения уравнений (5), (6) для произвольной формы границы  $\Gamma$ , обладающий небольшой вычислительной сложностью.

Суть предлагаемого метода оценки выходной мощности излучения лазера заключается в том, что эта мощность для лазера с произвольной геометрией поперечного сечения активного элемента также следует оценивать с помощью фазового объема NMV по следующей формуле:

$$P = \iiint_{NMV} \varepsilon |E|^2 \Delta N dV, \quad (7)$$

где  $\varepsilon$  – соответствующий коэффициент пропорциональности.

При этом определение мощности состоит из следующих этапов:

– расчет инверсии населенностей активной среды  $\Delta N$  путем решения уравнений (5), (6) (например, методом, предложенным в статье [15]);

– нахождение границы эффективного модового объема NMV;

– непосредственное интегрирование по формуле (7).

Проверим возможности предложенного метода оценки мощности излучения на примере лазера с цилиндрической формой ак-

тивного элемента.

Для цилиндрической трубки несложно получить, с учетом явного вида  $\Delta N$ , что модовый объем NMV основной моды конфокального резонатора есть фигура вращения, которая имеет сечение, зависящее от  $z$ , в виде круга радиуса  $\rho$ , такого, что

$$\left\{ 2 + \ln 2 - \ln(w^2 k / R_e) - 2r^2 / w^2 + \ln(J_0(\mu_1^0 r / a)) \right\} \Big|_{r=\rho} = 0. \quad (8)$$

Уравнение (8) можно решить численно и найти соответствующую функцию  $\rho(z)$ .

Для дальнейших расчетов возьмем следующие параметры лазерной трубки, типичной для гелий-неонового лазера:

$$a = 2 \text{ мм}, d = 55 \text{ см}, \lambda = 0,6328 \text{ мкм},$$

$R$  изменяется от 0,6 до 4,0 м.

Функцию Бесселя представим в виде

$$J_0(x) \approx 1 - x^2/4 + x^4/64.$$

Зависимости функций  $\rho(z)$ ,  $\sigma(z)$  и  $w(z)$  при  $R = 1,1$  и  $2,0$  м приведены на рис. 1. Зависимости NMV, EMV и MV для разных значений  $R$  приведены на рис. 2, где по оси ординат отложен относительный модовый объем  $\eta$ , равный отношению фазовых объемов NMV, EMV и MV к полному объему трубки  $V = \pi a^2 d$ . Видно, что объемы NMV и EMV в целом (при  $R > 0,8$  м) несколько превышают величину MV и составляют единицы процентов от полного объема  $V$ .

Как отмечалось в статье [8], для оценки мощности излучения лазера с помощью модового объема MV, и при этом с частичным учетом инверсии населенности, можно использовать формулу

$$P_{MV} = \int_0^{2\pi} \int_0^d \int_0^w \epsilon E^2 \Delta N d\varphi dz dr.$$

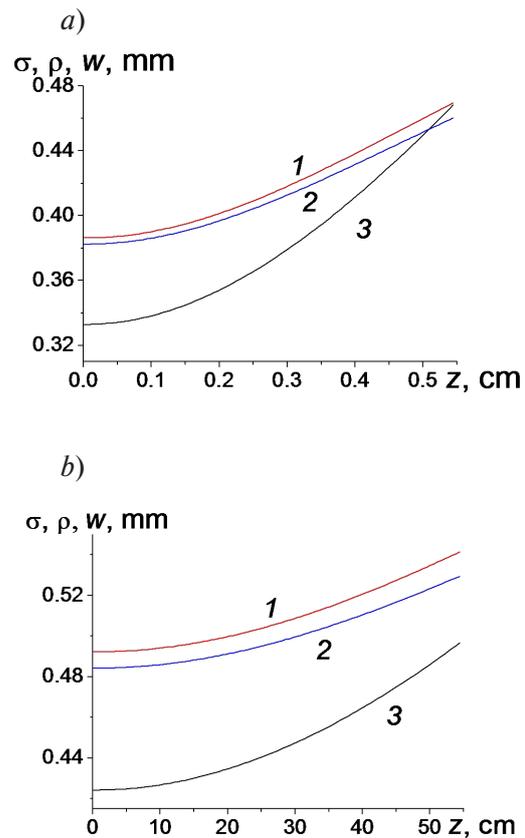


Рис. 1. Зависимости радиусов кругового сечения разрядной трубки  $\sigma$  (кривая 1), границы модового объема EMV  $\rho$  (2) и пучка излучения  $w$  (3) гелий-неонового лазера от координаты  $z$  для значений кривизны зеркала  $R$ , м: 1,1 (а) и 2,0 (б); значения параметров лазерной трубки:  $a = 2$  мм,  $d = 55$  см,  $\lambda = 0,6328$  мкм

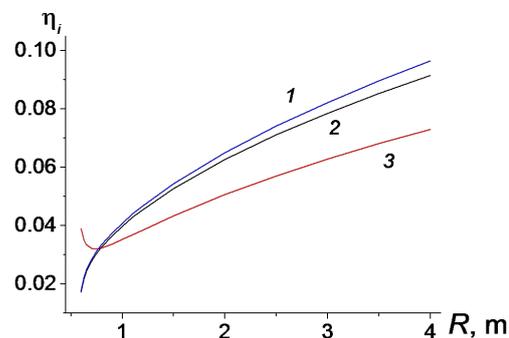


Рис. 2. Зависимости относительных модовых объемов  $\eta_i = EMV/V$  (1),  $NMV/V$  (2),  $MV/V$  (3) от кривизны зеркала  $R$ .

Значения параметров лазерной трубки:  $a = 2$  мм,  $d = 55$  см,  $\lambda = 0,6328$  мкм

Полагая, что

$$\Delta N = \Delta N_0 J_0(\mu_1^{(0)} r/a)$$

и используя разложение функции Бесселя в виде

$$J_0(x) \approx 1 - x^2/4 + x^4/64,$$

получаем:

$$P_{MV} = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0 \varepsilon}{k} \left\{ \frac{1 - e^{-2}}{2} d \sqrt{d(R-d)} - \frac{\mu_1^{(0)2}}{24} (1 - 3e^{-2}) \times \frac{d^2}{a^2 k} (3R - 2d) + \frac{\mu_1^{(0)4} (1 - 5e^{-2})}{960} \times \frac{d^{5/2} (8d^2 - 20Rd + 15R^2)}{a^4 k^2 \sqrt{R-d}} \right\} \quad (9)$$

При использовании предлагаемого в данной работе расчетного метода и понятия фазового объема NMV, выражение для мощности излучения лазера запишется следующим образом:

$$P_{NMV} = \int_0^{2\pi} \int_0^d \int_0^{\rho} \varepsilon E^2 \Delta N d\varphi dz r dr = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0 \varepsilon}{k} 2\sqrt{d(R-d)} \times \int_0^d dz \left\{ \frac{1 - \exp(-2\rho^2/w^2)}{4} - \frac{\mu_1^{(0)2}}{32a^2} (w^2 - (w^2 + 2\rho^2)) \times \exp(-2\rho^2/w^2) \right\} +$$

$$+ \frac{\mu_1^{(0)4}}{512a^4} (w^4 - (w^4 + 2w^2\rho^2 + 2\rho^4)) \times \exp(-2\rho^2/w^2) \Big\}.$$

### Сравнение предлагаемого метода с традиционными

Величину (10) целесообразно сравнить с оценкой выходной мощности лазера при использовании фазового объема EMV и всего объема трубки  $V$ :

$$P_{EMV} = \int_0^{2\pi} \int_0^d \int_0^{\sigma} \varepsilon E^2 \Delta N d\varphi dz r dr = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0 \varepsilon}{k} 2\sqrt{d(R-d)} \times \int_0^d dz \left\{ \frac{1 - \exp(-2\sigma^2/w^2)}{4} - \frac{\mu_1^{(0)2}}{32a^2} (w^2 - (w^2 + 2\sigma^2)) \times \exp(-2\sigma^2/w^2) \right\} + \frac{\mu_1^{(0)4}}{512a^4} (w^4 - (w^4 + 2w^2\sigma^2 + 2\sigma^4)) \times \exp(-2\sigma^2/w^2) \Big\}; \quad (11)$$

$$P_V = \int_0^{2\pi} \int_0^d \int_0^a \varepsilon E^2 \Delta N d\varphi dz r dr = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0 \varepsilon}{k} 2\sqrt{d(R-d)} \times \int_0^d dz \left\{ \frac{1 - \exp(-2a^2/w^2)}{4} - \frac{\mu_1^{(0)2}}{32a^2} (w^2 - (w^2 + 2a^2)) \times \exp(-2a^2/w^2) \right\} +$$

$$+ \frac{\mu_1^{(0)4}}{512a^4} \left( w^4 - (w^4 + 2w^2a^2 + 2a^4) \times \exp(-2a^2/w^2) \right)$$

Результаты вычислений представленных величин приведены на рис. 3.

Видно, что оценки мощности лазера, полученные при помощи величин NMV и EMV, при распределении инверсии населенности, заданной функцией Бесселя, оказываются примерно одинаковыми. На рис. 3, b показан участок зависимостей  $P_{EMV}/\alpha$  и  $P_{NMV}/\alpha$  от  $R$  в

большем масштабе, в окрестности значений  $R$ , соответствующих полуконфокальному резонатору.

Одной из причин введения эффективного модового объема в работе [8] было расхождение экспериментальных данных с расчетной оценкой мощности, при использовании величины MV, по формуле (9); оказалось, что экспериментальные значения превышали расчетные примерно на 10 %.

Результаты, приведенные на рис. 3, показывают, что оценки мощности лазера с помощью NMV и EMV уже дают хорошее согласие с экспериментом.

### Влияние различных факторов на мощность лазера

В экспериментах, описанных в статьях [16 – 19], наблюдалась связь между радиальным распределением инверсии населенностей  $\Delta N$  и выходной мощностью лазера: изменение  $\Delta N$  может менять мощность на величину порядка 10 %.

#### Радиальное распределение инверсии.

Оценим влияние радиального распределения инверсии с помощью предлагаемого метода, рассчитывая значения мощностей без учета указанного распределения. Для получения таких значений следует в формулах (9) – (12) формально положить  $\mu_1^{(0)} = 0$ . Результаты таких вычислений приведены на рис. 4. Видно, что как с учетом радиального распределения инверсии населенностей, так и без его учета, оценка мощности с помощью величин NMV и EMV дает несколько большие различия, чем с помощью MV, что лучше согласуется с экспериментами. Тот результат, при котором максимальное отличие экспериментальных данных от расчетных получалось несколько большим, объясняется выбранным способом оценки, а именно: если  $\mu_1^{(0)} = 0$ , то значение  $\Delta N$  остается постоянным по сечению; тогда как в эксперименте на оси может получаться и локальный минимум  $\Delta N$  [13], обусловленный определенным соотношением парциальных давлений гелия и неона. Очевидно, что наличие минимума даст большее различие в величине мощности, по сравнению с

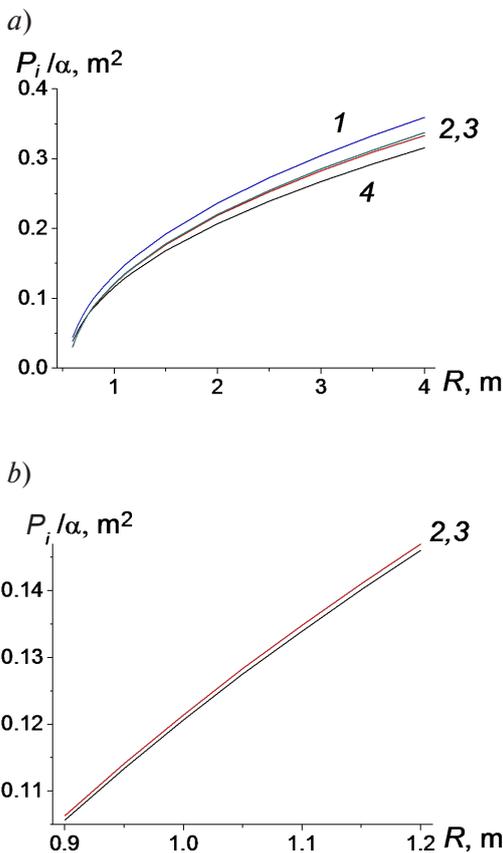


Рис. 3. Сравнение зависимостей нормализованных величин выходной мощности  $P_i/\alpha$  (1),  $P_{EMV}/\alpha$  (2),  $P_{NMV}/\alpha$  (3) и  $P_{MV}/\alpha$  (4) гелий-неонового лазера от кривизны зеркала  $R$ , рассчитанных по формулам (9) – (12) (a); отдельно приведены данные расчета по формулам (10), (11) (b) – этот график увеличен для различения кривых 2 и 3;

$$\alpha = 4\pi E_0^2 \Delta N_0 \varepsilon / k$$

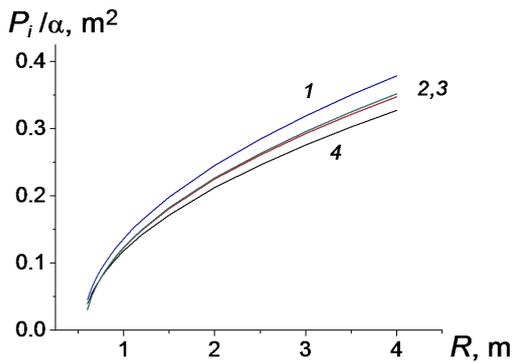


Рис. 4. Сравнение зависимостей, аналогичных приведенным на рис. 3, но рассчитанных при условии  $\mu_1^{(0)} = 0$

оптимальным соотношением, когда величина  $\Delta N$  описывается функцией Бесселя.

С другой стороны, мощность выходного излучения гелий-неонового лазера с цилиндрической трубкой можно оценивать по известной методике [20, 21], дающей отличное согласие с экспериментом. В соответствии с этой методикой, мощность излучения описывается следующей формулой:

$$P = Aw_0 G_m \left[ 1 - (a_s / G_m)^{1/2} \right]^2 \times \pi w_1^2 \left[ 1 - \exp(-2r_0^2 / w_1^2) \right], \quad (13)$$

где  $Aw_0$  – коэффициент насыщения,  $Aw_0 = 30 \text{ Вт/см}^2$  [20, 21];  $G_m$  – суммарный ненасыщенный коэффициент усиления в центре доплеровски уширенного контура усиления атомов неона,  $G_m = 3 \cdot 10^{-4} l / (2r_0)$  [20 – 22];  $r_0$ ,  $l$  – радиус капилляра и длина активной части капилляра;  $a_s$  – суммарный коэффициент потерь;  $w_1$  – радиус пучка на выходном зеркале,  $w_1 = \{\lambda R_e / (2\pi)\}^{1/2}$ .

Опишем на примере лазера ЛГН-222 вклады в суммарный коэффициент  $a_s$  [23]:

$a_1$  – потери на поглощение в каждом окне Брюстера параллельно расположенных активных элементов;

$a_2$  – потери при отражении от зеркал резонатора,

$a_3$  – дифракционные потери,

$a_4$  – прочие неучтенные потери.

Перечисленные вклады в суммарный коэффициент  $a_s$  для лазера ЛГН-222 ( $r_0 = 1,5 \text{ мм}$ ,  $l = 2 \text{ м}$ ) можно оценить, используя значения, приведенные в работе [23]:

$$a_1 = 3 \cdot 10^{-3}, a_2 = 6 \cdot 10^{-3}, a_4 = 2 \cdot 10^{-3}.$$

Для оценки дифракционных потерь  $a_3$  целесообразно использовать асимптотическое представление обобщенных радиальных функций [24, 25] или эмпирическую коррекцию [26]:

$$\alpha_{pm} = \frac{2\pi(4c - 4,52)^{2p+m+1}}{p!(p+m)!} e^{-2c},$$

где  $p, m$  – параметры моды (для основной гауссовой моды  $p = m = 0$ ),  $c = 2\pi N$  ( $N$  – параметр Френеля).

Параметр Френеля для эквивалентного конфокального резонатора следует выражению

$$N_i = a_i^2 \left\{ g_i (1 - g_i g_k) / g_k \right\}^{1/2} / (\lambda d),$$

где  $a_i$  – апертура резонатора;  $i, k$  – индексы половин резонатора,  $i, k = 1, 2$ ;  $g_i$  – параметр конфигурации резонатора,  $g_i = 1 - d/R_i$ .

Сравнение мощностей, рассчитанных по формулам (10) и (13), представлено на рис. 5. Для наглядности значения  $P_{NMV}/\alpha$  и  $P$  нормированы, с тем чтобы они совпадали для полуконфокального резонатора ( $d = 2 \text{ м}$ ,  $R = 4 \text{ м}$ ) (введен соответствующий нормировочный множитель  $\gamma$ ). Видно, что оценивание мощности лазера с помощью величины NMV дает очень хорошее согласие с расчетом по формуле (13).

**Случай высокой мощности лазера.** Со всем другой вид зависимости должен получиться в случае высокой мощности лазера, когда возможны нелинейные эффекты. В этом случае предлагается оценивать мощность лазера  $P^{nl}$  по следующей формуле [27]:

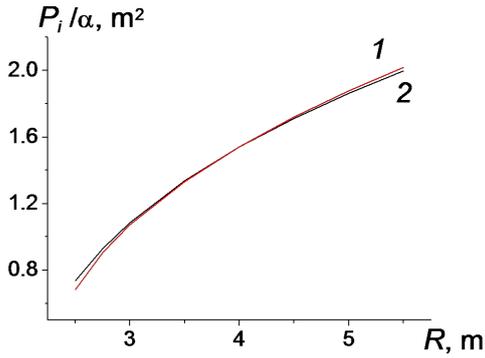


Рис. 5. Сравнение зависимостей мощности гелий-неонового лазера, рассчитанных по традиционной методике,  $-P/\gamma$  (1), с полученной по предлагаемой методике  $-P_{\text{NMV}}/\alpha$  (2), от кривизны зеркала  $R$  (см. формулы (10) и (13)); значения параметров лазерной трубки:  $a = 1,5$  мм,  $d = 2$  м,  $\lambda = 0,6328$  мкм

$$P^{nl} = P_0 \frac{\int_V E^2 \Delta N dV}{\int_V E^4 \Delta N dV}, \quad (14)$$

где  $P_0$  – константа.

Найдем выражения для случаев высокой мощности, используя величины MV, NMV, EMV и полный объем  $V$ .

Соответственно получим:

$$P_{\text{MV}}^{nl} = P_0 \frac{\int_{\text{MV}} E^2 \Delta N dV}{\int_{\text{MV}} E^4 \Delta N dV} = P_0 \frac{P_{\text{MV}}}{F_{\text{1MV}}}, \quad (15)$$

где  $P_{\text{MV}}$  описывается формулой (7), а знаменатель  $F_{\text{1MV}}$  рассчитывается по формуле

$$F_{\text{1MV}} = \left\{ \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0}{k} \frac{8E_0^2 d(R-d)}{k} \times \right. \\ \left. \times \left( k \frac{1-e^{-4}}{16} \arctg \frac{d}{\sqrt{d(R-d)}} - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \frac{\mu_1^{(0)2}}{128a^2} (1-5e^{-4}) d + \frac{\mu_1^{(0)4} (1-13e^{-4})}{6144a^4 k} \times \frac{d^2 (3R-2d)}{\sqrt{d(R-d)}} \right) \right\}.$$

Далее,

$$P_{\text{NMV}}^{nl} = P_0 \frac{\int_{\text{NMV}} E^2 \Delta N dV}{\int_{\text{NMV}} E^4 \Delta N dV} = P_0 \frac{P_{\text{NMV}}}{F_{\text{1NMV}}}, \quad (16)$$

где  $P_{\text{NMV}}$  описывается формулой (8), а знаменатель  $F_{\text{1NMV}}$  рассчитывается по формуле

$$F_{\text{1NMV}} = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0}{k} \frac{8E_0^2 d(R-d)}{k} \times \\ \times \int_0^d dz \left( \frac{1 - \exp(-4\rho^2/w^2)}{8w^2} - \right. \\ \left. - \frac{\mu_1^{(0)2}}{128a^2 w^2} (w^2 - (w^2 + 4\rho^2)) \times \right. \\ \left. \times \exp(-4\rho^2/w^2) \right) + \\ + \frac{\mu_1^{(0)4}}{4096a^4 w^2} (w^4 - (w^4 + 4w^2\rho^2 + 8\rho^4)) \times \\ \times \exp(-4\rho^2/w^2).$$

Аналогично,

$$P_{\text{EMV}}^{nl} = P_0 \frac{\int_{\text{EMV}} E^2 \Delta N dV}{\int_{\text{EMV}} E^4 \Delta N dV} = P_0 \frac{P_{\text{EMV}}}{F_{\text{1EMV}}}, \quad (17)$$

где  $P_{\text{EMV}}$  описывается формулой (9), а знаменатель  $F_{\text{1EMV}}$  рассчитывается по формуле

$$F_{\text{IEMV}} = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0}{k} \frac{8E_0^2 d(R-d)}{k} \times \int_0^d dz \left( \frac{1 - \exp(-4\sigma^2/w^2)}{8w^2} - \frac{\mu_1^{(0)2}}{128a^2 w^2} (w^2 - (w^2 + 4\sigma^2)) \times \exp(-4\sigma^2/w^2) + \frac{\mu_1^{(0)4}}{4096a^4 w^2} (w^4 - (w^4 + 4w^2\sigma^2 + 8\sigma^4)) \times \exp(-4\sigma^2/w^2) \right).$$

И наконец,

$$P_V^{nl} = \frac{P_0 \int_V E^2 \Delta N dV}{\int_V E^4 \Delta N dV} = \frac{P_0 P_V}{F_{1V}}, \quad (18)$$

где  $P_V$  описывается формулой (10), а знаменатель  $F_{1V}$  рассчитывается по формуле

$$F_{1V} = \frac{4\pi E_0^2 \Delta N_0}{k} \frac{8E_0^2 d(R-d)}{k} \times \int_0^d dz \left( \frac{1 - \exp(-4a^2/w^2)}{8w^2} - \frac{\mu_1^{(0)2}}{128a^2 w^2} (w^2 - (w^2 + 4a^2)) \times \exp(-4a^2/w^2) + \frac{\mu_1^{(0)4}}{4096a^4 w^2} (w^4 - (w^4 + 4w^2 a^2 + 8a^4)) \times \exp(-4a^2/w^2) \right).$$

Результаты расчетов по формулам (15) – (18) приведены на рис. 6 ( $\beta = P_0 / E_0^2$ ).

Соотношения между  $P_{\text{MV}}^{nl}/\beta$ ,  $P_{\text{NMV}}^{nl}/\beta$ ,  $P_V^{nl}/\beta$  качественно примерно соответствуют таковым между  $P_{\text{MV}}$ ,  $P_{\text{NMV}}$  и  $P_V$ , хотя зависи-

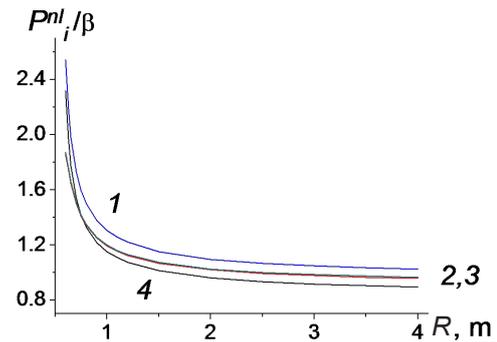


Рис. 6. Сравнение зависимостей нормализованной высокой мощности гелий-неонового лазера, рассчитанных по разным методикам, от кривизны зеркала  $R$  (см. формулы (15) – (18)):  $P_V^{nl}/\beta$  (1),  $P_{\text{EMV}}^{nl}/\beta$  (2),  $P_{\text{NMV}}^{nl}/\beta$  (3),  $P_{\text{MV}}^{nl}/\beta$  (4);  $\beta = P_0 / E_0^2$ . Параметры лазерной трубки:  $a = 2$  мм,  $d = 55$  см,  $\lambda = 0,6328$  мкм

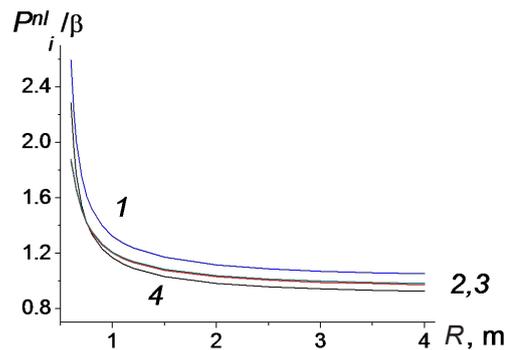


Рис. 7. Сравнение зависимостей, аналогичных приведенным на рис. 6, но рассчитанных при условии  $\mu_1^{(0)} = 0$

мости от величины  $R$  ведут себя иначе. Аналогично проведенным выше оценкам (см. рис. 4), интересно оценить влияние радиального распределения инверсии, анализируя значения мощностей без учета радиального распределения инверсии населенностей (положив  $\mu_1^{(0)} = 0$ ). Результаты соответствующих расчетов приведены на рис. 7. Видно, что полученные соотношения качественно примерно такие же.

Анализ полученных результатов позволяет утверждать, что применение величины модового объема NMV при расчетах мощности



излучения гелий-неонового лазера приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными, по сравнению с расчетными результатами, где применяется обычный модовый объем  $MV$ . Значения, полученные на основе модовых объемов  $NMV$  и  $EMV$  с учетом распределения инверсии населенности, на основе заданной функцией Бесселя (т. е. для цилиндрической разрядной трубки гелий-неонового лазера) примерно одинаковы, однако могут заметно различаться для других геометрий разрядной трубки. Различие обусловлено тем, что  $EMV$  — это всегда фигура вращения (что следует из определения  $EMV$  и формулы (1)), тогда как инверсия населенности при произвольной геометрии разрядного канала не обладает аксиальной симметрией, и, соответственно, модовый объем  $NMV$  тоже лишен указанной симметрии.

### Заключение

Таким образом, нами предложен метод оценки мощности излучения He-Ne лазера с произвольной формой поперечного сечения активного элемента, который проверен

для случая цилиндрической геометрии и дает хорошее согласие с экспериментальными данными.

В настоящее время исследуются различные поперечные сечения активного элемента He-Ne лазера в поисках оптимального по выходной мощности. Предварительные расчеты мощности гелий-неонового лазера с использованием  $NMV$  для разрядных трубок с прямоугольным и эллиптическим сечениями показали, что полученные результаты хорошо согласуются как с экспериментальными данными, так и с расчетными результатами по коэффициентам усиления лазеров, обладающих такой геометрией [15]. Модовый объем  $NMV$  для этих поперечных сечений (в виде прямоугольника и эллипса) должен иметь эллиптическое сечение. При этом получение формул, аналогичных (13), для указанных поперечных сечений вызывает большие затруднения; если же использовать предложенный нами модовый объем  $NMV$ , то появляется возможность оценить значения выходной мощности гелий-неонового лазера вычислительно несложным методом.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Привалов В.Е.** Геометрия газового разряда и усиление излучения лазера // Известия вузов. Физика. 2010. Т. 53. № 5. С. 80–90.
2. **Привалов В.Е.** Некоторые перспективы развития газоразрядных лазеров // Известия вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 2/2. С. 246–253.
3. **Boyd G.D., Gordon J.P.** Confocal multimode resonator for millimeter through optical wavelength masers // The Bell Systems Technical Journal. 1960. Vol. 40. No. 2. Pp. 489–508.
4. **Boyd G.D., Kogelnik H.** Generalized confocal resonator theory // The Bell Systems Technical Journal. 1962. Vol. 41. No. 4. Pp. 1347–1369.
5. **Gordon J.P., Kogelnik H.** Equivalence relations among spherical mirror optical resonators // The Bell Systems Technical Journal. 1964. Vol. 43. No. 6. Pp. 2873–2886.
6. **Sinclair D.C.** Choice of mirror curvatures for gas laser cavities // Applied Optics. 1964. Vol. 3. No. 9. Pp. 1067–1072.
7. **Kogelnik H., Li T.** Laser beams and resonators // Applied Optics. 1966. Vol. 5. No. 10. Pp. 1550–1567.
8. **Привалов В.Е.** Модовый объем и мощность излучения лазера // Оптика и спектроскопия. 1970. Т. 28. № 3. С. 524–527.
9. **Field R.L., Jr.** Operating parameters of dc-excited He-Ne gas lasers // Review of Scientific Instruments. 1967. Vol. 38. No. 12. Pp. 1720–1722.
10. **Tako T.** Self-absorption of spectral line // Journal of the Physical Society of Japan. 1961. Vol. 15. No. 10. Pp. 2016–2032.
11. **Bennett W.R., Jr.** Excitation and inversion mechanisms in gas lasers // Annals New York Academy of Science. 1965. Vol. 122. No. 2. Pp. 579–595.
12. **Привалов В.Е., Фридрихов С.А.** Зависимость мощности излучения He-Ne лазера от геометрии сечения разрядного промежутка //

- Журнал технической физики. 1968. Т. 38. № 12. С. 2080–2084.
13. **Привалов В.Е., Фридрихов С.А.** Кольцевой газовый лазер // Успехи физических наук. 1969. Т. 97. № 3. С. 377–402.
14. **Herziger G., Holzapfel W., Seelig W.** Verstärkung einer He-Ne-Gasentladung für die Laserwellenlänge  $\lambda = 6328 \text{ \AA}$  // Zeitschrift für Physik. 1966. Bd. 189. Num. 4. S. 385–400.
15. **Кожевников В.А., Привалов В.Е.** Влияние геометрии сечения активного элемента лазера на усиление его излучения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 2. С. 84–95.
16. **Голубев Ю.М., Привалов В.Е.** Некоторые характеристики He-Ne лазера, генерирующего одновременно 3,39 и 0,6328 мкм // Оптика и спектроскопия. 1967. Т. 22. № 3. С. 499–501.
17. **Привалов В.Е., Ходовой В.А.** Исследование свойств He-Ne-лазера с малым разрядным промежутком // Оптика и спектроскопия. 1968. Т. 25. № 2. С. 318–319.
18. **Голубев Ю.М., Привалов В.Е., Фридрихов С.А., Ходовой В.А.** О связи оптимального соотношения компонентов смеси в He-Ne лазере с распределением поля в резонаторе // Журнал технической физики. 1968. Т. 38. № 6. С. 1097–1100.
19. **Голубев Ю.М., Привалов В.Е., Фридрихов С.А., Ходовой В.А.** Об оптимальном соотношении компонент смеси в кольцевом He-Ne лазере // Журнал технической физики. 1968. Т. 38. № 11. С. 1990–1993.
20. **Smith P.W.** The output power of a 6328- $\text{\AA}$  He-Ne gas laser // IEEE Journal of Quantum Electronics. 1966. Vol. 2. No. 3. Pp. 62–68.
21. **Petrü F., Veselá Z.** The output power of a 633 nm He-Ne lasers // Optical and Quantum Electronics. 1972. Vol. 4. No. 1. Pp. 1–20.
22. **Li Y., Chen M., Li Z., Liu J., Guo J., Yang Y.** Study of performance of a He-Ne laser having an annular gain zone // Applied Optics. 2007. Vol. 46. No. 4. Pp. 591–601.
23. **Липский В.В., Привалов В.Е.** Расчет параметров генерации мощного He-Ne лазера на  $\lambda = 0,63 \text{ \mu m}$  // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. № 14. С. 57–61.
24. **Slepian D., Pollak H.O.** Prolate spheroidal wave functions. Fourier analysis and uncertainty. I. // The Bell Systems Technical Journal. 1961. Vol. 40. No. 1. Pp. 65–84.
25. **Slepian D.** Prolate spheroidal wave functions. Fourier analysis and uncertainty. IV: Extensions to many dimensions; generalized prolate spheroidal functions // The Bell Systems Technical Journal. 1964. Vol. 43. No. 6. Pp. 3009–3057.
26. **Ищенко Е.Ф.** Открытые оптические резонаторы: некоторые вопросы теории и расчета. М.: Советское Радио, 1980, 208 с.
27. **Зейгер С.Г., Фрадкин Э.Е.** Взаимодействие поперечных мод в лазерах // Физика газовых лазеров. Сб. статей. Ленинград: Изд-во Ленинградского гос. ун-та, 1969. С. 55–59.

*Статья поступила в редакцию 05.10.2020, принята к публикации 20.10.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КОЖЕВНИКОВ Вадим Андреевич** – старший преподаватель кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ПРИВАЛОВ Вадим Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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



**ФОТИАДИ Александр Эпаминондович** — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
fotiadi@rphf.spbstu.ru

## REFERENCES

1. **Privalov V.E.**, Gas-discharge geometry and studies in laser emission, Russian Physics Journal. 53 (5) (2010) 80–90.
2. **Privalov V.E.**, Some prospects for the development of gas-discharge lasers, Russian Physics Journal. 56 (2-2) (2013) 246–253.
3. **Boyd G.D., Gordon J.P.**, Confocal multimode resonator for millimeter through optical wavelength masers, The Bell Systems Technical Journal. 40 (2) (1960) 489–508.
4. **Boyd G.D., Kogelnik H.**, Generalized confocal resonator theory, The Bell Systems Technical Journal. 41 (4) (1962) 1347–1369.
5. **Gordon J.P., Kogelnik H.**, Equivalence relations among spherical mirror optical resonators, The Bell Systems Technical Journal. 43 (6) (1964) 2873–2886.
6. **Sinclair D.C.**, Choice of mirror curvatures for gas laser cavities, Applied Optics. 3 (9) (1964) 1067–1072.
7. **Kogelnik H., Li T.**, Laser beams and resonators, Applied Optics. 5 (10) (1966) 1550–1567.
8. **Privalov V.E.**, Mode volume and radiation power of a laser, Optics and Spectroscopy. 28 (3) (1970) 524–527.
9. **Field R.L., Jr.**, Operating parameters of dc-excited He-Ne gas lasers, Review of Scientific Instruments. 3 (12) (1967) 1720–1722.
10. **Tako T.**, Self-absorption of spectral line, Journal of the Physical Society of Japan. 15 (10) (1961) 2016–2032.
11. **Bennett W.R., Jr.**, Excitation and inversion mechanisms in gas lasers, Annals New York Academy of Science. 122 (2) (1965) 579–595.
12. **Privalov V.E., Fridrikhov S.A.**, Zavisimost moshchnosti izlucheniya He-Ne lazera ot geometrii secheniya razryadnogo promezhutka [The radiation power of He-Ne laser as a function of a cross-section geometry of a discharge gap], Technical Physics. 38 (12) (1968) 2080–2084 (in Russian).
13. **Privalov V.E., Fridrikhov S.A.**, The ring gas laser, Soviet Physics, Uspekhi. 12 (3) (1969) 153–167.
14. **Herziger G., Holzapfel W., Seelig W.**, Verstärkung einer He-Ne-Gasentladung für die Laserwellenlänge  $\lambda = 6328$  Å, Zeitschrift für Physik. 189 (4) (1966) 385–400.
15. **Kozhevnikov V.A., Privalov V.E.**, The geometrical effect of an active element cross-section on the laser gain, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11 (2) (2018) 84–95.
16. **Golubev Yu.M., Privalov V.E.**, Nekotoryye kharakteristiki He-Ne lazera, generiruyushchego odnovremennno 3.39 i 0.6328 mkm [Some characteristics of a He-Ne laser generating 3.39 and 0.6328  $\mu\text{m}$  simultaneously], Optics and Spectroscopy. 22 (3) (1967) 499–501 (in Russian).
17. **Privalov V.E., Khodovoy V.A.**, Issledovaniye svoystv He-Ne-lazera s malym razryadnym promezhutkom [An investigation of properties of a He-Ne laser with a small discharge gap], Optics and Spectroscopy. 25 (2) (1968) 318–319 (in Russian).
18. **Golubev Yu.M., Privalov V.E., Fridrikhov S.A., Khodovoy V.A.**, O svyazi optimalnogo sootnosheniya komponentov smesi v He-Ne lazere s raspredeleniyem polya v rezonatore [On the relation between an optimal ratio of mixture and a resonator's field distribution in the He-Ne laser], Technical Physics. 38 (6) (1968) 1997–1100 (in Russian).
19. **Golubev Yu.M., Privalov V.E., Fridrikhov S.A., Khodovoy V.A.**, Ob optimalnom sootnoshenii komponent smesi v koltsevom He-Ne lazere [On the optimal ratio of mixture in the ring He-Ne laser], Technical Physics. 38 (11) (1968) 1990–1993 (in Russian).
20. **Smith P.W.**, The output power of a 6328-Å He-Ne gas laser, IEEE Journal of Quantum Electronics. 2 (3) (1966) 62–68.

21. **Petrü F., Veselá Z.**, The output power of a 633 nm He-Ne lasers, *Optical and Quantum Electronics*. 4 (1) (1972) 1–20.
22. **Li Y., Chen M., Li Z., et al.**, Study of performance of a He-Ne laser having an annular gain zone, *Applied Optics*. 46 (4) (2007) 591–601.
23. **Lipskii V.V., Privalov V.E.**, Calculating parameters of high-power He-Ne lasers operating at  $\lambda = 0.63 \mu\text{m}$ , *Technical Physics Letters*. 31 (7) (2005) 608–610.
24. **Slepian D., Pollak H.O.**, Prolate spheroidal wave functions. Fourier analysis and uncertainty. I., *The Bell Systems Technical Journal*. 40 (1) (1961) 65–84.
25. **Slepian D.**, Prolate spheroidal wave functions. Fourier analysis and uncertainty. IV: Extensions to many dimensions; generalized prolate spheroidal functions, *The Bell Systems Technical Journal*. 43 (6) (1964) 3009–3057.
26. **Ishchenko E.F.**, Otkrytyye opticheskiye rezonatory: Nekotoryye voprosy teorii i rascheta [Open optical resonators: some issues of theory and calculations], *Sovetskoye Radio, Moscow*, 1980 (in Russian).
27. **Zeiger S.G., Fradkin E.E.**, Vzaimodeistviye poperechnykh mod [Transverse mode coupling], In “Fizuka gazovykh lazerov” [“The physics of gas lasers”, the collected book], *Leningrad State University Publishing, Leningrad*, (1969) 55–59 (in Russian).

*Received 05.10.2020, accepted 20.10.2020.*

## THE AUTHORS

### **KOZHEVNIKOV Vadim A.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

vadim.kozhevnikov@gmail.com

### **PRIVALOV Vadim E.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

vaevpriv@yandex.ru

### **FOTIADI Alexandr E.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

fotiadi@rphf.spbstu.ru



DOI: 10.18721/JPM.13411

UDC 536.421

## CURVED-RAY TENSOR TOMOGRAPHY FOR RESIDUAL STRESS MEASUREMENTS IN THE AXISYMMETRIC GRADED RODS

D.D. Karov<sup>1</sup>, A.E. Puro<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> Euroacademy, Tallinn, Estonia

For the first time, an algorithm for reconstructing an arbitrary distribution of residual stresses by the polarization tomography method for cylindrical rod structures with a radial distribution of the refractive index has been presented. The reconstruction took into account the ray refraction. The algorithm is based on the expansion of the tensor stress field in angular harmonics (singular value expansion). The case of an axisymmetric tensor field with an arbitrary stress gradient along the cylinder axis was considered. Numerical calculations were carried out for an axially symmetric stress distribution in a gradan for the case of a plane deformation state. The reconstruction was based on the expansion of the stress tensor in eigenfunctions of the boundary value problem. The regularized solution of the resolving equation (of Abelian type) used the expansion in the Zernike polynomials. The results of the reconstruction are given with taking into account the additional term due to the deflection of the transmission rays as well as without this doing.

**Keywords:** residual stress, integrated photoelasticity, transverse translucence, GRIN rod lense

**Citation:** Karov D.D., Puro A.E., Curved-ray tensor tomography for residual stress measurements in the axisymmetric graded rods, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 133–148. DOI: 10.18721/JPM.13411

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## ТЕНЗОРНАЯ ТОМОГРАФИЯ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ГРАДИЕНТНЫХ СТЕРЖНЯХ ПРИ ИСКРИВЛЕНИИ ПРОСВЕЧИВАЮЩИХ ЛУЧЕЙ

Д.Д. Каров<sup>1</sup>, А.Э. Пуро<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Евроакадемия, г. Таллинн, Эстония

Впервые представлен алгоритм реконструкции произвольного распределения остаточных напряжений методом поляризационной томографии для цилиндрических стержневых структур с радиальным распределением показателя преломления, с учетом рефракции лучей. Алгоритм основывается на разложении тензорного поля напряжений по угловым гармоникам (сингулярное разложение). Рассмотрен важный в прикладном плане случай осесимметричного тензорного поля при произвольном градиенте напряжений вдоль оси цилиндра. Численные расчеты проведены для аксиально симметричного распределения напряжений в градане для случая плоского деформированного состояния. Реконструкция основана на разложении тензора напряжений по собственным функциям краевой задачи. Регуляризованное решение разрешающего уравнения (Абелева типа) использует разложение по полиномам Цернике. Приводятся результаты реконструкции с учетом и без учета добавочного слагаемого, обусловленного отклонением просвечивающих лучей.

**Ключевые слова:** остаточное напряжение, интегральная фотоупругость, поперечное просвечивание, стержневая градиентная линза

**Ссылка при цитировании:** Каров Д.Д., Пуро А.Э. Тензорная томография для измерения остаточных напряжений в осесимметричных градиентных стержнях при искривлении просвечивающих лучей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 133–148. DOI: 10.18721/JPM.13411

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Introduction

Residual stress (RS) is one of the key characteristics describing the strength and optical quality of glass and crystal articles. Gradient refractive index (GRIN) structures, like rod lenses, laser rods, ball lenses, fiber preforms, and fibers have numerous applications. Most of them have an axially symmetric distribution of the refractive index that is the highest along its optical axis and decreases toward the periphery. A remarkably diverse range of optical profiling techniques has been developed during the last decades [1]; we assume in the discussion below that the refractive index (RI)  $n$  is known. Integrated photoelasticity [2] is a nondestructive method for stress analysis in 3D transparent specimens. This method consists in placing a 3D sample in an immersion bath ( $n_{imm} = n_{surf}$ ;  $n_{imm}$ ,  $n_{surf}$  are the RI of the immersion and product surface, respectively) and passing a beam of polarized light through the sample cross-section. Reconstruction of the spatial distribution of the stress tensor by interpreting the integrated optical effects of the rays that have passed through the medium may be considered a type of tensor field tomography [3]. It is based on solving the problem of optical tomography of the stress tensor field in combination with the resulting problem of elasticity theory. The problem of light propagation is separated into two parts [4] in the case of weak stresses (fiber preforms and fibers, GRIN lenses, laser rods): determining the ray paths in the GRIN structure and determining the change in the polarization of the light passed through a birefringent medium. As a rule, induced birefringence is rather weak in the GRIN structures, and it is possible to measure two linear integrals on each ray. One of them is connected with the transversal interaction of the 2D vector field and the other with the transversal interaction of the 2D tensor field. From a mathematical standpoint, we have the special case of

tensor tomography with beam deflection [5, 6]. The reconstruction algorithm is based on circular harmonic decomposition (Cormac-type inversion) [7] of ray integrals. The inverse problem of reconstructing the RSs is actually divided into the following two successive stages [3] for rectilinear propagation of rays:

- (i) reducing the tensor ray integrals to scalar ones,
- (ii) determining all the stress-tensor components based on inverting the ray integrals and solving the corresponding thermoelasticity problem [8].

In contrast to polarimetric tomography of straight light rays, the tomographical problem and the inverse thermoelastic problem must be solved together in the GRIN media [9].

Below we will investigate two types of inverse problems.

The global inverse problem: tomographic measurements are performed in a system of parallel planes over the entire height of the sample (optical axis) (Fig. 1,*a*).

The local inverse problem: tomographic measurements are carried out in the two closely spaced sections orthogonal to the optical axis (Fig. 1,*b*).

The paper is structured as follows. The basics of tensor field tomography are introduced in the next section. In what follows, we give the algorithm of RS reconstruction. Appendix after the

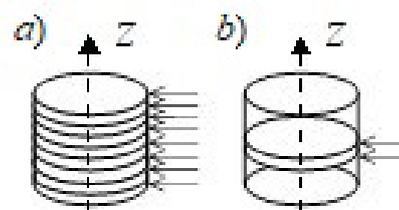


Fig. 1. Schematic drawing of the two raying methods corresponding to the global (*a*) and local (*b*) inverse problems

main material of the paper gives the singular decomposition of quasi-plane stresses in a circular cylinder.

### Preliminaries

To make the presentation of our paper logical, we will give here the main concepts of tensor tomography of RS: the scalar and 2D-vector field tomography in the axially symmetric GRIN media and the main notions of the inverse thermoelasticity problem of integrated photoelasticity.

**Ray equation in axially symmetric optical media.** We will rely on the results obtained in the ray theory of axially symmetric optical media [10]. We use the Cartesian  $(x, y, z)$  coordinate system, as well as the cylindrical one  $(r, \varphi, z)$  and the moving one  $(s, \alpha, z)$  associated with the measuring process (Fig. 2).

The axis  $z$  coincides with the axes of the cylinder. The cylinder is taken to have a unit radius. The ray is localized by its normal vector  $\mathbf{s}$ , such that  $\mathbf{s} = |\mathbf{s}|$  is the smallest distance from the ray to the origin, and  $\theta$  is the angle between the  $\mathbf{s}$  and the axis  $x$  (see Fig. 2). An arbitrary point on the ray is determined by its polar angle  $\varphi = \theta \pm \alpha$  and by its distances  $r$  from the origin.

The RI  $n(r)$  has rotational symmetry around the  $z$ -axis and  $R(r) = n(r)r$  is a monotonic continuous function of  $r$  so that there is a one-to-

one correspondence between  $R$  and  $r$  and only one ray passes through any two points inside the circle. We introduce another moving coordinate systems,  $(R, \Omega, z)$  and  $(S, T, z)$ , associated with the RI:

$$S(s) = sn(s), \quad T = \pm \sqrt{R^2 - S^2},$$

$$\sin \Omega = \frac{T}{R},$$

where the plus sign holds for the left-hand side and minus for the right-hand side of the ray.

Then, the ray equation can be written in the next form:

$$\alpha \left[ (R(r), S(s)) \right] = \pm \int_{|s|}^r \frac{S(s) d\rho}{\rho \sqrt{[R(\rho)]^2 - [S(s)]^2}} =$$

$$= \pm \int_{|s|}^R \frac{SD(K) dK}{K \sqrt{K^2 - S^2}} = A(R, S), \quad (1)$$

$$D(R) = \frac{d \ln(r(R))}{d \ln(R)},$$

where  $\alpha(r, s) = \pm(\varphi(r) - \theta)$ .

We give here also the formula for the differential of length  $l$  of an arc on the ray:

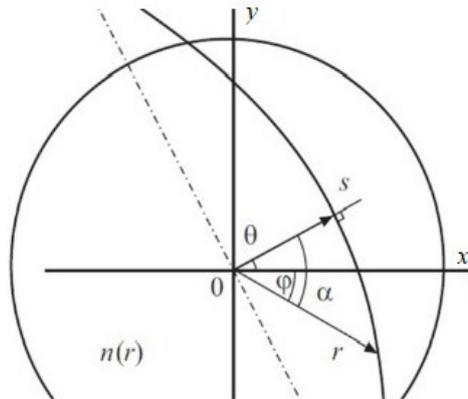


Fig. 2. The Cartesian  $(x, y, z)$ , the cylindrical  $(r, \varphi, z)$  and the moving coordinate  $(s, \alpha, z)$  systems used in the paper; the  $z$ -axis coincides with the axes of the cylinder;  $\varphi = \theta \pm \alpha$  is the polar angle,  $n(r)$  is a radial distribution of the refractive index

$$dl = \pm \sqrt{1 + \left[ r \frac{d\alpha}{dr} \right]^2} dr = \pm \frac{R(r) dr}{\sqrt{R^2(r) - S^2(s)}} = \pm \frac{L(R) RdR}{\sqrt{R^2 - S^2}} = L(R) dT, L(R) = \frac{dr(R)}{dR}. \quad (2)$$

We assume that the RI is known and we can determine the ray equation.

**Attenuated Radon transform in axially symmetric optical media.** The Radon transform of  $\hat{f}(s, \theta, \mu)$  with attenuation is defined here as follows [7]:

$$\hat{f}(s, \theta, \mu) = \int_{-l(s)}^{l(s)} f(s\theta + \mathbf{x}) \times \exp\left(\int_0^l \mu(s\theta + \mathbf{x}) dk\right) dl,$$

where  $l(s)$  is half the length of the ray in the circle,  $\theta = (\cos\theta, \sin\theta)$  is the unit vector along the  $s$ -axis,  $\mu$  is the attenuation.

Let us transform the attenuation accumulated along the ray

$$M(R, S) = \int_0^l \mu(s\theta + \mathbf{x}) dk = \int_{|s|}^r \frac{\mu(k) R(k) dk}{\sqrt{[R(k)]^2 - [S(s)]^2}} = \int_{|s|}^R \frac{\mu(K) L(K) K dk}{\sqrt{K^2 - S^2}} = M^0(T, S).$$

We can transform the ray integral by using polar coordinates  $(R, \varphi)$ :

$$\hat{f}(S, \theta) = \int_S^{R_0} f[R, \theta + A(R, S)] \times \frac{\exp[M(R, S)] L(R) RdR}{\sqrt{R^2 - S^2}} + \int_S^{R_0} f[R, \theta - A(R, S)] \times \quad (3)$$

$$\times \frac{\exp[-M(R, S)] L(R) RdR}{\sqrt{R^2 - S^2}}. \quad (3)$$

Applying the Radon transform for tomography of stress tensor fields in the optical glasses is connected with the circular harmonic decomposition (CHD) of stress functions [8, 9]. Expanding  $f(r, \varphi)$  and  $\hat{f}(S, \theta)$  in a Fourier series with respect to the corresponding angular variables, we obtain

$$f(r, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m(r) e^{im\varphi}, \dots \hat{f}(S, \theta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_m(S) e^{im\theta},$$

where

$$f_m(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(r, \varphi) e^{-im\varphi} d\varphi, g_m(S) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \hat{f}(S, \theta) e^{-im\theta} d\theta.$$

The absorption is imaginary in the problems of magneto-photoelasticity [11], in the studies of the magnetic field of the Tokamak plasma [12, 13], and in the magnetic resonance imaging [14]. Thus, we give the reconstruction algorithm for the case of imaginary attenuation,  $\mu = i\eta$ ,

$$M(R, S) = \int_{|s|}^R \frac{i\eta(K) L(K) K dk}{\sqrt{K^2 - S^2}} = iQ(R, S).$$

Inserting relationship (4) into a circular harmonic, we obtain

$$g_m(S, \eta) = 2 \int_{|s|}^{R_0} \frac{\cos[E(m, K, S)] F_m(K) K dk}{\sqrt{K^2 - S^2}}, \quad (4) E(m, K, S) = mA(K, S) + Q(K, S),$$

an integral equation (generalized Cormack equation) for



$$F_m(R) = f_m(R)L(R).$$

The solution of Eq. (4) can be written as follows [7]:

$$f_m(r)n(r) = \frac{-1}{2\pi r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \text{Cr1}(qS, R, \eta) + \frac{m}{r} \text{Sr1}(q, R, \eta) \right],$$

$$\begin{aligned} \text{Cr1}(gS, R, \eta) &= \\ &= \text{Cr}(gS, R, \eta) + \text{Cr}(gS, R, -\eta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Cr}(qS, R, \eta) &= \\ &= \int_R^{R_0} \frac{\text{ch}[G(m, S, R, \eta)]}{\sqrt{S^2 - R^2}} q_m(S, \eta) S dS, \end{aligned}$$

$$G(m, S, R, \eta) = mB(S, R) + N(s, R), \quad (5)$$

$$B(S, R) = \int_R^{|s|} \frac{SD(K) dK}{K\sqrt{S^2 - K^2}},$$

$$N(S, R) = \int_R^{|s|} \frac{\eta(K)L(K)K dK}{K\sqrt{S^2 - K^2}},$$

$$\text{Sr1}(g, R, \eta) = \text{Sr}(g, R, \eta) + \text{Sr}(g, R, -\eta),$$

$$\begin{aligned} \text{Sr}(q, R, \eta) &= \\ &= \int_R^{R_0} \text{sh}[G(m, S, R, \eta)] q_m(S, \eta) dS. \end{aligned}$$

We write it in a more familiar form:

$$\begin{aligned} f_m(r) &= \frac{-1}{2\pi} \frac{dR(r)}{dr} \times \\ &\times \left\{ \left[ \text{Cr1}(g'_m, R, \eta) \right] + \right. \\ &\left. + \left[ \text{Sr2}(r, \eta) + \text{Sr2}(r, -\eta) \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\text{Sr2}(R, \eta) =$$

$$\begin{aligned} &= \int_R^{R_0} \frac{\text{sh}[G(m, S, R, \eta)]}{\sqrt{S^2 - R^2}} q_m(S, \mu) \times \\ &\times \left[ m \int_R^S \frac{D'(K) dK}{\sqrt{S^2 - K^2}} + \right. \\ &\left. + \int_R^S \frac{S[\eta(K)L(K)]' dK}{\sqrt{S^2 - K^2}} \right] dS. \end{aligned}$$

The operator Sr2 consists of the part connected with the ray curvature (it is proportional to the harmonic number  $m$ ) and the part connected with attenuation (the second integral in square brackets). It means that this part can be neglected if the angle variation of the field is small ( $m$  is small).

**Cormack-type inversion of attenuated ray integral of a vector function.** Reconstruction of stresses is connected with the reconstruction of vector fields. According to the Helmholtz theorem, any vector field  $\mathbf{W}(r, \varphi)$  can be split up into a curl-free component and a source-free one:

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= W_n \mathbf{e}_n + W_l \mathbf{e}_l = \\ &= \left( \frac{\partial \tau}{\partial n} + \frac{\partial N}{\partial l} \right) \mathbf{e}_n + \left( \frac{\partial \tau}{\partial l} - \frac{\partial N}{\partial n} \right) \mathbf{e}_l. \end{aligned}$$

where  $\tau$ ,  $N$  are the potentials of these components;  $\mathbf{e}_n$ ,  $\mathbf{e}_l$  denote the unit normal and unit tangent vectors to our curves.

For simplicity, we suppose that

$$\tau(1, \varphi) = N(1, \varphi) = 0$$

have homogeneous boundary conditions, obtained in the case of reconstructions of quasi-plane deformation.

The measurements in the linear vector tomography can be represented by a ray path integral in the form of a scalar (inner) product of a “probe” vector  $\mathbf{p}$  and vector  $\mathbf{W}$  as

$$\int_{-l(s)}^{l(s)} \mathbf{p} \mathbf{W}(s \boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) \times$$

$$\times \exp\left(i \int_0^l \eta(s \boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) dk\right) dl.$$

The special case when  $\mathbf{p} = \mathbf{e}_l$  is what H. Braun and A. Hauck [15] call the longitudinal measurements, and this leads to the formula

$$\hat{W}_l = - \int_{-l(s)}^{l(s)} \left[ \frac{\partial N}{\partial n} + i \eta \tau \right] \times \exp\left(i \int_0^l \eta(s \boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) dk\right) dl \quad (6)$$

with applications to the Doppler tomography of a velocity field. Here we transform the ray path integral by partial integration.

Another special case when  $\mathbf{p} = \mathbf{e}_n$  gives the transverse measurements:

$$\hat{W}_n = \int_{-l(\theta)}^{l(\theta)} \left[ \frac{\partial \tau}{\partial n} - i \eta N \right] \times \exp\left(i \int_0^l v(s \boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) dk\right) dl, \quad (7)$$

which is essential for reconstructing the shear stresses.

A simple analogy between Eqs. (6), (7) is evident. Thus, only the application of Cormack-type inversion to the transverse vector integral (7) can be described. It can be written as the sum of two integrals:

$$\begin{aligned} \hat{W}_n &= \\ &= \int_{-l(s)}^{l(s)} \left[ \frac{\partial \tau}{\partial n} \right] \exp\left(i \int_0^l \eta(s \boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) dk\right) dl - \\ &- i \int_{-l(s)}^{l(s)} \eta N \exp\left(i \int_0^l \eta(s \boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) dk\right) dl. \end{aligned} \quad (8)$$

The first one is transformed using cylindrical coordinates:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau}{\partial n} &= \sin v \frac{\partial \tau}{\partial r} + \cos v \frac{\partial \tau}{r \partial \varphi}, \\ \sin v &= \frac{S(s)}{R(r)} = \cos \Omega, \end{aligned}$$

$$\cos v = \pm \frac{1}{R(r)} \sqrt{R^2(r) - S^2(s)},$$

where the plus sign holds for the left-hand side and minus for the right-hand side of the ray.

Expanding  $\tau(R, \varphi)$ ,  $\eta(R, \varphi)$ ,  $N(R, \varphi)$  and  $\hat{W}_n(s, \theta)$  in Fourier series, namely

$$\begin{aligned} \tau(R, \varphi) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tau_m(R) e^{im\varphi}, \\ \eta(R, \varphi) N(R, \varphi) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} N_m(R) e^{im\varphi}, \\ \hat{W}_n(S, \theta) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} w_m(S) e^{im\theta}, \end{aligned}$$

we can transform integral equation (8) to the following form:

$$\begin{aligned} w_m(S) &= w_m^1(S, \tau) + w_m^2(S, N), \\ w_m^1(S, \tau) &= 2 \int_{|s|}^{R_0} \frac{\cos[E(m, K, S)] S}{\sqrt{K^2 - S^2}} \frac{d\tau_m(K)}{dK} + \\ &+ \frac{m \sin[E(m, K, S)]}{k(K)} \frac{dk(K)}{dK} \tau_m(K) dK, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} w_m^2(S, N) &= \\ &= 2 \int_{|s|}^{R_0} \frac{\cos[E(m, K, S)] N_m(K) L(K) K}{\sqrt{K^2 - S^2}} dK. \end{aligned} \quad (10)$$

The reconstruction of potential  $\tau$  is carried out by the operator [7]:

$$\tau_m(R) = -\frac{1}{\pi} \text{Cr1}(w_m^1, R, \eta). \quad (11)$$

As integral (10) coincides with Eq. (4), we can reconstruct  $N_m(R)$  by using Eq. (5) for reconstruction of the scalar function [7].

**Invariant representation of the stress tensor field in the inverse thermoelasticity problem.** Most of the GRIN structures are formed by the ion-exchange method based on diffusion in alkali-containing glasses. There are two possi-

ble sources of RSs produced by varying the glass composition: the size difference between the exchange and the diffusing ions, and the radial variation in the coefficient of thermal expansion across the gradient region. As the lens cools from the ion-exchange temperature to room temperature, RS is introduced. In general, the tensor of residual deformation is the reason for RSs; the components of this tensor do not satisfy the compatibility equations. In the case of ordinary glass, the tensor of residual deformation can be considered to be spherical. Such an isotropic dilation field can be described by a certain “fictive” temperature field [16], and determination of RS can be connected with the solution of the thermoelasticity problem. The problem of reconstructing the thermal residual stresses using integrated photoelasticity is called the inverse thermoelasticity problem of optical tomography [8]. It is assumed in this model that the stress tensor  $\sigma$  obeys the equilibrium equations  $\text{div } \sigma = 0$ . The lateral surface of a cylinder is free from loads.

Let us use stress functions  $\Phi$ ,  $\tau$ ,  $N$  for the representation of RSs:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{rr} &= \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Phi - \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial z} \tau + 2 \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} N \right], \\
 \sigma_{r\varphi} &= - \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi \right] - \\
 &\quad - r \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] \Phi - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} N, \\
 \sigma_{\varphi\varphi} &= \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right] \Phi - \frac{\partial}{\partial z} \tau - \\
 &\quad - 2 \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} N \right], \\
 \sigma_{rz} &= \frac{\partial}{\partial r} \tau + \frac{\partial}{r \partial \varphi} N,
 \end{aligned} \tag{12}$$

$$\sigma_{\varphi z} = \frac{\partial}{r \partial \varphi} \tau - \frac{\partial}{\partial r} N.$$

It was established [8] that the following stressed states are possible in a sample: (i) a quasi-planar stressed state caused by residual deformations ( $N = 0$ ); (ii) a torsional stressed state caused by external loads ( $\Phi = \tau = 0$ ), and (iii) a superposition of the aforementioned stresses (a quasi-torsional deformation). The state of pure torsion cannot be generated by a thermal source alone. Therefore, the first and third types of stresses are to be reconstructed.

We have also two additional equations for the reconstruction of the quasi-plane stress state:

$$\begin{aligned}
 \Delta_+ \Phi &= \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Phi = \\
 &= \sigma_{zz} + \Psi(x, y, z), \\
 \Delta_+ \tau &= - \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zz}, \\
 \left( \Delta_+ + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi &= \Delta \Psi = 0,
 \end{aligned} \tag{13}$$

and the equation for determining quasi-torsional stresses  $\Delta N = 0$ .

Here  $\Psi$  is a 3D harmonic function, connected with boundary conditions. It was proved that the quasi-planar stress ( $N = 0$ ,  $\Psi = 0$ ) can be determined locally based on the values of axial stress and its two first derivatives along the direction of the axis. Moreover, it can be seen from Eqs. (13) that in this case,

$$\frac{\partial}{\partial z} \Phi(x, y, z) = -\tau(x, y, z).$$

In particular, it was confirmed that the thermal stresses of the first angular harmonic are completely reconstructed by the local method. The quasi-torsional stresses can be reconstructed by the global method. The magnitude of the quasi-torsional stresses is almost negligibly small in comparison with quasi-plane stresses and we will

confine our attention mainly to reconstructing quasi-plane stresses ( $N = 0, \Psi = 0$ ).

**Algorithm for reconstruction of residual stresses**

Since the reconstruction of RS is based on solving the problem of optical tensor tomography of the stress tensor field together with the problem of elasticity theory, let us first consider the tomographical problem.

**Ray integrals of polarized tomography.** Transformation of light polarization is measured in a plane orthogonal to the axis of the cylinder. Because there is added torsion of the ray in the plane of transillumination, variations in the polarization within the quasi-isotropic approximation are governed by the following system of equations [9]:

$$\frac{d}{dl} \mathbf{E} = -iCPE, \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_z \\ E_s \end{bmatrix}, \tag{14}$$

$$P = \begin{bmatrix} 0.5(\sigma_{zz} - \sigma_{nn}) & \sigma_{nz} \\ \sigma_{nz} & 0.5(\sigma_{nn} - \sigma_{zz}) \end{bmatrix},$$

where  $\mathbf{E}$  is the vector representing the amplitude of the electric field strength (the Jones vector),  $\sigma_{kj}$  are the stress tensor components in the moving system coordinates  $\mathbf{e}_n, \mathbf{e}_\rho, \mathbf{e}_z$  (the Frenet – Serret frame),  $C$  is the photoelastic constant.

The solution of Eqs. (14) in the linear approximation can be represented as two ray integrals along the ray [2, 3]:

$$2\gamma \cos \psi = C \int_{-l(s)}^{l(s)} (\sigma_{zz} - \sigma_{nn}) dl = CH_0(s, \theta), \tag{15}$$

$$\gamma \sin \psi = C \int_{-l(s)}^{l(s)} \sigma_{nz} dl = CH_1(s, \theta), \tag{16}$$

where  $\gamma$  is the integrated optical retardation,  $\psi$  is the isocline parameter [2].

These parameters can be measured experimentally and form the physical foundation of the tomography. The ray integral (15) is connected with transversal interaction of the 2D tensor field in the plane of transillumination and the other one (16) is connected with transversal interaction of the 2D vector field ( $\sigma_{xz}, \sigma_{yz}$ ). The cylindrical coordinate system is the most convenient for solving the inverse thermoelastic problem of the cylinder. Thus, we rewrite stress tensor components in cylindrical coordinates:

$$\sigma_{nn} = \sigma_{rr} \cos^2 \beta + \sigma_{\varphi\varphi} \sin^2 \beta + 2\sigma_{r\varphi} \sin \beta \cos \beta,$$

$$\sigma_{nz} = \sigma_{zr} \cos \beta + \sigma_{\varphi z} \sin \beta.$$

where  $\beta$  is the angle between the normal to a ray and the  $\theta$ -axis.

Further, using the relations

$$\beta = \nu - \frac{\pi}{2},$$

$$\sin \beta = -\cos \nu, \quad \cos \beta = \sin \nu$$

we transform them to the following form:

$$\sigma_{nn} = \sigma_{rr} \sin^2 \nu + \sigma_{\varphi\varphi} \cos^2 \nu - 2\sigma_{r\varphi} \sin \nu \cos \nu, \tag{17}$$

$$\sigma_{nz} = \sigma_{zr} \sin \nu - \sigma_{\varphi z} \cos \nu.$$

Let us rewrite stresses (17) in terms of stress functions (12):

$$\sigma_{nn} = -\frac{\partial}{\partial z} \tau + \sigma_{nn}(\Phi) + \sigma_{nn}(N),$$

$$\sigma_{nn}(\Phi) = \sin^2 \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Phi +$$

$$+ \cos^2 \nu \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right] \Phi + \sin 2\nu \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi \right],$$

$$\begin{aligned} \sigma_{mn}(N) = & 2 \sin^2 \nu \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] - \\ & - 2 \cos^2 \nu \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} N \right] + \\ & + \sin 2\nu \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] N, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{nz} = & \sin \nu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \tau + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} N \right] - \\ & - \cos \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \tau - \frac{\partial}{\partial r} N \right]. \end{aligned}$$

The magnitude of quasi-torsion stresses is almost negligibly small in comparison with quasi-plane stresses, and below we consider the case of quasi-plane deformation:  $N=0, \Phi(1) = \partial\Phi/\partial r = 0$ .

The first ray integral in the space of angular harmonics can be written as

$$\hat{H}_0(m, S) = \hat{\sigma}_{zz}(m, S) - \frac{\hat{\partial}\tau}{\partial z} - \hat{\sigma}_{mn}(m, S), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{mn}(S, m) = & -2 \int_S^{R(1)} \frac{\cos[mA(R, S)]}{\sqrt{R^2 - S^2}} \times \\ & \times \left\{ \sin^2 \nu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right] \Phi_m + \right. \\ & \left. + \cos^2 \nu \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right] \Phi_m \right\} R dr - \\ & - 2m \int_S^{R(1)} \frac{\sin[mA(R, S)]}{\sqrt{R^2 - S^2}} \times \\ & \times \sin 2\nu \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1}{r} \Phi_m \right] R dr. \end{aligned} \quad (20)$$

Integrating by parts, we transform Eq. (20) to the formula

$$\hat{\sigma}_{mn}(S, m) = -2 \int_S^{R(1)} \frac{\cos[mA(R, S)]}{\sqrt{R^2 - S^2}} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{S^2}{R^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} \Phi_m \right) \left( \frac{d}{dr} n(r) \right) r dr - \\ & - 2m \int_S^{R(1)} \sin[mA(R, S)] \times \\ & \times \frac{S}{R^2} \Phi_m \left( \frac{d}{dr} n(r) \right) dr, \end{aligned} \quad (21)$$

containing in an explicit form the term  $dn(r)/dr$  depending on the curvature of the ray.

The second ray integral (16) is connected with transversal interaction of the two-dimensional vector field and coincides with Eq. (11) in a space of angular harmonics:

$$\hat{H}_1(S, m) = \hat{\sigma}_{nz}(S, m) = w_m^1(S, \tau), \quad (22)$$

Thus, for stress reconstruction, we have four equations: two differential (Eqs. (13)) and two integral (Eqs. (19), (22)) ones.

**The problem of reconstructing the RSs in the global and the local forms.** Tomographic measurements in the global inverse problem are performed in a system of parallel planes over the entire height of the cylinder. The layer-by-layer reconstruction of stresses is possible starting from the bottom of the cylinder, where the axial stress is zero. Thus, we can determine  $\tau$  from Eq. (22), the normal stress  $\sigma_{zz}$  and  $\Phi$  using Eq. (13) and then all stress components given by Eqs. (12). The first ray integral (15) is not used in this algorithm.

Although the presented algorithm includes, as a special case, rectilinear propagation of rays, numerical implementation of the algorithm may differ for these cases. More detailed analysis shows that the global approach allows for reconstructing stresses completely [8].

Tomographic measurements in the local inverse problem are carried out in two closely spaced sections orthogonal to the optical axis for determining the height derivative of  $\tau$ . Quasi-plane stresses are determined based on two differential Eqs. (13) and two ray integrals (19), (22).

**Reconstruction of the quasi-plane stresses in the GRIN structures.** For regularization of the inverse problem, we use singular decomposition of

the solution of Eqs. (13). The angular decomposition using trigonometric functions and radial decomposition using the Zernike polynomials were applied to represent the stresses (see Appendix) [8, 17]. MATLAB codes were developed to numerically solve integral Eqs. (19), (22) by the least square method. This method has been previously used for inversion of the Abel transform [18, 19]. We have three types of unknown coefficients:

$$\sigma_{zzm}^{kc,s}, \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zzm}^{kc,s}, \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sigma_{zzm}^{kc,s}.$$

The second type of them can be determined from Eq. (22). The integrals

$$w_m^k(S) = 2 \int_{|s|}^1 \frac{\cos[mA(R,S)] S d\tau_m^{k1}(r)}{\sqrt{R^2 - S^2}} + \frac{m \sin[mA(R,S)]}{r} \tau_m^{k1}(r) dr,$$

$$\tau_m^{k1}(r) = \frac{1}{2m} [C_k^m(r) + D_k^m(r)],$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \tau_m^{kc,s}(r) = \frac{-1}{2\rho} [C_k^m(r) - D_k^m(r)]$$

have to be calculated for the inversion Eq. (9).

According to the least-squares method [19], in order to determine  $\frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zzm}^{kc,s}$  we solved the following equation:

$$\sum_{n=1}^N [\hat{H}_1(S_n, m) - w_m^k(S_n) \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zzm}^{kc,s}]^2 = \min,$$

where  $S_n$  are the  $n$  measured points,  $\hat{H}_1(S_n, m)$  is the measured ray integral.

The number of polynomials in the representation is connected with noise filtering. The second derivative  $\frac{\partial^2 \sigma_{zzm}^{kc,s}}{\partial z^2}$  can be approximately determined by measuring integrals in two parallel

closely spaced sections. Then we can determine  $\sigma_{zzm}^{kc,s}$  using solution (21).

Two types of refractive index profiles have been used in MATLAB codes [20, 21]. The profile of GRIN structures

$$n(r/R) = n_0 \sqrt{1 - g(r/R)^2}$$

is known as the parabolic refractive index profile [21]. Here  $n_0$  is the refractive index on the axis and  $g$  is a positive constant,  $R$  is the radius of the cylinder.

In this case, the ray equation (1) has an analytical solution:

$$\alpha(r, s) = \arccos \left[ \frac{s}{r} \sqrt{\frac{R^2 - g(r^2 + s^2)}{R^2 - 2gs^2}} \right].$$

The Cartesian coordinates of these rays can be expressed analytically in terms of the parameters  $r, s$ :

$$y(r, s) = s \sqrt{\frac{R^2 - g(r^2 + s^2)}{R^2 - 2gs^2}},$$

$$x(r, s) = \sqrt{\frac{(r^2 - s^2)(R^2 - gs^2)}{R^2 - 2gs^2}}.$$

It is clear that  $g < 0.5$  here. These relations are used for ray tracing and solutions (19), (22) if  $m > 0$ .

Another profile (parabolic) of the form

$$n(r) = n_0 [1 - 0.5g^2(r/R)^2]$$

is typically used to approximate the index refraction of GRIN lenses [21, 22] and of multimode fibers. The parameter  $g$  varies from 0.01 for fibers up to 0.30 for GRIN rod lenses.

Ray tracing is given for the case  $g = 0.2$  (Fig. 3). The angle (1) can be expanded using the small parameter  $g$ . The expansion to within the first two terms

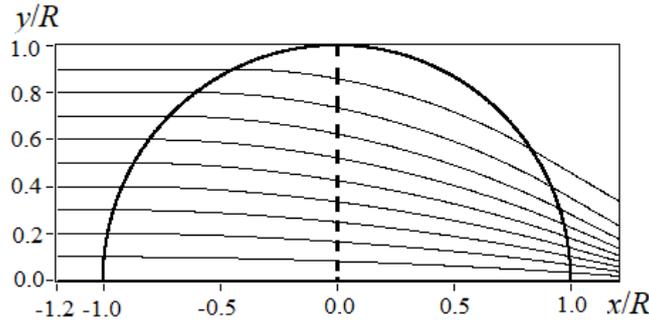


Fig. 3. Ray tracing through the sample (its half-round cross-section of diameter  $2R$  is shown) when  $n(r/R) = n_0[1 - 0.2(r/R)^2]^{1/2}$  ( $g = 0.2$ ,  $x$  is the translucence parameter)

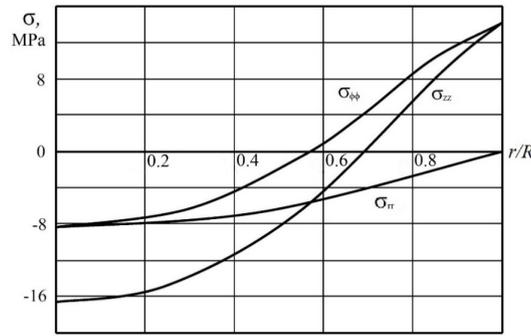


Fig. 4. The reconstructed principal components of the stress tensor over the GRIN lens's radius (the lens was made of zirconium-silicate glass)

$$\begin{aligned} \alpha(r, s) &= \pm \int_{|s|}^r \frac{S(s) d\rho}{\rho \sqrt{[R(\rho)]^2 - [S(s)]^2}} \approx \\ &\approx \pm \int_{|s|}^r \frac{s d\rho}{\rho \sqrt{[\rho]^2 - [s]^2}} = \\ &= \pm 0.5 \left( \frac{g}{R} \right)^2 s \sqrt{r^2 - s^2} \end{aligned}$$

coincides with the expansion of

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \arccos \left[ \frac{S_1(s)}{R_1(r)} \right], \\ R_1(r) &= n_0 \left[ R^2 + 0.5g^2 r^2 \right] r, \\ S_1(s) &= n_0 \left[ R^2 + 0.5g^2 s^2 \right] s. \end{aligned}$$

This approximation can be used in practice to solve Eqs. (19), (22) if  $g < 0.1$  and  $m < 15$ . The algorithm of reconstruction is simplified [9] for axial symmetric plane-strain state ( $m = 0$ ). In this case, all functions depend only on the radial coordinates, and we take only Eq. (19):

$$\begin{aligned} \hat{H}_0(s) &= \\ &= 2 \int_{|s|}^1 \left[ \sigma_{zz} + \int_0^r t \sigma_{zz}(t) dt \frac{S^2(s)}{R^2(r)} \left( \frac{dn}{dr} \right) \right] \times \\ &\quad \times \frac{R(r) dr}{\sqrt{R^2(r) - S^2(s)}}. \end{aligned} \tag{23}$$

Optical retardation (23) consists of two terms: main retardation due to axial stress and additional one due curving of the ray. It has an additional

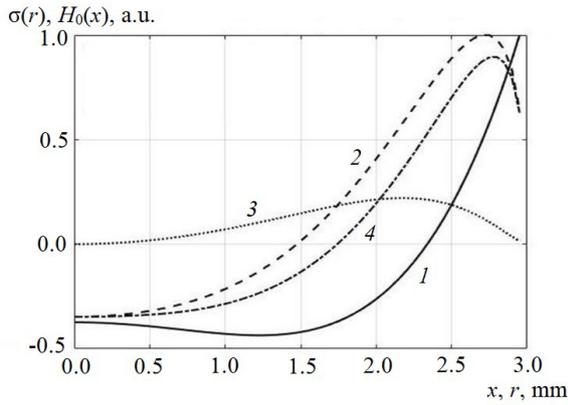


Fig. 5. The result of the residual stresses simulation (an example for using the polynomial datum on the sample of  $R = 3$  mm); in addition to the axial stress curve (1), the curves of optical (2), additional (3) and main (4) retardations are presented

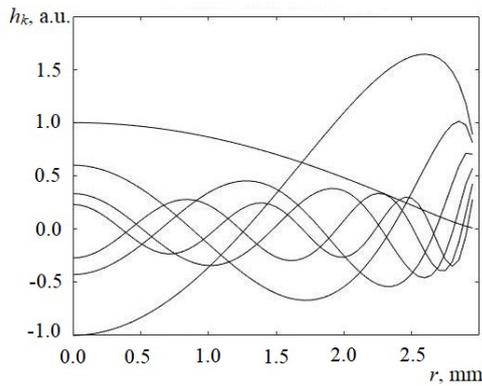


Fig. 6. Integrals  $h_k(r)$  obtained on a basis of the first seven Zernike polynomials

term connected with ray deflection. The above algorithm is used for stress reconstruction

$$\sum_{n=1}^N [\hat{H}_0(s_n) - h_k(s_n) \sigma_{zz}^k]^2 = \min.$$

The graphs for the reconstruction of stresses in GRIN lenses made of zirconium-silicate ( $n_0 = 1.54$ ) glasses are shown in Fig. 4 [23].

Fig. 5 shows the result of simulation of residual stresses by the polynomial datum for the case

of  $R = 3$  mm. Fig. 6 gives the retardations for the first seven Zernike polynomials.

### Summary

In recent years, there has been a growing interest towards tomographic reconstruction of vector and tensor fields in the refracting medium [5, 6, 22]. We present the algorithm for reconstruction of residual stresses in GRIN lenses. From an experimental standpoint, implementation of the given method of reconstruction does not pose any particular difficulties and is conducted similarly to the case of the constant refractive index. The simplest examples of applications of this algorithm for the axial symmetric distribution of stresses are presented. The inversion algorithm provides a comparatively smooth stress distribution, produced by the ion-change technique. Including the radial dependences of the photoelasticity coefficients and elastic constants in GRIN structures in the algorithm for reconstructing stresses is the subject for further research.

### Appendix

#### SCD of quasi-plane stresses

Let us consider a representation of quasi-plane stresses in terms of Zernike polynomials  $R_k^m(r)$  [12],  $m > 0$ :

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}(r, \varphi, z) &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} [\sigma_{zzm}^{kc}(z) \cos(m\varphi) + \\ &+ \sigma_{zzm}^{kc}(z) \sin(m\varphi) R_{m+2k}^m(r)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi(r, \varphi, z) &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} [f_m^{kc}(r, z) \cos(m\varphi) + \\ &+ f_m^{kc}(r, z) \sin(m\varphi)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau(r, \varphi, z) &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} [\tau_m^{kc}(r, z) \cos(m\varphi) + \\ &+ \tau_m^{kc}(r, z) \sin(m\varphi)], \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(r, \varphi, z) &= \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \sigma_{ijm}^{kc}(r, z) \cos(m\varphi) + \right. \\ &\quad \left. + \sigma_{ijm}^{kc}(r, z) \sin(m\varphi) \right]. \end{aligned}$$

In the following, as evident from the context of the notation, the trigonometric functions are not written out:

$$\begin{aligned} f_m^{kc,s}(r, z) &= \\ &= \frac{-1}{2m} \left[ C_k^m(r) + D_k^m(r) \right] \sigma_{zzm}^{kc,s}(z), \\ \tau_m^{kc,s}(\rho, z) &= \\ &= \frac{1}{2m} \left[ C_k^m(r) + D_k^m(r) \right] \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zzm}^{kc,s}(z), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\rho\rho m}^{kc[s]}(r, z) &= \\ &= \frac{1}{2\rho^2} \left[ (m+1)C_k^m(r) + \right. \\ &\quad \left. + (m-1)D_k^m(r) \right] \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z) - \\ &\quad - \frac{1}{2m} \left[ C_k^m(r) + D_k^m(r) \right] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi\varphi m}^{kc[s]}(r, z) &= \\ &= \pm \frac{1}{2r^2} \left[ (m+1)C_k^m(r) - \right. \\ &\quad \left. - (m-1)D_k^m(r) \right] \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z) \left\{ \frac{\sin(m\varphi)}{\left[ \cos(m\varphi) \right]} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi\varphi m}^{kc[s]}(r, z) &= \\ &= R_{m+2k}^m(r) \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z) - \sigma_{\rho\rho m}^{kc[s]}(r, z) - \\ &\quad - \frac{1}{m} \left[ C_k^m(r) + D_k^m(r) \right] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{rzm}^{kc[s]}(r, z) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial r} \tau_m^{kc,s}(r, z) = \frac{-1}{2\rho} \left[ C_k^m(r) - \right. \end{aligned}$$

$$\left. - D_k^m(r) \right] \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z),$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi zm}^{ks[c]}(r, z) &= \\ &= \mp \frac{1}{2r} \left[ C_k^m(r) + \right. \\ &\quad \left. + D_k^m(r) \right] \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zzm}^{kc[s]}(z) \left\{ \frac{\sin(m\varphi)}{\left[ \cos(m\varphi) \right]} \right\}, \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} C_k^m(r) &= \frac{r}{2(2k+m+1)} \times \\ &\times \left[ R_{m+2k+1}^{m+1}(r) - R_{m+2k-1}^{m+1}(r) \right], \\ D_k^m(\rho) &= \frac{r}{2(2k+m+1)} \times \\ &\times \left[ R_{m+2k-1}^{m-1}(r) - R_{m+2k+1}^{m-1}(r) \right]. \end{aligned}$$

In the case of an axial symmetric plane strain state ( $m=0$ ), the solution of the inverse thermo-elastic problem can be represented in terms of Zernike polynomials  $R_{2k}^0(r)$ :

$$\sigma_{zz}(r) = \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_{zz}^k R_{2k}^0(r),$$

$$\sigma_{\rho\rho}(r) = \sum_{k=1}^{\infty} \sigma_{zz}^k \sigma_{\rho\rho}^k(r),$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}(r) = \sum_{k=1}^{\infty} \sigma_{zz}^k \sigma_{\varphi\varphi}^k(r),$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\rho\rho}^k(r) &= \\ &= \frac{1}{\rho^2} \int_0^\rho t R_{2k}^0(t) dt = \\ &= \frac{1}{2(2k+1)\rho} \left[ R_{2k+1}^1(\rho) - R_{2k-1}^1(\rho) \right], \end{aligned}$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^k(r) = R_{2k}^0 - \sigma_{\rho\rho}^k(r).$$

## REFERENCES

1. **Yablon A.D.**, Recent progress in optical fiber refractive index profiling, Proceedings of the Optical Fiber Communication Conference/National Fiber Optic Engineers Conference, Los Angeles, USA. 6 – 10 March 2011, Paper OMF1. OSA Technical Digest (CD), Optical Society of America, 2011.
2. **Aben H., Ainola L., Anton J.**, Integrated photoelasticity for nondestructive residual stress measurements in glass, *Optics and Lasers in Engineering*. 33 (1) (2000) 49–64.
3. **Puro A., Aben H.**, Tensor field tomography for residual stress measurement in glass articles, Proceedings of the 7<sup>th</sup> European Conference on Non-Destructive Testing, Copenhagen, 26 – 29 May, 1998. *NTD net*. 3 (8) (1998) 2390–2397.
4. **Fuki A.A., Kravtsov Y.A., Naida O.N.**, Geometrical optics of weakly anisotropic media, Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam, 1998.
5. **Pfitzenreiter T., Schuster T.**, Tomographic reconstruction of the curl and divergence of 2D vector fields taking refractions into account, *SIAM Journal on Imaging Sciences*. 4 (1) (2011) 40–56.
6. **Svetov I.E., Derevtsov E.Yu., Volkov Yu.S., Schuster T.**, A numerical solver based on B-splines for 2D vector field tomography in a refracting medium, *Mathematics and Computers in Simulation*. 97 (March) (2014) 207–223.
7. **Puro A.E.**, Tomography in optically axisymmetric media, *Optics and Spectroscopy*. 124 (2) (2018) 278–284.
8. **Puro A., Karov D.**, Inverse problem of thermoelasticity of fiber gratings, *Journal of Thermal Stresses*. 39 (5) (2016) 500 – 512.
9. **Puro A., Karov D.**, Polarization tomography of residual stresses in cylindrical gradient-index lenses, *Optics and Spectroscopy*. 124 (5) (2018) 735–740.
10. **Born M., Wolf E.**, Principles of optics, 7<sup>th</sup> edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2019.
11. **Puro A.**, Cormack-type inversion of exponential Radon transform, *Inverse problems*. 17 (1) (2001) 179–188.
12. **Puro A.**, Polarization tomography of the Tokamak plasma magnetic field, *Optics and Spectroscopy*. 116 (1) (2014) 122–129.
13. **Bieg B., Chrzanowski J., Kravtsov Y.A., Orsitto F.**, Main physical factors limiting the accuracy of polarimetric measurements in Tokamak plasma, *Physics Procedia*. 62 (2015) 107–112.
14. **Zeng G.L., Li Y.**, A discrete convolution kernel for No-DC MRI, *Inverse Problems*. 31 (8) (2015) 085006.
15. **Braun H., Hauck A.**, Tomographic reconstruction of vector fields, *IEEE Transactions on Signal Processing*. 39 (2) (1991) 464–471.
16. **Gardon R.**, Thermal tempering of glass, In the book “Glass Science and Technology, Vol. 5: Elasticity and Strength in Glasses”, Edited by D.R. Uhlmann, N.J. Kreidl. Ch. 5, Academic Press, New York (1980) 145–213.
17. **Pretzier G., Jäger H., Neger T., et al.**, Comparison of different methods of Abel inversion using computer simulated and experimental side-on data, *Zeitschrift für Naturforschung. A*. 47a (1992) 955–970.
18. **Fricker P.**, Zernike polynomials and functions (orthogonal basis on the unit circle), Version 1.3.0.1. (6.84 KB), 2016, <https://se.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/7687-Zernike-polynomials>.
19. **Killer C.**, Abel inversion algorithm, Fourier-based reconstruction of an unknown radial distribution assuming cylindrical symmetry version 1.5.0.0 (4.17 KB), 2016. <https://au.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/43639-abel-inversion-algorithm>.
20. **Wang Y.**, Radial gradient index rod containing Li<sup>+</sup>, *Acta Photonica Sinica*. 31 (7) (2002) 897–900.
21. **Adam J.A., Pohrivchak M.**, Evaluation of ray-path integrals in geometrical optics, *International Journal of Applied and Experimental Mathematics*. 1 (2) (2016) 108.
22. **Ramadan W.A., Wahba H.H., Shams El-Din M.A.**, Two-dimensional refractive index and birefringence profiles of a graded index bent optical fibre, *Optical Fiber Technology*. 36 (July) (2017) 115–124.
23. **Karov D.D.**, Polarizatsionnaya tomografiya napryazhyonnogo sostoyaniya v gradientno-op-



ticheskikh strukturakh [Polarizing tomography of a stressed state in the gradient-optical structures], PhD Thesis, Specialty 01.04.04, Peter the Great

St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, 2012 (in Russian), <http://fizmathim.com/read/369384/a/?#?page=16>.

*Received 01.10.2020, accepted 14.10.2020.*

## THE AUTHORS

### **KAROV Dmitry D.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

[dmkarov@yandex.ru](mailto:dmkarov@yandex.ru)

### **PURO Alfred E.**

*Euroacademy*

4 Mustamäe tee, Tallinn, 10621, Estonia

[alfredpuro@gmail.com](mailto:alfredpuro@gmail.com)

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Yablon A.D.** Recent progress in optical fiber refractive index profiling // Proceedings of the Optical Fiber Communication Conference/National Fiber Optic Engineers Conference. Los Angeles, USA. 6 – 10 March 2011. Paper OMF1. OSA Technical Digest (CD). Optical Society of America, 2011.

2. **Aben H., Ainola L., Anton J.** Integrated photoelasticity for nondestructive residual stress measurements in glass // Optics and Lasers in Engineering. 2000. Vol. 33. No. 1. Pp. 49–64.

3. **Puro A., Aben H.** Tensor field tomography for residual stress measurement in glass articles // Proceedings of the 7<sup>th</sup> European Conference on Non-Destructive Testing. Copenhagen. 26 – 29 May, 1998. NTD net. 1998. Vol. 3. No. 8. Pp. 2390–2397.

4. **Fuki A.A., Kravtsov Y.A., Naida O.N.** Geometrical optics of weakly anisotropic media. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers, 1998. 182 p.

5. **Pfizenreiter T., Schuster T.** Tomographic reconstruction of the curl and divergence of 2D vector fields taking refractions into account // SIAM Journal on Imaging Sciences. 2011. Vol. 4. No. 1. Pp. 40–56.

6. **Svetov I.E., Derevtsov E.Yu., Volkov Yu.S., Schuster T.** A numerical solver based on B-splines for 2D vector field tomography in a refracting medium // Mathematics and Computers in Simulation. 2014. Vol. 97. March. Pp. 207–223.

7. **Пуро А.Э.** Томография в оптически осесимметричных средах // Оптика и спектроскопия. 2018. Т. 124. № 2. С. 280–286.

8. **Puro A., Karov D.** Inverse problem of thermoelasticity of fiber gratings // Journal of Thermal Stresses. 2016. Vol. 39. No. 5. Pp. 500–512.

9. **Пуро А.Э., Каров Д.Д.** Поляризациянная томография остаточных напряжений в цилиндрических градах // Оптика и спектроскопия. 2018. Т. 124. № 5. С. 700–705.

10. **Борн М., Вольф Э.** Основы оптики. Пер. с англ. 2-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1973. 720 с.

11. **Puro A.** Cormack-type inversion of exponential Radon transform // Inverse problems. 2001. Vol. 17. No. 1. Pp. 179–188.

12. **Пуро А.Э.** Поляризациянная томография магнитного поля плазмы Токамака // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 116. № 1. С. 135–142.

13. **Bieg B., Chrzanowski J., Kravtsov Y.A., Orsitto F.** Main physical factors limiting the ac-

curacy of polarimetric measurements in Tokamak plasma // *Physics Procedia*. 2015. Vol. 62. Pp. 107–112.

14. **Zeng G.L., Li Y.** A discrete convolution kernel for No-DC MRI // *Inverse Problems*. 2015. Vol. 31. No. 8. P. 085006.

15. **Braun H., Hauck A.** Tomographic reconstruction of vector fields // *IEEE Transactions on Signal Processing*. 1991. Vol. 39. No. 2. Pp. 464–471.

16. **Gardon R.** Thermal tempering of glass // *Glass Science and Technology*. Vol. 5. *Elasticity and Strength in Glasses*. Edited by D.R. Uhlmann, N.J. Kreidl. Chapter 5. New York: Academic Press, 1980. Pp. 145–213.

17. **Pretzier G., Jäger H., Neger T., Philipp H., Woisetschläger J.** Comparison of different methods of Abel inversion using computer simulated and experimental side-on data // *Zeitschrift für Naturforschung. A*. 1992. Vol. 47a. Pp. 955–970.

18. **Fricker P.** Zernike polynomials and functions (orthogonal basis on the unit circle). Version 1.3.0.1. (6.84 KB). 2016. <https://se.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/7687-Zernike-polynomials>.

19. **Killer C.** Abel inversion algorithm. Fourier-based reconstruction of an unknown radial distribution assuming cylindrical symmetry version 1.5.0.0 (4.17 KB). 2016. <https://au.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/43639-abel-inversion-algorithm>.

20. **Wang Y.** Radial gradient index rod containing  $\text{Li}^+$  // *Acta Photonica Sinica*. 2002. Vol. 31. No. 7. Pp. 897–900.

21. **Adam J.A., Pohrivchak M.** Evaluation of ray-path integrals in geometrical optics // *International Journal of Applied and Experimental Mathematics*. 2016. Vol. 1. No. 2. P. 108.

22. **Ramadan W.A., Wahba H.H., Shams El-Din M.A.** Two-dimensional refractive index and birefringence profiles of a graded index bent optical fibre // *Optical Fiber Technology*. 2017. Vol. 36. July. Pp. 115–124.

23. **Каров Д.Д.** Поляризация томография напряженного состояния в градиентно-оптических структурах. Дисс. ... канд. физико-математических наук. Специальность 01.04.04. СПб.: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2012. 182 с.

*Статья поступила в редакцию 01.10.2020, принята к публикации 14.10.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**КАРОВ Дмитрий Дмитриевич** – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ПУРО Альфред Эдуардович** – доктор физико-математических наук, профессор Евроакадемии, г. Таллинн, Эстония.

10621, Эстония, г. Таллинн, ул. Мустамяэ, 4  
alfredpuro@gmail.com

## ПОЛУЧЕНИЕ ФТОРИДА ВОДОРОДА ИЗ ГЕКСАФТОРИДА УРАНА В РЕЖИМЕ ГОРЕНИЯ

**Д.С. Пашкевич<sup>1</sup>, А.Р. Зимин<sup>1</sup>, Ю.И. Алексеев<sup>2</sup>,  
Д.А. Мухортов<sup>2</sup>, П.С. Камбур<sup>1</sup>, В.Б. Петров<sup>3</sup>,  
Д.А. Баженов<sup>4</sup>, П.А. Смолкин<sup>4</sup>, В.В. Капустин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> ООО «Новые химические продукты»,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>3</sup> ФГУП «Российский научный центр „Прикладная химия“»,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>4</sup> АО «Сибирский химический комбинат»,  
г. Северск Томской области, Российская Федерация

Гексафторид урана, обедненного по изотопу U-235 (ОГФУ), является побочным продуктом изотопного обогащения урана, который направляют на долгосрочное хранение. Эффективные промышленные технологии, позволяющие вернуть в технологический цикл фтор, в настоящее время отсутствуют. Авторами статьи предложен метод переработки ОГФУ в пламени водорода и кислорода, на основе которого могут быть получены фторид водорода и оксиды урана. С помощью программного кода собственной разработки и комплекса АСТРА.4 выполнены термодинамические расчеты равновесных составов веществ в системе элементов U-F-H-O и показано, что, если количество атомов водорода превышает количество атомов фтора, то при температуре выше 1150 К основным фторсодержащим веществом в термодинамически равновесной смеси является фтористый водород, а основным урансодержащим – диоксид урана. Предложенный метод авторы экспериментально исследовали на созданной ими пилотной установке и показали, что состав его продуктов близок к термодинамически равновесному. Полученные результаты могут стать основой для промышленной технологии получения фторида водорода из ОГФУ.

**Ключевые слова:** обедненный гексафторид урана, диоксид урана, фтористый водород, горение

**Ссылка при цитировании:** Пашкевич Д.С., Зимин А.Р., Алексеев Ю.И., Мухортов Д.А., Камбур П.С., Петров В.Б., Баженов Д.А., Смолкин П.А., Капустин В.В. Получение фторида водорода из гексафторида урана в режиме горения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 149–161. DOI: 10.18721/JPM.13412

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## HYDROGEN FLUORIDE OBTAINING FROM URANIUM HEXAFLUORIDE IN THE COMBUSTION MODE

**D.S. Pashkevich<sup>1</sup>, A.R. Zimin<sup>1</sup>, Yu.I. Alexeev<sup>2</sup>,  
D.A. Mukhortov<sup>2</sup>, P.S. Kambur<sup>1</sup>, V.B. Petrov<sup>3</sup>,  
D.A. Bazhenov<sup>4</sup>, P.A. Smolkin<sup>4</sup>, V.V. Kapustin<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> LLC "New Chemical Products",  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>3</sup> Russian Scientific Center "Applied Chemistry",  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>4</sup> JSC "Siberian Chemical Plant",  
Seversk, Tomsk region, Russian Federation

Currently, there are no effective industrial technologies to return fluorine into a technological cycle. The authors have proposed a method for processing uranium hexafluoride depleted in the U-235 (DUHF) isotope in a hydrogen-oxygen flame that can be used as a basis for obtaining hydrogen fluoride and uranium oxides. Using own devising program code and complex ASTRA.4, performed thermodynamic calculations in the U-F-H-O elements system and it was shown that if the number of hydrogen atoms exceeded the number of fluorine atoms, then at temperatures above 1150 K, the only fluorine-containing substance in the thermodynamically equilibrium mixture was HF, while the main uranium-containing was UO<sub>2</sub>. The proposed method was experimentally investigated at a pilot plant and it was shown that the composition of its products was close to thermodynamic equilibrium. The results can become the basis for industrial technology of the hydrogen fluoride production from DUHF.

**Keywords:** depleted uranium hexafluoride, uranium dioxide, hydrogen fluoride, combustion

**Citation:** Pashkevich D.S., Zimin A.R., Alexeev Yu.I., Mukhortov D.A., Kambur P.S., Petrov V.B., Bazhenov D.A., Smolkin P.A., Kapustin V.V., Hydrogen fluoride obtaining from uranium hexafluoride in the combustion mode, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 149–161. DOI: 10.18721/JPM.13412

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

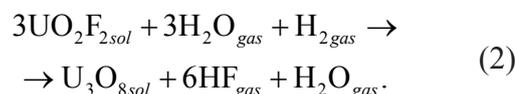
## Введение

В результате изотопного разделения природного урана образуется побочный продукт – гексафторид урана, обедненный по изотопу <sup>235</sup>U (ОГФУ). Гексафторид урана относится к веществам первого класса опасности, поэтому его накопление и хранение представляет собой экологическую угрозу. В то же время ОГФУ можно рассматривать как источник ядерно-чистого урана, обедненного по <sup>235</sup>U, который целесообразно использовать для производства МОХ-топлива (*англ.* Mixed-Oxide fuel) для реакторов на быстрых нейтронах, а также фтора. В настоящее время ОГФУ хранят на обогатительных предприятиях Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом».

Разработанные в России методы переработки ОГФУ обладают рядом серьезных недостатков, поэтому не нашли коммерческого применения [1–4].

На текущий момент известна лишь одна промышленная технология переработки ОГФУ – двустадийный гидролиз с получением водного раствора фторида водорода и октаоксида триурана, разработанный фран-

цузской компанией “Orano” [5, 6]:

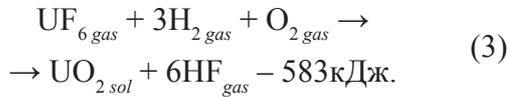


Для полной регенерации фтора этим способом используют избыток воды, и основными фторсодержащими продуктами выступают фторид водорода и его азеотропный водный 40%-й раствор, что не позволяет замкнуть ядерный топливный цикл по фтору.

В России данную технологию использует АО «Электрохимический завод» (ЭХЗ) на установке W-ЭХЗ. Стоит отметить, что затраты на производство фторида водорода на указанной установке превышают таковые на производство фторида водорода традиционным методом (сернокислотное разложение высококачественного флюорита), поэтому эксплуатация установки имеет экологическую направленность [7].

Авторами данной статьи предложен способ регенерации фтора в виде фторида во-

дорода из ОГФУ его обработкой в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя, например,

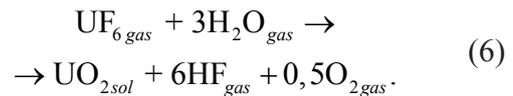
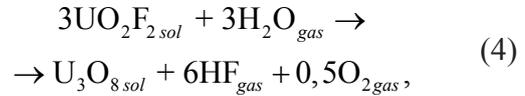


Расчетным путем показано, что процесс (3) термодинамически не запрещен, его тепловой эффект таков, что адиабатическая температура продуктов может составить величину около 2500 К, т. е. возможно протекание процесса в режиме горения. Также расчетами показано, что в системе элементов U-F-H-O, когда количество атомов водорода превышает количество атомов фтора, при температуре выше 1150 К в термодинамически равновесной смеси основным фторсодержащим веществом является фторид водорода, а основными урансодержащими – оксиды урана. Эти выводы подтверждены экспериментами на созданной нами пилотной установке.

### Термодинамическое исследование процессов гидролиза фторидов урана

Согласно данным монографии [8], фто-

рид водорода может быть получен из фторидов урана гидролизом:



Для оценки диапазона температуры, в котором целесообразно проводить процессы (1), (2) и (4) – (6), были рассчитаны значения изменения энергии Гиббса  $\Delta G$  в зависимости от температуры  $T$  (рис. 1).

Из анализа данных рис. 1 следует, что для достижения высокой степени регенерации фтора из гексафторида урана без избытка воды, необходимо проводить его гидролиз при температуре свыше 1150 К.

Такую температуру можно получить, если обрабатывать ГФУ в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя:

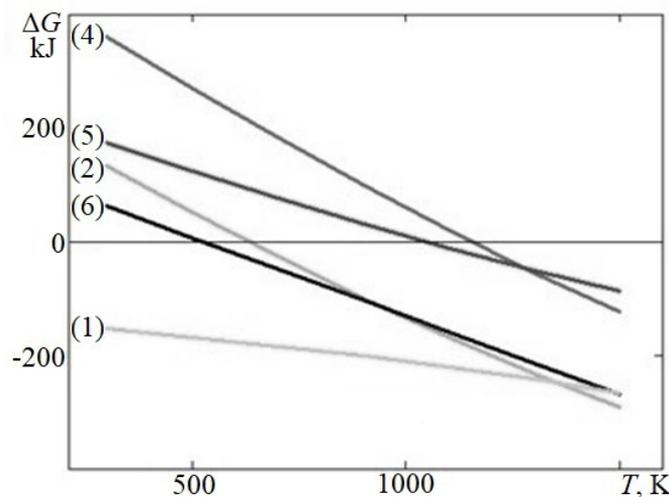
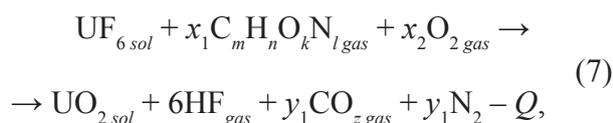


Рис. 1. Изменения энергии Гиббса для реакций гидролиза фторидов урана в зависимости от температуры (номера кривых соответствуют номерам реакций)



где  $\text{C}_m \text{H}_n \text{O}_k \text{N}_l$  – летучее водородсодержащее вещество,  $n > 0, m \geq 0, k \geq 0, l \geq 0; nx_1 \geq 6, 2x_2 > 2, Q \approx 10^2 - 10^3$  кДж,  $T > 10^3$  К.

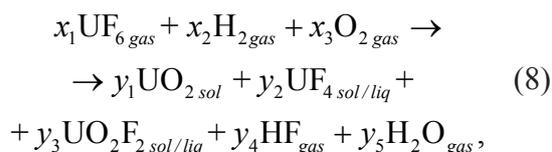
Количество топлива и окислителя выбирают так, чтобы фтор был полностью регенерирован в виде фтористого водорода без образования воды, а основным урансодержащим веществом был бы диоксид урана.

Следует отметить, что в предложенном авторами методе тепло в зону реакции подводят не от стенки реактора, а в результате химического тепловыделения, поэтому температура стенок реактора может быть на уровне 100 °С.

При использовании водорода в качестве водородсодержащего топлива (реакция (3)), адиабатическая температура продуктов, а также температура с учетом поправки на лучистый теплообмен [9], рассчитанная на основе закона Кирхгофа, составляют 2540 К и 1670 К соответственно. Таким образом, имеется возможность регенерировать фтор из ОГФУ в виде фторида водорода без избытка воды по схеме (3) в режиме горения.

### Термодинамически равновесный состав веществ в системе элементов U-F-H-O

Расчет термодинамически равновесного состава веществ в системе элементов U-F-H-O осуществляли на основе метода минимизации энергии Гиббса для смеси веществ, предполагая, что наиболее стабильными соединениями являются диоксид урана, тетрафторид урана, дифторид-диоксид урана, фтористый водород и вода [10, 11]:



где  $x_j, y_j$  – стехиометрические коэффициенты.

Верификация модели была выполнена путем сравнения полученных результатов с

расчетными, для которых использовали программный пакет АСТРА.4. В основе последнего лежит метод расчета термодинамически равновесного состава с поиском максимума энтропии [11, 12]. Результаты расчета представлены в табл. 1. Расхождение результатов расчета методами минимизации энергии Гиббса и максимизации энтропии при температуре выше 1150 К составляет менее 20%, при температуре выше 1150 К. Это расхождение, вероятно, связано с различием значений термодинамических функций рассматриваемых веществ в использованных справочниках. Так, например, в справочнике [10], из которого брали данные при расчете по методу минимизации энергии Гиббса, значение стандартной энтальпии образования для  $\text{UF}_4$  составляет  $-1854$  кДж/моль, а значение того же параметра в справочном издании [11], который использовали при расчетах в программном комплексе АСТРА.4, составляло  $-1920$  кДж/моль. Расхождения в несколько процентов наблюдаются и по другим параметрам (теплоемкость, стандартная энтропия образования), что и приводит к 20%-му отличию для диоксида урана и 6%-му для фтористого водорода. Таким образом, разработанная модель пригодна для расчета термодинамически равновесного состава.

Из результатов, представленных в табл. 1, следует, что основным фторсодержащим веществом в термодинамически равновесной смеси при температуре свыше 1100 К является фторид водорода HF, а основным урансодержащим веществом – диоксид урана  $\text{UO}_2$ . Содержание фторидов урана составляет менее 5%, а при температуре выше 1700 К – менее 0,5%; содержание воды при температуре свыше 1300 К – примерно единицы процентов.

Таким образом, оказывается, что практически полная регенерация фтора из ОГФУ по реакции (3) термодинамически не запрещена.

Результаты термодинамического анализа позволяют сделать вывод о целесообразности экспериментального исследования процесса получения фторида водорода при взаимодействии гексафторида урана с водородом и кислородом в режиме горения.



Таблица 1

**Расчетный термодинамически равновесный состав веществ  
в системе элементов 1U-6F-6H-2O**

T, К	Концентрация соединения, C, мол.%									
	UO <sub>2</sub>		UF <sub>4</sub>		$\frac{UO_2F_2}{UOF_3}$		H <sub>2</sub> O		HF	
	G	Астра	G	Астра	G	Астра	G	Астра	G	Астра
700	< 0,1	< 0,1	20,0	19,5	< 0,1	< 0,1	40,0	39,1	40,0	40,9
900	1,0	< 0,1	19,0	17,8	< 0,1	< 0,1	40,0	35,1	40,0	47,1
1100	17,0	10,3	0,9	4,1	< 0,1	< 0,1	1,5	8,1	80,6	77,6
1300	16,9	13,8	0,8	< 0,1	< 0,1	< 0,1	2,7	1,9	79,6	84,3
1500	16,7	13,4	0,3	0,6	< 0,1	< 0,1	3,5	2,2	79,5	83,8
1700	16,3	12,9	0,3	0,7	< 0,1	0,8	3,9	2,7	79,5	82,9

Пр и м е ч а н и е. Расчеты проведены с помощью программного кода собственной разработки (G) и программного комплекса АСТРА.4.

**Экспериментальное исследование  
взаимодействия гексафторида урана  
с водородом и кислородом в режиме горения**

Для экспериментального исследования состава продуктов процесса переработки ОГФУ в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя, была создана пилотная установка.

Установка (рис. 2) состоит из четырех основных функциональных узлов.

Узел подготовки и подачи исходных газообразных веществ 1 предназначен для подачи в реактор ОГФУ, водорода, аммиака, фтора и азота. Аммиак и фтор использовали в качестве самовоспламеняющийся пары для инициирования горения основного факела. Управление расходами всех газов осуществляли с помощью регуляторов расхода фирмы «Bronkhorst».

Главным элементом реакторного узла 2 являлся реактор типа «туннельная горелка» с рубашкой охлаждения, куда подавали воду с температурой около 90 °С для исключения конденсации фтористого водорода. Длина и диаметр реактора составляли 2650 и 142 мм соответственно. Реактор состоял из двух цилиндрических секций длиной 1,00 м и одной

конусной секции длиной 0,65 м. Между секциями в реакторе были смонтированы измерительные фланцы, в которых установлены хромель-алюмелевые термопары в защитных чехлах, а также датчики давления. Подачу компонентов в реактор осуществляли с помощью двух форсунок, установленных в форсуночном блоке SB1.

Узел разделения твердой и газовой фаз 3 состоял из сборников твердой фазы С1, С2, С3, теплообменника Т5, в котором поток охлаждали до температуры 120 °С, циклонного аппарата СА и металлокерамического фильтра F1, в котором отделяли частицы с размером более 0,15 мкм.

Узел конденсации фторида водорода и воды 4 представлял собой теплообменник типа «труба в трубе», где поддерживали температуру – 40 °С.

На пилотной установке исследовали процесс взаимодействия ОГФУ с водородом и кислородом в режиме горения при соотношении компонентов, близком к приведенному в реакции (3). В опытах меняли расход ОГФУ от 1 до 7 г/с, что соответствовало скорости смеси исходных веществ в реакторе 0,02 – 0,20 м/с при температуре 90 °С.

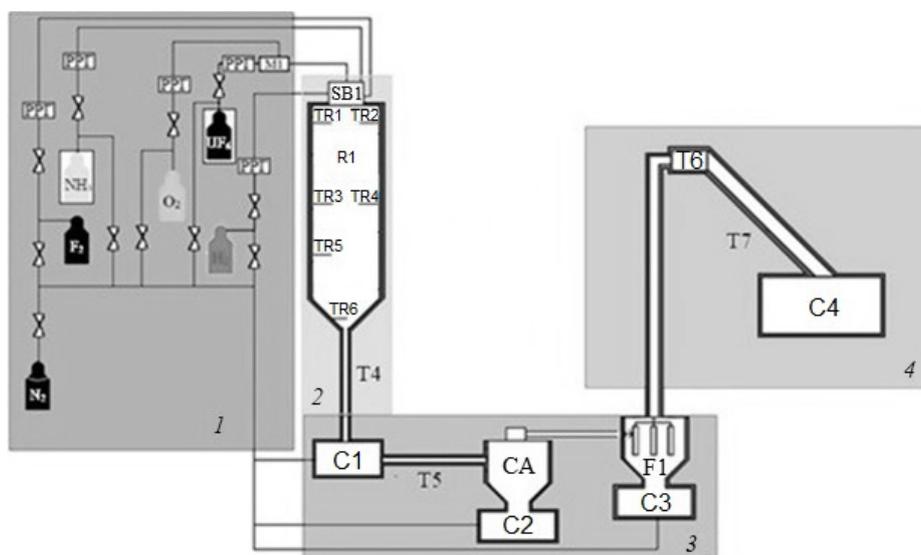


Рис. 2. Схема пилотной установки:

1 – узел подготовки и подачи исходных газообразных веществ, 2 – реакторный узел, 3 – узел разделения твердой и газовой фаз, 4 – узел конденсации фторида водорода и воды; SB1 – форсуночный блок, TR1 – TR6 – термопары, C1 – C4 – сборники твердой фазы, T4 – T7 – теплообменники, CA – циклонный аппарат, F1 – металлокерамический фильтр

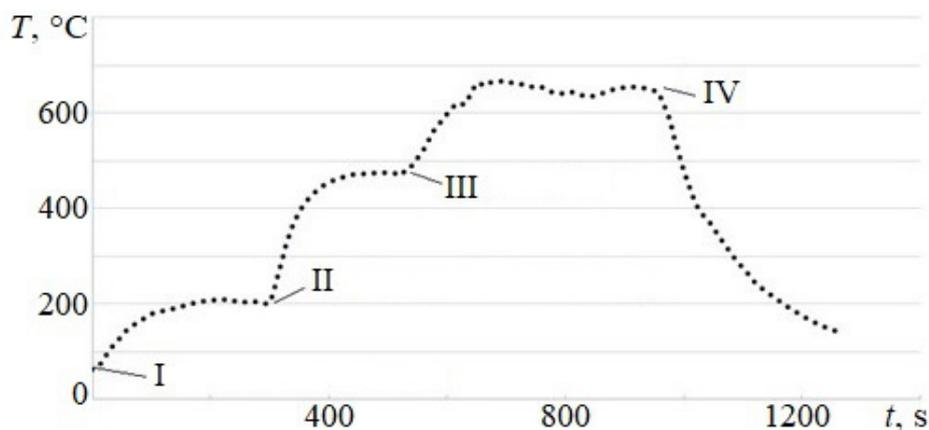


Рис. 3. Зависимость температуры спая термопары TR2 (см. рис. 2) в реакторе от времени.

Отмечены стадии процесса: I – подача  $\text{NH}_3$  и  $\text{F}_2$ , II – подача  $\text{H}_2$  и  $\text{O}_2$ , III – подача ОГФУ, IV – прекращение подачи компонентов.

Расходы газов, г/с:  $\text{F}_2$  – 0,010,  $\text{NH}_3$  – 0,014, ОГФУ – 1,50,  $\text{H}_2$  – 0,05,  $\text{O}_2$  – 0,27

С помощью термопар наблюдали за формированием фронта пламени. Характерная термограмма опыта представлена на рис. 3. Показана зависимость температуры спая термопары TR2 (первый измерительный фланец, 40 мм от оси) в реакторе от времени.

На рисунке четко виден рост температуры при подаче аммиака и фтора (самовоспламенение), водорода и кислорода (горение кислород-водородного пламени) и ОГФУ – изменения температуры составляют сотни градусов.

Таким образом, было установлено, что трехкомпонентный факел ОГФУ-водород-кислород надежно формируется и стабильно горит при иницировании фтор-аммиачным пламенем при расходе ОГФУ от 1 до 7 г/с и соотношении компонентов, близком к представленному в реакции (3).

На рис. 4 приведены термограммы термопар, установленных в трех измерительных фланцах, для расходов ОГФУ, близких к минимальному и максимальному.

На основании данных, приведенных на рис. 3 и 4, можно сделать вывод, что длина факела в реакторе не превышала 1 м в исследованном диапазоне изменения расходов.

Основным урансодержащим продуктом процесса (3) являлся порошок оксидов урана, главным образом диоксида урана и октаоксида триурана. Более 97 % порошка находилось в гравитационном сборнике С1.

Содержание фтора, ковалентно связанного с ураном и определяемое с помощью инструментальных методов – рентгенофазного анализа и Фурье-ИК-спектроскопии, изменялось от 0,1 до 3%.

Жидкая фаза продуктов реакции (3) представляла собой плавиковую кислоту, с концентрацией фторида водорода более 90 масс.%.

Степень регенерации фтора из ОГФУ рассчитывали по формуле

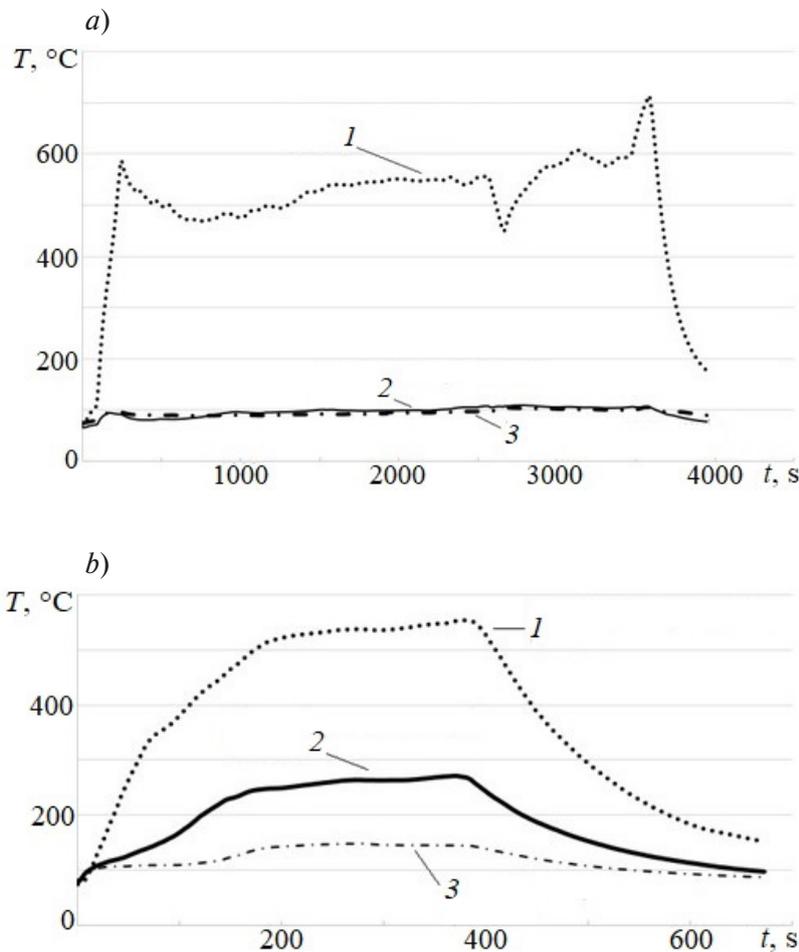


Рис. 4. Зависимости температуры спаев термопар от времени в реакторе для двух вариантов расхода компонентов, г/с: ОГФУ – 1,5,  $H_2$  – 0,04,  $O_2$  – 0,16 (a) и ОГФУ – 7,0,  $H_2$  – 0,14,  $O_2$  – 0,76 (b); расход остальных компонентов одинаков, г/с:  $F_2$  – 0,010,  $NH_3$  – 0,014. Приведены данные от термопар, установленных на верхнем (1), среднем (2) и нижнем (3) фланцах

$$R_F = \left( 1 - \frac{1}{6} \sum_i C_{UF_i} N_{UF_i} \right) \cdot 100\%, \quad (9)$$

где  $C_{UF}$  – мольная концентрация фторидов и оксифторидов урана,  $N_{UF}$  – количество атомов фтора во фторидах и оксифторидах урана.

Значение параметра  $R_F$  достигало 99 %.

В табл. 2 представлены результаты опытов по определению концентрации ковалентно связанного фтора, степени регенерации фтора и концентрации фторида водорода в плавиковой кислоте в зависимости от расхода ОГФУ и мольного соотношения исходных компонентов.

В табл. 3 представлен состав твердых продуктов процесса переработки ОГФУ, количество фторида водорода, воды и водорода, отнесенные к 1 молю ОГФУ; все величины рассчитаны по составу твердых продуктов.

На основе экспериментальных результатов, приведенных в табл. 1 и 2, можно

сделать вывод о том, что с использованием предложенного метода переработки ОГФУ удается достичь более чем 95%-ой регенерации фтора из ОГФУ в виде фторида водорода при незначительном избытке кислорода и водорода относительно стехиометрии процесса (3). При этом концентрация получаемой плавиковой кислоты (водного раствора фторида водорода) превышает 90%. Основными урансодержащими веществами являются оксиды урана, и содержание диоксида урана обычно превышает 90%. Примесными фторидами урана являются в основном дифторид-диоксид урана и тетрафторид урана, концентрация которых меняется от единиц до десятых долей процента.

Сравнение сведений, приведенных в табл. 1, с данными табл. 2 и 3, позволяет заключить, что результаты экспериментов по составу продуктов процесса (3) хорошо совпадают с результатами расчета термодинамически равновесного состава веществ в системе элементов U-F-H-O.

Таблица 2

**Зависимость концентрации фторсодержащих соединений и степени регенерации фтора от расхода ОГФУ и мольного соотношения исходных компонентов**

№	$W_{UF_6}$ , г/с	Соотношение исходных компонентов	$C_F$ , масс. %	$C_{HF}$ , масс. %	$R_F$ , %
1	3,0	$UF_6 + 3,4H_2 + 1,2O_2$	3,28	94,9	87,9
2	4,4	$UF_6 + 3,1H_2 + 1,0O_2$	1,86	96,3	92,0
3	3,0	$UF_6 + 3,3H_2 + 1,2O_2$	1,35	94,6	93,8
4	6,0	$UF_6 + 3,4H_2 + 1,0O_2$	1,18	100,0	95,3
5	3,0	$UF_6 + 3,4H_2 + 1,3O_2$	1,17	96,2	95,3
6	7,0	$UF_6 + 3,4H_2 + 1,2O_2$	0,98	94,2	95,8
7	6,0	$UF_6 + 3,4H_2 + 1,0O_2$	0,91	98,2	96,0
8	1,5	$UF_6 + 4,7H_2 + 1,2O_2$	0,12	98,5	99,5

Обозначения:  $W_{UF_6}$  – расход ОГФУ,  $C_F$  – количество ковалентно связанного с ураном фтора,  $R_F$  – степень регенерации фтора,  $C_{HF}$  – концентрация фтористого водорода в плавиковой кислоте.

Примечание. Экспериментальные значения  $C_F$  и  $C_{HF}$  получены на пилотной установке, значения  $R_F$  рассчитаны по формуле (9).



Таблица 3

## Состав твердых и газообразных продуктов процесса переработки ОГФУ

№	$W_{\text{UF}_6}$ , г/с	Химический состав твердых продуктов, масс. %								Газ, моль		
		UO <sub>2</sub>	U <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	U <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	UO <sub>3</sub>	UO <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	UOF <sub>4</sub>	UF <sub>4</sub>	UF <sub>5</sub>	HF	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>
1	3,0	56,3	5,0	–	18,2	14,1	–	6,4	–	5,27	0,32	0,44
2	4,4	92,3	–	–	–	–	–	7,7	–	5,52	0,24	0,10
3	3,0	79,5	14,6	–	–	–	5,9	–	–	5,63	0,37	0,12
4	6,0	59,3	12,2	23,6	–	–	–	4,9	–	5,72	–	0,54
5	3,0	–	43,5	51,6	–	–	–	4,9	–	5,75	0,26	0,27
6	7,0	86,3	9,4	–	0,8	–	–	–	3,4	5,75	0,4	0,13
7	6,0	96,2	–	–	–	–	–	3,8	–	5,71	0,12	0,55
8	1,5	60,2	39,2	–	–	0,3	0,3	–	–	5,97	0,10	1,62

П р и м е ч а н и я. 1. Все экспериментальные данные получены на пилотной установке.

2. Количество HF, H<sub>2</sub>O и H<sub>2</sub>, отнесенные к 1 молю ОГФУ, рассчитаны по составу твердых продуктов.

### Заключение

Термодинамическими расчетами показано, что гидролиз UF<sub>6</sub> с целью получения оксидов урана и фторида водорода при отсутствии избытка воды целесообразно проводить при температуре свыше 1150 К. Данную температуру можно достичь при обработке ОГФУ в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя.

Расчеты показали, что в термодинамически равновесной смеси в системе элементов U-F-H-O, при температуре свыше 1150 К основным фторсодержащим веществом является фтористый водород, а основным урансодержащим – диоксид урана.

На основе экспериментальных данных, полученных на пилотной установке, установлено, что факел UF<sub>6</sub>-3H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> надежно формируется и стабильно горит в реакторе типа «туннельная горелка» (ее внутренний диаметр равен 142 мм) при иницировании фтор-аммиачной самовоспламеняющейся парой во всем исследованном диапазоне расхода ОГФУ (от 1 до 7 г/с).

Основными урансодержащими продуктами процесса при избытке топлива и окислите-

ля выступают оксиды урана (примерно 10%), представленные, в основном, в виде диоксида урана и октаоксида триурана, при этом содержание UF<sub>4</sub> и UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> в оксидах урана изменяется от единиц до десятых долей процента.

Основным фторсодержащим веществом является фторид водорода, концентрация получаемой плавиковой кислоты составляет около 95%.

Степень регенерации фтора из ОГФУ достигает 99%.

Результаты экспериментов по определению состава продуктов процесса обработки ОГФУ в пламени водорода и кислорода хорошо совпадают с расчетными результатами термодинамически равновесного состава веществ в системе элементов U-F-H-O.

Таким образом, получение фторида водорода из ОГФУ можно рекомендовать как основную промышленного метода производства фторида водорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 05.608.21.0277, идентификационный номер проекта – RFMEFI60819X0277.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Орехов В.Т., Рыбаков А.Г., Шаталов В.В.** Использование обедненного гексафторида урана в органическом синтезе. М.: Энергоатомиздат, 2007. 112 с.
2. **Shatalov V., Seredenko V., Kalmakov D., Ivanov A., Gromov O., Parfenov A.** Depleted uranium hexafluoride – the fluorine source for production of the inorganic and organic compounds // Journal of Fluorine Chemistry. 2009. Vol. 130. No. 1. Pp. 122–126.
3. **Евдокимов А.Н., Громов О.Б., Вдовиченко В.Д., Иванов А.В., Сергеев Г.С., Середенко В.А., Шаталов В.В.** Изучение процесса восстановления гексафторида урана водородом на установке «Минимодуль» // Химическая технология. 2009. Т. 10. № 2. С. 118–125.
4. **Туманов Ю.Н.** Плазменные процессы в ЯТЦ. М.: Физматлит, 2003. 759 с.
5. **Borgard J.M., Herbelet F., Gwinner B.** Recycling hydrofluoric acid in the nuclear industry: The OverAzeotropic Flash process (OVAF) // Journal of Fluorine Chemistry. 2016. Vol. 185. May. Pp. 17–23.
6. **Morel B., Duperret B.** Uranium and fluorine cycles in the nuclear industry // Journal of Fluorine Chemistry. 2009. Vol. 130. No. 1. Pp. 7–10.
7. **Никипелова Н.В.** Программа Госкорпорации «Росатом» по безопасному обращению с ОГФУ. Сообщение для заседания Общественного совета Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом». М.: Топливная компания «Росатома», 2019. 11 с.
8. **Тураев Н.С., Жерин И.И.** Химия и технология урана. М.: ЦНИИАТОМИНФОРМ, 2005. 407 с.
9. **Souil J.M., Joulain P., Gengembre E.** Experimental and theoretical study of thermal radiation from turbulent diffusion flames to vertical target surfaces // Combustion Science and Technology. 1984. Vol. 41. No. 1–2. Pp. 69–81.
10. **Мищенко К.П., Равделя А.А.** Краткий справочник физико-химических величин. Ленинград: Химия, 1974. 200 с.
11. **Глушко В.П., Гурвич Л.В., Вейц И.В. и др.** Термодинамические свойства индивидуальных веществ // Справочное издание в 6 т. М.: Наука, 1978–2004. (3-е изд.). Т. 1–4. 1978–1982.
12. **Трусов Б.Г.** Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия Приборостроение. Спец. выпуск 2: Программная инженерия. 2012. С. 240–249.

*Статья поступила в редакцию 23.09.2020, принята к публикации 06.10.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПАШКЕВИЧ Дмитрий Станиславович** – доктор технических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ЗИМИН Арсений Романович** – аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
fz1min@yandex.ru



**АЛЕКСЕЕВ Юрий Иванович** – кандидат технических наук, инженер ООО «Новые химические продукты», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 11  
alexeev-588@yandex.ru

**МУХОРТОВ Дмитрий Анатольевич** – кандидат технических наук, главный технолог ООО «Новые химические продукты», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 11  
dmukhortov@mail.ru

**КАМБУР Павел Сергеевич** – ассистент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ПЕТРОВ Валентин Борисович** – старший научный сотрудник Федерального государственного унитарного предприятия «Российский научный центр „Прикладная химия“», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

193232, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, пр. Большевиков, 26  
valentinpetrov46@mail.ru

**БАЖЕНОВ Дмитрий Анатольевич** – кандидат химических наук, ведущий специалист АО «Сибирский химический комбинат», г. Северск Томской области, Российская Федерация.

636039, Российская Федерация, г. Северск Томской области, ул. Курчатова, 1  
dmitriy\_bazhenov@mail.ru

**СМОЛКИН Павел Александрович** – заместитель начальника центральной заводской лаборатории АО «Сибирский химический комбинат», г. Северск Томской области, Российская Федерация.

636039, Российская Федерация, г. Северск Томской области, ул. Курчатова, 1  
spa-net@mail.ru

**КАПУСТИН Валентин Валерьевич** – ассистент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
valentin.kapustin.2014@yandex.ru

## REFERENCES

1. Orekhov V.T., Rybakov A.G., Shatalov V.V., Ispolzovaniye obednennogo geksaforida urana v organicheskom sinteze [Using the depleted uranium hexafluoride in the organic synthesis], Energoatomizdat, Moscow, 2007 (in Russian).
2. Shatalov V., Seredenko V., Kalmakov D., et al., Depleted uranium hexafluoride – the fluorine source for production of the inorganic and organic compounds, Journal of Fluorine Chemistry. 130 (1) (2009) 122–126.
3. Evdokimov A.N., Gromov O.B., Vdovichenko V.D., et al., Uranium hexafluoride reduction with hydrogen in a “Minimodule” unit, Khimicheskaya Tekhnologiya. 10 (2) (2009) 118–125 (in Russian).
4. Tumanov Yu.N., Plazmennyye protsessy v

YaTTS. [Plasma processing in the NFC], Fizmatlit, Moscow, 2003 (in Russian).

5. **Borgard J.M., Herbelet F., Gwinner B.**, Recycling hydrofluoric acid in the nuclear industry: The Over Azeotropic Flash process (OVAF), *Journal of Fluorine Chemistry*. 185 (May) (2016) 17–23.

6. **Morel B., Duperret B.**, Uranium and fluorine cycles in the nuclear industry, *Journal of Fluorine Chemistry*. 130 (1) (2009) 7–10.

7. **Nikipelova N.V.**, Programma Goskorporatsii “Rosatom” po bezopasnomu obrashcheniyu s OG-FU [A program of “The Rosatom” state corporation on safe DUHF waste management (Report)], Fuel Company of “The Rosatom”, Moscow, 2019 (in Russian).

8. **Turayev N.S., Zherin I.I.**, Khimiya i tekhnologiya urana [Chemistry and technology of uranium], Atominform, Moscow, 2005 (in Russian).

9. **Souil J.M., Joulain P., Gengembre E.**, Experimental and theoretical study of thermal

radiation from turbulent diffusion flames to vertical target surfaces, *Combustion Science and Technology*. 41 (1–2) (1984) 69–81.

10. **Mishchenko K.P., Ravidelya A.A.**, Kratkiy spravochnik fiziko-khimicheskikh velichin [Reference book on physical and chemistry quantities], Chemistry Publishing, Leningrad, 1974 (in Russian).

11. **Glushko V.P., Gurvitch L.V., Veits I.V., et al.**, Termodinamicheskiye svoystva individualnykh veshchestv [Thermodynamic properties of the individual substances], Reference Edition (the 3<sup>rd</sup>) in 6 Vols. Nauka, Moscow, 1978–2004. Vols. 1–4. 1978–1982 (in Russian).

12. **Trusov B.G.**, Programmnaya sistema modelirovaniya fazovykh i khimicheskikh ravnovesiy pri vysokikh temperaturakh [Code system for simulation of phase and chemical equilibriums at higher temperatures], *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Instrument Engineering, Special Iss. 2: Software Engineering* (2012) 240–249 (in Russian).

*Received 23.09.2020, accepted 06.10.2020.*

## THE AUTHORS

### **PASHKEVICH Dmitrii S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
pashkevich-ds@yandex.ru

### **ZIMIN Arsenii R.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
fz1min@yandex.ru

### **ALEXEEV Yuri I.**

*LLC "New chemical products"*

11, A, Moyka River Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation  
alexeev-588@yandex.ru

### **MUKHORTOV Dmitrii A.**

*LLC "New chemical products"*

11, A, Moyka River Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation  
dmukhortov@mail.ru

**KAMBUR Pavel S.***Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

pavel.kambur@mail.ru

**PETROV Valentin B.***Russian Scientific Center "Applied Chemistry"*

26, Bolsheviki Ave., St. Petersburg, 193232, Russian Federation

valentinpetrov46@mail.ru

**BAZHENOV Dmitrii A.***JSC "Siberian Chemical Plant"*

1 Kurchatov St., Seversk, Tomsk Region, 636039, Russian Federation

dmitriy\_bazhenov@mail.ru

**SMOLKIN Pavel A.***JSC "Siberian Chemical Plant"*

1 Kurchatov St., Seversk, Tomsk Region, 636039, Russian Federation

spa-net@mail.ru

**KAPUSTIN Valentin V.***Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

valentin.kapustin.2014@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.13413

УДК 544.3:544.45:536.7:661.487:536.464

## **СТАБИЛЬНОСТЬ ФРОНТА ПЛАМЕНИ И СОСТАВ ПРОДУКТОВ ГОРЕНИЯ АММИАКА В КИСЛОРОДЕ В ПРИСУТСТВИИ ФТОРИДА ВОДОРОДА**

**Д.С. Пашкевич<sup>1</sup>, Д.А. Мухортов<sup>2</sup>, В.В. Капустин<sup>1</sup>, П.С. Камбур<sup>1</sup>,  
Е.С. Курапова<sup>3</sup>, А.Р. Зимин<sup>1</sup>, А.С. Маслова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> ООО «Новые химические продукты»,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>3</sup> ФГУП «Российский научный центр „Прикладная химия“»,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В статье предложен метод получения фторида водорода (основной фторирующий агент современной промышленности) из бифторида аммония (побочный продукт производства экстракционной фосфорной кислоты, тантала, ниобия и др.) путем сжигания  $\text{NH}_4\text{F}\cdot\text{HF}$  в кислороде  $\text{O}_2$ . Расчеты с использованием программного комплекса АСТРА.4 показали, что при соотношении химических элементов N-1,0; H-5,0; F-2,0; O-1,5, соответствующем предложенному процессу, в температурном интервале 600 – 2500 К, в термодинамически равновесной смеси единственным фторсодержащим веществом является фторид водорода, а фториды и оксифториды азота отсутствуют. Экспериментально исследован процесс горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода, и установлено, что при мольном соотношении расходов аммиак/фторид водорода 1 : 2 сформировать устойчивый факел удастся лишь с использованием метана в качестве топлива. Определены условия по соотношению расходов компонентов.

**Ключевые слова:** бифторид аммония, аммиак, фторид водорода, горение в кислороде, туннельная горелка

**Ссылка при цитировании:** Пашкевич Д.С., Мухортов Д.А., Капустин В.В., Камбур П.С., Курапова Е.С., Зимин А.Р., Маслова А.С. Стабильность фронта пламени и состав продуктов горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 162–175. DOI: 10.18721/JPM.13413

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## **THE STABILITY OF FLAME FRONT AND THE COMPOSITION OF COMBUSTION PRODUCTS OF AMMONIA IN OXYGEN IN THE PRESENCE OF HYDROGEN FLUORIDE**

**D.S. Pashkevich<sup>1</sup>, D.A. Mukhortov<sup>2</sup>, V.V. Kapustin<sup>1</sup>, P.S. Kambur<sup>1</sup>,  
E.S. Kurapova<sup>3</sup>, A.R. Zimin<sup>1</sup>, A.S. Maslova<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> LLC "New Chemical Products",  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>3</sup> Russian Scientific Center "Applied Chemistry",  
St. Petersburg, Russian Federation

The authors have proposed a way for producing hydrogen fluoride (the major fluorinating agent in the modern industry) from ammonium bifluoride (by-product in the production of extraction phosphoric acid, tantalum, niobium, etc.) by burning up  $\text{NH}_4\text{F}\cdot\text{HF}$  in oxygen. Calculations performed via program complex ASTRA.4 showed that the only fluorine-containing substance was hydrogen fluoride, whereas nitric fluorides and oxyfluorides being absent under the ratio of chemical elements N-1.0; H-5.0; F-2.0; O-1.5 (according to the proposed process), in the temperature range 600 – 2500 K, in thermodynamically equilibrium mixture. The combustion of ammonia in oxygen in the presence of hydrogen fluoride was experimentally investigated and it was found the feasibility of forming a stable flame, where a molar ratio of ammonia/hydrogen fluoride consumptions was 1 : 2, only by using methane as a fuel. The conditions for the ratio of component consumptions were determined.

**Keywords:** ammonium bifluoride, ammonia, hydrogen fluoride, combustion, tunnel burner reactor

**Citation:** Pashkevich D.S., Mukhortov D.A., Kapustin V.V., Kambur P.S., Kurapova E.S., Zimin A.R., Maslova A.S., The stability of flame front and the composition of combustion products of ammonia in oxygen in the presence of hydrogen fluoride, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 162–175. DOI: 10.18721/JPM.13413

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

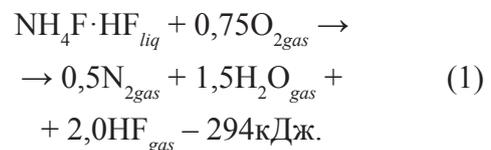
В современной промышленности соединений фтора, в качестве фторирующего агента используют в основном фторид водорода (HF). С его применением получают фториды урана в ядерном топливном цикле, фторполимеры, озонобезопасные хладоны, электронные газы и т. п. [1]. Основным промышленным методом производства фторида водорода является сернокислотное разложение концентрата природного фторида кальция  $\text{CaF}_2$  (плавиковый шпат) [2]. Запасы плавиковошпатовых руд, из которых целесообразно получать концентрат необходимого состава, ограничены. Поэтому разработка методов получения фторида водорода из альтернативного сырья является актуальной задачей.

При производстве тантала, ниобия и трифторида азота, в качестве побочного продукта образуется бифторид аммония  $\text{NH}_4\text{F}\cdot\text{HF}$  (БФА) [3]. Кроме того, БФА можно получать из водных растворов кремнефтористоводородной кислоты  $\text{H}_2\text{SiF}_6$ , являющейся побочным продуктом производства экстракционной фосфорной кислоты из фторапатита  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2$  [4, 5]. Значительная часть  $\text{H}_2\text{SiF}_6$  не находит рынка сбыта, поэтому ее нейтрализуют и фторсодержащие отходы размещают на полигонах хранения промышленных отходов. Мировые запасы фторапатита в

пересчете на фторид кальция превышают запасы самого плавикового шпата более чем в 10 раз [2, 6]. Поэтому целесообразно разработать научные основы получения фторида водорода из БФА – это позволит решить две проблемы: экологическую, связанную с обращением с фторсодержащими отходами, и коммерческую, связанную с недостатком и удорожанием природного  $\text{CaF}_2$  [7].

Для получения фторида водорода из БФА применяли различные методы, в частности сернокислотное разложение [8] и каталитическую конверсию [9], однако эти способы не нашли промышленного применения.

Получить фторид водорода из БФА можно через сжигание его в кислороде:



Здесь нижние буквенные индексы выражают агрегатные состояния веществ: твердое (*sol*), жидкое (*liq*) и газообразное (*gas*).

Температура продуктов процесса (1) может составить около 2400 К. При этом известно, что фторид водорода относится к одному из наиболее термостабильных фторидов [10].

Горение аммиака в кислороде и воздухе хорошо изучено: при распространении пламе-

ни концентрационные пределы составляют 13 – 82 и 16 – 26 об.%, а нормальная скорость 30 – 140 и 30 – 74 см·с<sup>-1</sup>, соответственно [11].

Однако сведений о влиянии фторида водорода на взаимодействие аммиака с кислородом в литературе не найдено. При этом известно, что фторид водорода является полярным веществом (его дипольный момент равен  $5,78 \cdot 10^{-30}$  Кл·м [12]); и он может оказывать как каталитическое, так и ингибирующее влияние на химические реакции [13].

Работа была нацелена как на расчет термодинамически равновесных составов в системах элементов N-H-F-O и C-N-H-F-O, так и на исследование состава продуктов взаимодействия аммиака с кислородом в режиме горения, в присутствии фторида водорода и при использовании метана в качестве горючего.

#### Методы исследования

Расчет термодинамически равновесного состава в системе химических элементов N-H-F-O и C-N-H-F-O проводили с использованием программного комплекса АСТРА.4 [14]. Углеродсодержащую систему изучали на основе полученных ранее экспериментальных результатов, согласно которым на со-

зданной лабораторной установке удавалось сформировать устойчивый факел горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода только при условии подачи метана в качестве топлива в зону реакции.

Для экспериментального исследования процесса горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода, была создана лабораторная установка (рис. 1). Вертикальный реактор 1 типа «туннельная горелка» представлял собой стальную трубу с внутренним диаметром  $d_1 = 41$  мм и высотой 500 мм. Для нагрева стенки реактора, на его внешней поверхности был закреплен нагревательный кабель, подключенный к терморегулятору.

Подачу газов в реактор осуществляли через установленный в нижней части реактора двухкомпонентный форсуночный блок 2.

Отдельно схема реактора 1 и блока 2 приведена на рис. 2. Форсуночный блок представляет собой два коаксиальных канала: осевой (наружный диаметр 3 мм, внутренний 2 мм) и кольцевой (наружный диаметр  $d_2 = 8$  мм), с зоной смешения (смесителем) диаметром 8 мм переменной длины  $h$ .

Для того чтобы исключить образование твердого БФА при контакте аммиака с фторидом водорода, потоки газов и форсунку



Рис. 1. Схема лабораторной установки:

- 1 – реактор типа «туннельная горелка»; 2 – форсуночный блок; 3 – полипропиленовый абсорбер;
- 4 – стальная емкость с датчиком давления для HF и O<sub>2</sub>; 5 – стальная емкость с датчиком давления для NH<sub>3</sub>;
- 6 – регулятор расхода газа на линии подачи HF и O<sub>2</sub>; 7 – регулятор расхода газа на линии подачи NH<sub>3</sub>

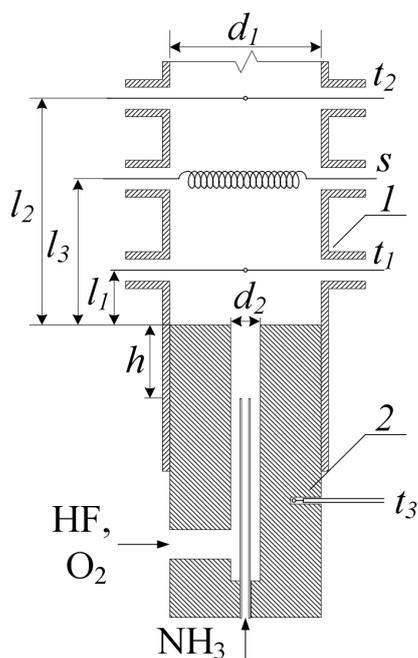


Рис. 2. Схема реактора типа «туннельная горелка» и форсуночного блока реактора:  
 1 — реактор; 2 — форсуночный блок;  
 s — электрическая спираль накаливания;  
 $t_1, t_2$  — термопары хромель-алюмелевые для измерения температуры в реакторе;  
 $t_3$  — термопара хромель-копелевая для измерения температуры форсуночного блока;  
 $h, l_1, l_2, d_1$  — геометрические параметры

нагревали до температуры около  $140^\circ\text{C}$ .

Для регистрации формирования и существования фронта горения использовали хромель-алюмелевые термопары  $t_1$  и  $t_2$  с одинаковыми диаметрами электродов 200 мкм, установленные без защитных чехлов так, чтобы спаи термопар находились на оси реактора. Термопара  $t_1$  была расположена на расстоянии  $l_1 = 15$  мм от среза форсунки, а  $t_2$  — на расстоянии  $l_2 = 62$  мм от среза (см. рис. 2).

Для измерения температуры форсуночного блока 2 в его корпус была вставлена хромель-копелевая термопара  $t_3$ . Иницирование процесса горения осуществляли с помощью электрической спирали накаливания s из нихромовой проволоки диаметром 0,3 мм, установленной на расстоянии  $l_3 = 40$  мм от среза форсунки.

Смесь кислорода и фторида водорода из

емкости 4 (см. рис. 1) поступала в реактор по кольцевому каналу форсуночного блока 2, а аммиак — по осевому каналу. Температура компонентов смеси, подаваемых в форсуночный блок, была  $25^\circ\text{C}$ . Чтобы избежать образования фторида аммония  $\text{NH}_4\text{F}$  на внутренней стенке реактора при контакте аммиака с фторидом водорода, стенку реактора термостатировали при температуре  $300^\circ\text{C}$ .

Поток продуктов после реактора по обогреваемой линии подавали в полипропиленовый сосуд 3, заполненный водой. После окончания опыта жидкость из сосуда 3 анализировали титрованием на содержание фторида водорода и аммиака.

На выходе из абсорбера 3 отбирали несколько газовых проб, которые анализировали методами газовой хроматографии и инфракрасной Фурье-спектроскопии (ИКФС). Состав газовой фазы определяли на хроматографе марки «Кристалл 2000М» с детектором по теплопроводности. Для анализа использовали две насадочные колонки длиной 3 м каждая с сорбентами — Porapak Q 80/120 (для обнаружения водорода, азота, кислорода, углекислого газа, тетрафторида углерода, метана и трифторида азота) и СаА фракция 0,25-0,40 (для обнаружения водорода, кислорода, азота и оксида углерода).

Метод ИКФС применялся для определения концентрации дифторида-оксида углерода  $\text{COF}_2$  в газообразных продуктах процесса. Для этого использовали спектрометр Shimadzu FTIR-8400S с разрешением  $0,85\text{ см}^{-1}$  и размерами кюветы  $200 \times 230 \times 170$  мм.

Эффективность способа получения фторида водорода из бифторида аммония в режиме горения характеризуется конверсией аммиака. В данном случае эту величину определяли по материальному балансу; за основу брали расходы исходных компонентов, а также состав жидкости в абсорбере 3 после опыта — величину  $K_{liq}$  и состав газообразных продуктов реакции  $K_{gas}$ :

$$K_{liq} = 100\% \cdot \frac{m(\text{NH}_3)_{out}}{m(\text{NH}_3)_{in}}, \quad (2)$$

$$K_{gas} = 100\% \cdot \frac{W(N_{2gas})_{out}}{W(NH_{3gas})_{in}}, \quad (3)$$

где  $m(NH_3)_{out}$ ,  $m(NH_3)_{in}$ , мг, – массы аммиака, собранного в абсорбере 3 и поданного в реактор, соответственно;  $W(N_2)_{out}$ ,  $см^3 \cdot с^{-1}$ , – объемный расход азота при нормальных условиях на выходе из реактора;  $W(NH_3)_{in}$ ,  $см^3 \cdot с^{-1}$ , – объемный расход аммиака при нормальных условиях на входе в реактор.

### Термодинамические расчеты в системе N-H-F-O

В системе элементов N-H-F-O, помимо целевого продукта (фторид водорода HF), известно большое количество фторсодержащих соединений:  $NF_3$ ,  $N_2F_2$ ,  $N_2F_4$ ,  $NH_4F$ ,  $NHF_2$ ,  $(NO)F$ ,  $(NO_2)F$ ,  $NOF_3$  и др. [15]. Расчеты термодинамически равновесного состава для системы элементов N-H-F-O при давлении в системе  $P = 0,1$  МПа и в температурном диапазоне 600 – 2000 К показали, что термодинамически равновесный состав продуктов реакции зависит от атомарного соотношения между водородом и фтором. В случае если число атомов фтора  $n_F$  не превышает числа атомов водорода  $n_H$ , то единственным фторсодержащим веществом в равновесной смеси

является фторид водорода, а фториды и оксифториды азота отсутствуют (рис. 3,а). Если же  $n_F$  превышает  $n_H$ , то в термодинамически равновесной смеси помимо фторида водорода присутствуют другие фторсодержащие вещества:  $NF_3$ ,  $(NO)F$ ,  $NOF_3$ , F и  $F_2$  (рис. 3,б).

При соотношении химических элементов, соответствующем уравнению (1), единственным фторсодержащим веществом в термодинамически равновесной смеси в диапазоне изменения температур 600 – 2000 К и при давлении в системе  $P = 0,1$  МПа является фторид водорода.

На основании результатов термодинамического расчета можно сделать вывод о целесообразности экспериментального исследования стабильности процесса взаимодействия аммиака с кислородом в присутствии фторида водорода в режиме горения.

### Результаты экспериментов в системе $NH_3$ -HF- $O_2$

Целью лабораторного исследования было подтверждение результатов термодинамического анализа по составу веществ в системе элементов N-H-F-O, а также определение влияния фторида водорода на процесс горения аммиака и кислорода.

Для определения конверсии аммиака в

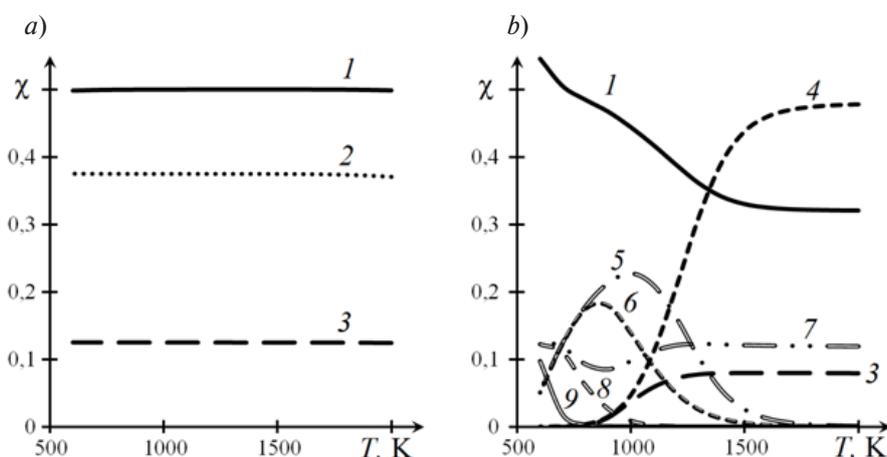


Рис. 3. Температурные зависимости термодинамически равновесного состава веществ (в мольных долях) в системе элементов N-H-F-O при различных соотношениях N-H-F-O: 1,0:5,0:2,0:1,5 (а) и 1,0:2,0:5,0:1,5 (б);  $n_F > n_H$ . Приведены данные для HF (1),  $H_2O$  (2),  $N_2$  (3), F (4),  $F_2$  (5),  $(NO)F$  (6),  $O_2$  (7),  $NF_3$  (8),  $NOF_3$  (9)

Таблица 1

**Состав продуктов взаимодействия  $\text{NH}_3$  с  $\text{O}_2$  в присутствии Ar  
в режиме горения (без учета непрореагировавшего  $\text{NH}_3$ ) и конверсия  $\text{NH}_3$   
в зависимости от расхода исходных компонентов и длины смесителя**

$h$ , мм	Исходная смесь, моль			$W$ , см <sup>3</sup> /с	$V_R$ , см/с	$V_M$ , см/с	Состав продуктов реакции, моль				$K_{gas}$ , %	$K_{liq}$ , %
	$\text{NH}_3$	$\text{O}_2$	Ar				$\text{N}_2$	Ar	$\text{H}_2$	$\text{O}_2$		
0		1,06		32,0	2,4	–	0,23			0,69	47	56
35		1,20		20,0	1,5	39,5	0,49			0,44	98	93
50	1,00	1,20	2,03	20,0	1,5	39,5	0,49	2,03	0,0	0,44	99	89
		1,03		38,0	2,9	76,3	0,42			0,24	84	88
		0,96		63,0	4,8	124,8	0,41			0,17	83	87

Обозначения:  $h$  – длина зоны смешения;  $W$  – суммарный объемный расход компонентов при температуре потока  $t = 140^\circ\text{C}$ ;  $V_R$ ,  $V_M$  – скорости потока в реакторе и в зоне смешения (соответственно) при температуре  $t = 140^\circ\text{C}$ ;  $K_{gas}$ ,  $K_{liq}$  – величины конверсии аммиака – определенная по газообразным продуктам реакции и по составу жидкости в абсорбере, соответственно.

режиме горения при условиях, характерных для созданной лабораторной установки, и влияния длины зоны смешения  $h$  на конверсию аммиака, на первом этапе экспериментального исследования были проведены опыты, в которых фторид водорода заменяли аргоном (табл. 1).

При выбранных значениях концентрации исходных веществ и скорости движения потока удалось сформировать устойчивый фронт пламени. Во всех проведенных опытах фронт горения находился в объеме реактора и в смеситель не проникал. Коэффициенты температуропроводности для газообразного азота и аргона близки (при нормальных условиях отличие составляет 3,6% [16]), поэтому можно предположить, что при замене  $\text{N}_2$  в системе  $\text{NH}_3\text{-O}_2\text{-N}_2$  эквимольным количеством Ar концентрационные пределы воспламенения изменятся незначительно [17]. Следовательно, можно утверждать, что концентрация аммиака находилась внутри концентрационных пределов воспламенения и для смеси  $\text{NH}_3\text{+O}_2\text{+Ar}$  (рис. 4). Линейная скорость газа в реакторе была существенно ниже нормальной скорости распространения пламени в смеси  $\text{NH}_3\text{+O}_2\text{+N}_2$  (Ar). Степень конверсии аммиака зависела от длины

зоны смешения, соотношения расходов компонентов и достигала 95% и выше.

При замене аргона эквимольным количеством фторида водорода (соответствующее его содержанию в БФА) сформировать устойчивый фронт пламени не удавалось в диапазоне изменения расходов компонентов  $37 - 64 \text{ см}^3\cdot\text{с}^{-1}$  при изменении длины зоны смешения от 0 до 40 мм. Линейная скорость газа в реакторе варьировалась в диапазоне  $2,9 - 4,9 \text{ см}\cdot\text{с}^{-1}$  и была ниже нормальной скорости распространения пламени в смеси  $\text{NH}_3\text{+O}_2\text{+N}_2$ . Концентрация аммиака в опытах находилась внутри концентрационных пределов распространения пламени в смеси  $\text{NH}_3\text{+O}_2\text{+N}_2$  (см. рис. 4).

Отсутствие устойчивого фронта пламени может быть связано с ингибирующим влиянием фторида водорода на скорость реакции окисления аммиака или с образованием жидкого БФА при контакте аммиака с фторидом водорода в смесителе.

Для того чтобы сформировать устойчивый фронт горения аммиака и кислорода в присутствии фторида водорода, в исходную систему можно добавить топливо, например метан, и увеличивать расход кислорода для полного окисления метана.

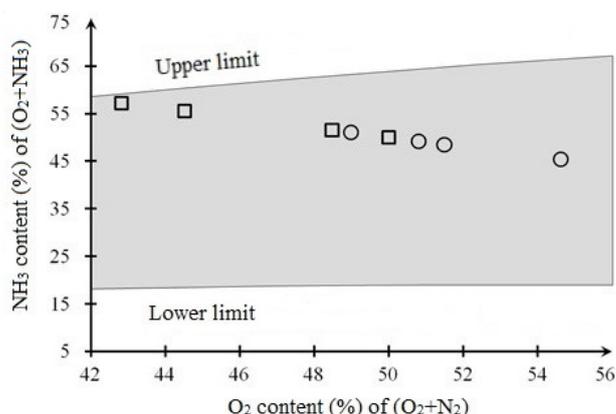


Рис. 4. Область распространения пламени  $\text{NH}_3\text{-O}_2$  (затушеванная трапеция), его концентрационные пределы (верхняя и нижняя линии-границы) и соотношения  $\text{O}_2/\text{NH}_3$  в опытах; данные приведены для экспериментов с Ar (круглые символы) и HF (квадратные символы)

Целью дальнейшего исследования было определение минимального количества метана, при котором фронт горения будет стабильным и конверсия аммиака близкой к 100%.

### Термодинамические расчеты в системе N-H-F-O-C

Расчеты термодинамически равновесного состава для системы элементов N-H-F-O-C

при давлении в системе  $P = 0,1$  МПа и в диапазоне изменения температуры 600 – 2000 К показали, что, как и для системы элементов N-H-F-O, при  $n_{\text{H}} \geq n_{\text{F}}$  единственным фторсодержащим веществом является фторид водорода (рис. 5,а). Если  $n_{\text{H}} < n_{\text{F}}$ , то в термодинамически равновесном составе, помимо фторида водорода, присутствуют другие фторсодержащие вещества:  $\text{NF}_3$ ,  $(\text{NO})\text{F}$ ,  $\text{NOF}_3$ , F,  $\text{F}_2$ ,  $\text{CF}_4$  и  $\text{COF}_2$  (рис. 5,б).

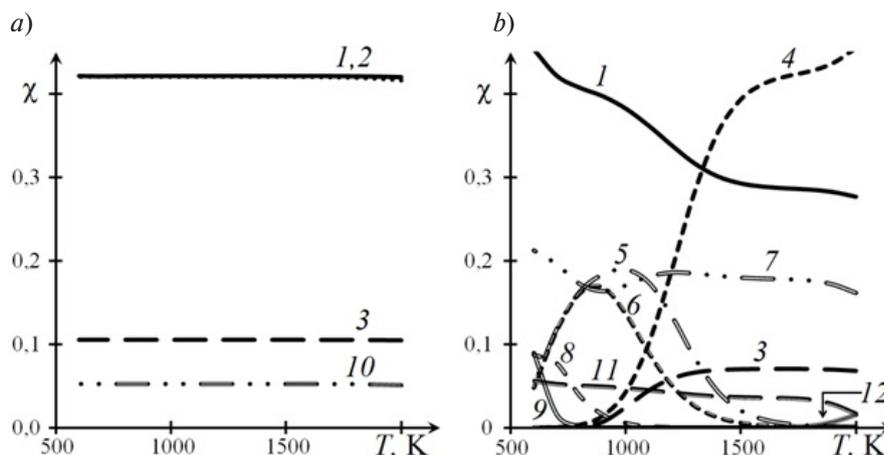


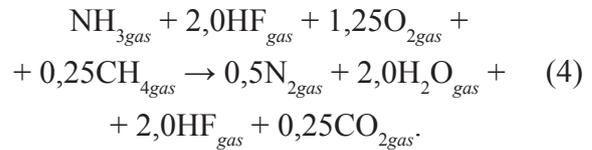
Рис. 5. Температурные зависимости термодинамически равновесного состава веществ (в мольных долях) в системе элементов N-H-F-O-C при различных соотношениях N-H-F-O-C: 1,00:6,00:2,00:2,50:0,25 (а) и 1,00:2,00:6,00:2,50:0,25 (б);  $n_{\text{F}} > n_{\text{H}}$ . Приведены данные для HF (1),  $\text{H}_2\text{O}$  (2),  $\text{N}_2$  (3), F (4),  $\text{F}_2$  (5),  $(\text{NO})\text{F}$  (6),  $\text{O}_2$  (7),  $\text{NF}_3$  (8),  $\text{NOF}_3$  (9),  $\text{CO}_2$  (10),  $\text{CF}_4$  (11),  $\text{COF}_2$  (12)

**Результаты экспериментов  
в системе NH<sub>3</sub>-HF-O<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub>**

Для стабилизации фронта пламени в системе NH<sub>3</sub>-HF-O<sub>2</sub> использовали метан, подавая в зону реакции смесь аммиака и метана. Содержание кислорода в системе соответствовало минимально необходимому для полного сгорания аммиака с образованием азота и паров воды, а также метана с образованием паров воды и диоксида углерода. Чтобы избежать возможного образования жидкого БФА при контакте аммиака с фторидом водорода в смесителе, опыты проводили при  $h = 0$  мм. Результаты экспериментов приведены в табл. 2.

Было установлено, что при концентрации метана и кислорода в исходной смеси выше 5,6 и 27,8 об.%, соответственно, удается сформировать устойчивый фронт горения. Ни метана, ни оксида углерода в продуктах реакции не было обнаружено (с точностью до 10<sup>-2</sup> %). Конверсия аммиака в режиме горения достигала 98% и практически не зависела от концентрации метана в смеси. Минимальное содержание метана и кислорода в смеси, при которых удавалось провести

реакцию в режиме горения, соответствует уравнению:



Для снижения расхода метана и содержания воды в продуктах процесса (4) можно использовать газообразный фтор F<sub>2</sub> в качестве инициатора реакционных цепей, стабилизирующего процесс горения. Известно, что элементный фтор имеет низкую энергию диссоциации, равную  $\Delta H_{\text{dis}} = 157,5$  кДж·моль<sup>-1</sup>, и наличие радикалов фтора в реагирующей смеси может стабилизировать фронт пламени [1]. Поэтому были проведены опыты, в которых в зону реакции подавали газообразный фтор в смеси с кислородом и фторидом водорода в количестве, соответствующем концентрации 0,5 – 1,3 об.% в смеси NH<sub>3</sub>+HF+O<sub>2</sub>+CH<sub>4</sub>+F<sub>2</sub>. Однако сформировать устойчивый фронт горения в присутствии газообразного фтора без метана не удавалось (табл. 3). При наличии метана в

Таблица 2

**Состав продуктов взаимодействия NH<sub>3</sub>, O<sub>2</sub> и CH<sub>4</sub> в присутствии HF в режиме горения и конверсия NH<sub>3</sub> в зависимости от расходов исходных компонентов**

Исходная смесь, моль				W, см <sup>3</sup> /с	V <sub>R</sub> , см/с	V <sub>RC</sub> , см/с	V <sub>AC</sub> , см/с	Состав продуктов реакции, об.%				K <sub>gas</sub> , %	K <sub>liq</sub> , %
NH <sub>3</sub>	HF	O <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>					H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>		
1,00	2,00	0,97	0,11	51,0	3,8	85,5	439,4	Сформировать устойчивый фронт пламени не удалось					
		1,25	0,25	50,0	3,7	82,7	437,5	0	0,50	0,01	0,25	95	97
		1,65	0,42	52,0	4,0	87,2	466,2		0,50	0,07	0,42	98	98
		1,59	0,42	53,0	4,0	88,4	480,7		0,03	0,50	0,02	0,42	96
	1,99	1,70	0,48	52,0	4,0	82,6	475,2	0	0,49	0,01	0,48	98	98

Обозначения: W – суммарный объемный расход компонентов при температуре потока  $t = 140^\circ\text{C}$ ; V<sub>R</sub>, V<sub>RC</sub>, V<sub>AC</sub> – скорости потоков в объемах реактора, кольцевого канала и осевого канала (соответственно) при температуре  $t = 140^\circ\text{C}$ ; K<sub>gas</sub>, K<sub>liq</sub> – величины конверсии аммиака – определенная по составу газообразных продуктов реакции и по составу жидкости в абсорбере после опыта, соответственно.

количестве, соответствующем концентрации 2,7 об.%, и газообразного фтора в количестве, соответствующем концентрации 0,5%, фронт горения был стабилен и конверсия аммиака в этом режиме достигала 98%. Таким образом, использование газообразного фтора позволяет снизить концентрацию метана в смеси, при которой фронт горения стабилен.

В проведенных экспериментах распространение пламени возможно как в смеси аммиака с кислородом, так и в смеси метана

с кислородом. Во всех опытах концентрация аммиака находилась внутри концентрационных пределов распространения пламени аммиака и кислорода (рис. 6), а метана – внутри концентрационных пределов распространения пламени метана и кислорода [18]. Нормальная скорость распространения пламени в смеси  $\text{CH}_4 + \text{O}_2$  составляет  $330 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$ , что в 2,4 раза больше, чем аналогичный показатель для смеси  $\text{NH}_3 + \text{O}_2$ . Поэтому можно предположить, что окисление метана является ведущей стадией волнового процесса (4) [19].

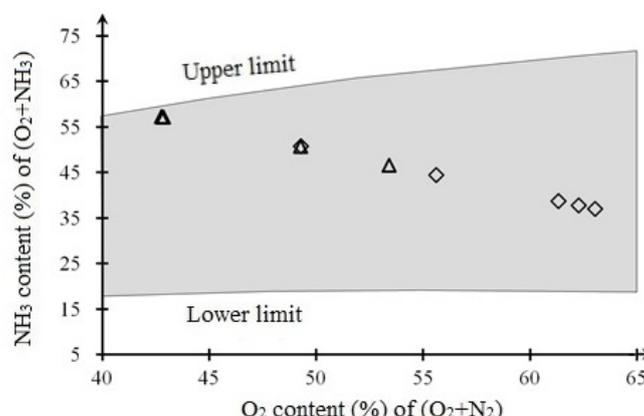


Рис. 6. Область распространения пламени  $\text{NH}_3\text{-O}_2$  (затушеванная трапеция), его концентрационные пределы (верхняя и нижняя линии—границы) и соотношения  $\text{O}_2/\text{NH}_3$  в опытах; данные приведены для экспериментов с  $\text{CH}_4$  (треугольные символы) и  $\text{F}_2$  (ромбические символы)

Таблица 3

**Состав продуктов взаимодействия  $\text{NH}_3$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CH}_4$  и  $\text{F}_2$  в присутствии HF в режиме горения и конверсия  $\text{NH}_3$  в зависимости от расходов исходных компонентов**

Исходная смесь, об.%					$W$ , см <sup>3</sup> /с	$V_R$ , см/с	$V_{RC}$ , см/с	$V_{AC}$ , см/с	Состав продуктов реакции, об.%			$K_{gas}$ , %	$K_{liq}$ , %
$\text{NH}_3$	HF	$\text{O}_2$	$\text{CH}_4$	$\text{F}_2$					$\text{N}_2$	$\text{O}_2$	$\text{CO}_2$		
1,00	2,00	0,97	0,11	0,02	50,0	3,8	84,2	430,0	0,49	0,03	0,11	97	98
		0,75	–	0,03	51,0	3,8	86,4	427,3	Сформировать устойчивый фронт пламени не удавалось				
		0,75	–	0,04	50,0	3,8	85,0	419,1					
		0,75	–	0,05	50,0	3,8	84,9	416,8					
		1,15	–	0,04	47,0	3,6	82,7	356,6					

Обозначения величин идентичны приведенным в табл. 2.

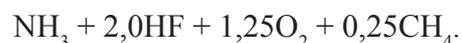
### Основные результаты работы и выводы

Расчетами с использованием программного комплекса АСТРА.4 показано, что в термодинамически равновесной смеси в системе элементов N-H-F-O в диапазоне изменения температуры 600 – 2000 К при соотношении химических элементов, соответствующем уравнению (1), единственным фторсодержащим веществом является фторид водорода, а прочие фториды и оксифториды азота отсутствуют.

Экспериментально установлено, что для данной конструкции лабораторного реактора типа «туннельная горелка» и форсуночного блока, используемых в опытах, не удается сформировать стабильный фронт горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода в зоне реакции, в диапазоне изменения концентраций аммиака от 25,0 до 27,5%, фторида водорода от 50,0 до 55,1% и кислорода от 17,4 до 25,0 %, т.е. когда мольное соотношение составляет  $\text{NH}_3\text{-}2\text{HF-O}_2$  и концентрация аммиака находится внутри концентрационных пределов распространения пламени, если фторид водорода заменен азотом.

При использовании метана в смеси с аммиаком, когда концентрация метана в четырехкомпонентной смеси  $\text{CH}_4\text{-NH}_3\text{-HF-O}_2$

была не менее 5,6%, мольное соотношение  $\text{NH}_3\text{-HF}$  соответствовало  $\text{NH}_4\text{F}\cdot\text{HF}$ , а количество кислорода было достаточно для полного окисления как аммиака, так и метана:



При указанных условиях удалось сформировать устойчивый фронт горения. Конверсия аммиака в режиме горения достигала 98%.

Использование фтора в количестве, соответствующем его концентрации в смеси порядка 1%, не позволило получить стабильный факел горения аммиака в кислороде в присутствии фторида водорода. Применение же фтора в количестве, соответствующем концентрации порядка 0,5%, позволило снизить концентрацию метана, при которой фронт пламени стабилен, до 2,7%.

Предложенный метод может стать основой технологии получения фторида водорода из фторидов аммония, которые являются побочными продуктами некоторых производств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 05.608.21.0277, уникальный идентификационный номер проекта RFMEFI60819X0277).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Максимов Б.Н., Барабанов В.Г., Серушкин И.Л. и др. Промышленные фторорганические продукты. Справ. изд. Л.: Химия, 1990. 464 с.
2. Туманов В.В., Островский С.В., Старостин А.Г. Сырьевая база фтора в России и других странах // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. 2015. № 4. С. 124–136.
3. Пашкевич Д.С., Мухортов Д.А., Алексеев Ю.И. и др. Новые аспекты безотходной технологии получения трифторида азота высокой чистоты фторированием расплава кислого бифторида аммония фтором // Труды II Международного сибирского семинара «Современные неорганические фториды». 11–16 июня 2006. Томск: ТПИ, 2006. С. 222–225.
4. Dahlke T., Ruffiner O., Cant R. Production of HF from  $\text{H}_2\text{SiF}_6$  // Procedia Engineering. 2016. Vol. 138. Pp. 231–239.
5. Пашкевич Д.С., Мухортов Д.А., Камбур П.С., Капустин В.В., Блинов И.А. Способ получения фторида водорода из водного раствора гексафторкремниевой кислоты. Пат. №2669838, Российская Федерация, МПК С 01 В 7/19; заявитель и патентообладатель – СПб. ООО «Новые химические продукты». № 2018101617; заявл. 16.01.18; опубл. 16.10.18, Бюлл. № 29. 9 с.
6. Mineral commodity summaries 2019: U.S. Geological Survey. United States: Government Printing Office, 2019.
7. Pashkevich D.S., Mamaev A.V. Production

of hydrogen fluoride by processing fluorine-containing wastes and by-products of modern industries // WIT Transactions on Ecology and the Environment. 2019. Vol. 231. Pp. 111–123.

8. **Родин В.И., Харитонов В.П., Середенко В.А.** Технология фтороводорода серноокислотным разложением бифторида аммония // Химическая промышленность. 1999. Т. 76. № 12. С. 753–757.

9. **Kurapova E., Mukhortov D., Pashkevich D., Blinov I., Kambur P., Kambur M.** Production of hydrogen fluoride using fluorine-containing waste of manufacturing phosphate fertilizers // *Chimica Oggi – Chemistry Today*. 2017. Vol. 35. No. 3. Pp. 24–26.

10. **Пашкевич Д.С.** Регенерация фтора в виде фторида водорода из летучих фторсодержащих отходов в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя // Химическая физика. 2019. Т. 38. № 11. С. 23–33.

11. **Шебеко Ю.Н., Трунев А.В., Цариченко С.Г., Зайцев А.А.** Исследование концентрационных пределов распространения пламени газовых смесей на основе аммиака // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32. № 5. С. 3–7.

12. **Моррисон Р., Бойд Р.** Органическая химия. М.: Мир, 1974. 1132 с.

13. **Пашкевич Д.С., Костяев Р.А.** Роль фтороводорода и дифторида кобальта в процессах фторирования углеводородов трифторидом кобальта // Журнал прикладной химии. 1994. Т. 67. № 12. С. 2012–2017.

14. **Трусов Б.Г.** Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия Приборостроение. Спец. выпуск 2: Программная инженерия. 2012. С. 240–249.

15. **Панкратов А.В.** Химия фторидов азота. М.: Химия, 1973. 264 с.

16. **Физические величины.** Справочник. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

17. **Снегирёв А.Ю.** Основы теории горения. СПб: Изд-во Политехнического университета, 2014. 350 с.

18. **Антонов В.Н., Липидус А.С.** Производство ацетилен. М.: Химия, 1970. 415 с.

19. **Han J.W., Lee C.E., Kum S.M., Hwang Y.S.** Study on the improvement of chemical reaction mechanism of methane based on the laminar burning velocities in OEC // *Energy & Fuels*. 2007. Vol. 21. No. 6. Pp. 3202–3207.

*Статья поступила в редакцию 11.09.2020, принята к публикации 21.09.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПАШКЕВИЧ Дмитрий Станиславович** – доктор технических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**МУХОРТОВ Дмитрий Анатольевич** – кандидат технических наук, главный технолог ООО «Новые химические продукты», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 11  
dmukhortov@mail.ru

**КАПУСТИН Валентин Валерьевич** – ассистент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
valentin.kapustin.2014@yandex.ru



**КАМБУР Павел Сергеевич** – ассистент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**КУРАПОВА Екатерина Сергеевна** – младший научный сотрудник Федерального государственного унитарного предприятия «Российский научный центр „Прикладная химия“», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

193232, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, пр. Большевиков, 26  
e\_kurapova@mail.ru

**ЗИМИН Арсений Романович** – аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
fz1min@yandex.ru

**МАСЛОВА Анастасия Сергеевна** – аспирантка Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
anastasiamaslova5@gmail.com

## REFERENCES

1. **Maksimov B.N., Varabanov V.G., Serushkin I.L. et al.**, Promyshlennye fluororganicheskie produkty. Spravochnik [Industrial fluoroorganic products. Handbook], Khimiya, Leningrad, 1990.
2. **Tumanov V.V., Ostrovskij S.V., Starostin A.G.**, The mineral resource fluorine base of Russia and other countries, Vestnik of Perm National Research Polytechnic University, Chemical Technology & Biotechnology. (4) (2015) 124–136.
3. **Pashkevich D.S., Mukhortov D.A., Alexeev Yu.I., et al.**, New aspects of waste-free technology for producing high-purity nitrogen trifluoride by fluorination of a melt of acidic ammonium bifluoride with fluorine, Proceedings of 2<sup>nd</sup> International Siberian Seminar “Modern Inorganic Fluoride” (Intersibfluorine-2006), June 11–16, 2006, Tomsk, TPU (2006) 222–225.
4. **Dahlke T., Ruffiner O., Cant R.**, Production of HF from H<sub>2</sub>SiF<sub>6</sub>, Procedia Engineering. 138 (2016) 231–239.
5. **Pashkevich D.S., Mukhortov D.A., Kambur P.S., et al.**, Method of obtaining hydrogen fluoride, Pat. No. 2669838, Russian Federation, МРК С 01 В 7/19; SPb., “New Chemical Product” LLC is a declarant and a patentee, No. 2018101617; declar. 16.01.18; publ. 16.10.18, Bull. No. 29, 9 p.
6. Mineral commodity summaries 2019: U.S. Geological Survey, United States Government Printing Office (2019).
7. **Pashkevich D.S., Mamaev A.V.**, Production of hydrogen fluoride by processing fluorine-containing wastes and by-products of modern industries, WIT Transactions on Ecology and the Environment, 231 (2019) 111–123.
8. **Rodin V.I., Kharitonov V.P., Seredenko V.A.**, Hydrogen fluoride technology by sulfuric acid decomposition of ammonium bifluoride, Russian Chemical Industry. 76 (12) (1999) 753–757 (in Russian).
9. **Kurapova E., Mukhortov D., Pashkevich D., et al.**, Production of hydrogen fluoride using fluorine-containing waste of manufacturing phosphate fertilizers, Chimica Oggi – Chemistry Today. 35 (3) (2017) 24–26.

10. **Pashkevich D.S.**, Regeneration of fluorine in the form of hydrogen fluoride from volatile fluorine-containing wastes in a hydrogen-containing fuel-oxygen-containing oxidant flame, *Russian Journal of Physical Chemistry B: Focus on Physics*. 13 (6) (2019) 993–1003.
11. **Shebeko Yu.N., Trunev A.V., Tsarichenko S.G., Zaitsev A.A.**, Investigation of concentration limits of flame propagation in ammonia-based gas mixtures, *Combustion, Explosion and Shock Waves*. 32 (5) (1996) 477–480.
12. **Morrison R., Boyd R.**, *Organic chemistry*, 2<sup>nd</sup> Ed., Allyn and Bacon Inc., Boston, 1970.
13. **Pashkevich D.S., Kostyaev R.A.**, Rol' fluorovodoroda i diflorida kobal'ta v protsessakh fluorirovaniya uglevodorodov trifloridom kobal'ta [The role of hydrogen fluoride and cobalt difluoride in the processes of fluorination of hydrocarbons with cobalt trifluoride], *Russian Journal of Applied Chemistry*. 67 (12) (1994) 2012–2017 (in Russian).
14. **Trusov B.G.**, Programmnaya sistema modelirovaniya fazovykh i khimicheskikh ravnovesiy pri vysokikh temperaturakh [Code system for simulation of phase and chemical equilibria at higher temperatures], *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Instrument Engineering, Special Iss. 2: Software Engineering* (2012) 240–249 (in Russian).
15. **Pankratov A.V.**, *Khimiya fluoridov azota* [Chemistry of the nitrogen fluorides], Khimiya, Moscow, 1973 (in Russian).
16. **Grigoriev I.S., Meilikhov E.Z.** (Eds.), *Fizicheskie velichiny* [Handbook of Physical Quantities], Energoatomizdat, Moscow, 1991 (in Russian).
17. **Snegiryov A.Yu.**, *Osnovy teorii goreniya* [Principles of combustion theory], Polytechnical University Publishing, St. Petersburg, 2014 (in Russian).
18. **Antonov V.N., Lapidus A.S.**, *Proizvodstvo atsetilena* [Acetylene production], Khimiya, Moscow, 1970 (in Russian).
19. **Han J.W., Lee C.E., Kum S.M., Hwang Y.S.**, Study on the improvement of chemical reaction mechanism of methane based on the laminar burning velocities in OEC, *Energy & Fuels*. 21 (6) (2007) 3202–3207.

*Received 11.09.2020, accepted 21.09.2020.*

## THE AUTHORS

### **PASHKEVICH Dmitrii S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
pashkevich-ds@yandex.ru

### **MUKHORTOV Dmitrii A.**

*LLC "New chemical products"*  
11, A, Moyka River Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation  
dmukhortov@mail.ru

### **KAPUSTIN Valentin V.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation  
valentin.kapustin.2014@yandex.ru

### **KAMBUR Pavel S.**

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

**KURAPOVA Ekaterina S.**

*Russian Scientific Center "Applied Chemistry"*

26, Bolshieviki Ave., St. Petersburg, 193232, Russian Federation

e\_kurapova@mail.ru

**ZIMIN Arsenii R.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

fz1min@yandex.ru

**MASLOVA Anastasiia S.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

anastasiiamaslova5@gmail.com

DOI: 10.18721/JPM.13414  
УДК 538.958

## МОДИФИКАЦИЯ ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ СТЕКОЛ ВЫСОКИМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

**Е.С. Бабич<sup>1</sup>, И.В. Редуто<sup>2</sup>, А.В. Редьков<sup>3</sup>, И.В. Решетов<sup>4,1</sup>,  
В.В. Журихина<sup>1</sup>, А.А. Липовский<sup>4,1</sup>**

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Университет Восточной Финляндии,  
г. Йоэнсуу, Финляндия;

<sup>3</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>4</sup> Санкт-Петербургский академический университет имени Ж.И. Алфёрова РАН,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе было исследовано влияние высокого электрического поля на состав и свойства приповерхностной области многокомпонентных силикатных стекол. Было продемонстрировано, что под влиянием высокого поля концентрация щелочных ионов в приповерхностной области резко уменьшается, что приводит к изменению ионообменных характеристик стекол и их стойкости при травлении. Это позволяет использовать поляризованные области поверхности стекла в качестве диэлектрических масок при формировании градиентных оптических структур, а также рельефных микроструктур, например каналов для микрофлюидики, в стеклянных подложках. Преимуществом такого подхода является отсутствие необходимости в многократной литографии, использующей жидкие химические реагенты, что снижает стоимость и повышает экологичность процесса изготовления структур.

**Ключевые слова:** высокое электрическое поле, химическое травление, ионное травление, ионный обмен

**Ссылка при цитировании:** Бабич Е.С., Редуто И.В., Редьков А.В., Решетов И.В., Журихина В.В., Липовский А.А. Модификация приповерхностной области стекол высоким электрическим полем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 176–184. DOI: 10.18721/JPM.13414

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## MODIFICATION OF GLASS SURFACE BY A HIGH ELECTRIC FIELD

**E.S. Babich<sup>1</sup>, I.V. Reduto<sup>2</sup>, A.V. Redkov<sup>3</sup>, I.V. Reshetov<sup>4,1</sup>,  
V.V. Zhurikhina<sup>1</sup>, A.A. Lipovskii<sup>4,1</sup>**

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> University of Eastern Finland,  
Joensuu, Finland;

<sup>3</sup> Institute for Problems of Mechanical Engineering RAS,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>4</sup> Alferov University,  
St. Petersburg, Russian Federation



The work has studied an effect of a high DC field on the composition and properties of the sub-surface region of multicomponent silicate glass. The concentration of alkali ions in the subsurface glass region was shown to drastically decrease under the high electric field. This led to a change in the ion-exchange characteristics of glasses and their resistance to etching. The effect allows employing the poled regions of the glass surface as dielectric masks in the formation of gradient optical structures, as well as relief microstructures, e.g., channels for microfluidics, in glass substrates. The advantage of this approach is that there is no need in multiple lithography using liquid chemicals. This reduces the cost and makes this technological process environment friendly.

**Keywords:** high electric field, chemical etching, ion etching, ion exchange

**Citation:** Babich E.S., Reduto I.V., Redkov A.V., Reshetov I.V., Zhurikhina V.V., Lipovskii A.A., Modification of glass surface by a high electric field, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 176–184. DOI: 10.18721/JPM.13414

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

В течение последних лет стекла интенсивно используются для изготовления интегральных элементов волноводной оптики и фотоники: линз, мультиплексоров, модуляторов, оптических усилителей, а также устройств микрофлюидики и «лабораторий на чипе» [1]. При этом в большинстве случаев изменение оптических характеристик стекла достигается путем ионного обмена (термического или электростимулированного), в процессе которого ионы стеклянной матрицы заменяются ионами из солевого расплава [2]. Для изменения рельефа поверхности стекла, например для формирования микроканалов, используется химическое или реактивное ионное травление. Как для процесса ионного обмена, так и для травления требуется использование масок, которые обычно формируются из диэлектрических или металлических пленок, нанесенных на поверхность стеклянной подложки литографическими методами. Преимуществом диэлектрических масок является отсутствие контактной разности потенциалов [3], благодаря чему они не влияют на распределение ионов при ионном обмене. Однако металлические маски широко используются из технологических соображений.

В настоящей работе представлен новый подход к формированию диэлектрической маски на поверхности стекла, а именно — локальная модификация его приповерхностной области высоким электрическим

полем. Электрическое поле прикладывается с помощью рельефного электрода, который изготавливается с использованием литографии. Предлагаемый подход обладает преимуществом перед традиционно применяемым ввиду его низкочувствительности, так как допускает многократное использование одного и того же электрода для модификации практически неограниченного количества подложек, т.е. формирования на их поверхности масок для ионного обмена или травления.

## Экспериментальная часть

В работе исследуется термическая поляризация стекла — модификация многокомпонентного силикатного стекла высоким электрическим полем при повышенной температуре с помощью прижимного анодного электрода [4]. Процесс схематически изображен на рис. 1. В качестве анодного электрода использовалась плоская (1) либо гребенчатая (2) структура, изготовленная из стеклографита [5]. После прижима анода 1 (либо 2) и катода 3 к стеклу 4, оно нагревалось и на него подавалось постоянное напряжение. При использовании гребенчатого электрода 2 в образце формировались чередующиеся поляризованные (5) и неполяризованные (6) области.

В процессе поляризации электрическое поле в приповерхностной области стекла под анодным электродом может достигать значений в десятки доли вольта на нанометр [6]. Под воздействием такого высокого

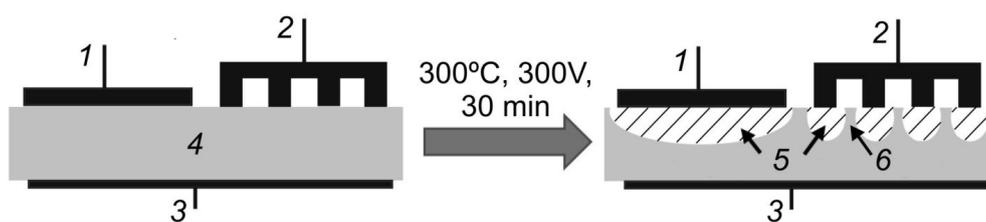


Рис. 1. Схема процесса термической поляризации:

1, 2 – плоский и гребенчатый аноды соответственно; 3 – катод; 4 – исходный образец стекла; 5, 6 – тот же образец с чередующимися поляризованными (5) и неполяризованными (6) областями, соответственно

поля находящиеся вблизи поверхности щелочные ионы (в нашем случае ионы натрия) смещаются в глубь образца. Кроме того, пары воды, проникающие в образец из атмосферы, частично разлагаются, образуя ионы гидрония [7], и замещают щелочные ионы в приповерхностной области. В результате этого приповерхностная область обедняется щелочными ионами и, как следствие, происходит локальное изменение физических свойств стекла и его химической стойкости. Например, при использовании гребенчатого электрода наблюдается периодическое изменение свойств стекла: неполяризованная область под углублениями электрода сохраняет исходные свойства, а поляризованная изменяет свои характеристики.

В эксперименте использовались пластины натриево-силикатного стекла толщиной 1 мм. Содержание основных оксидов-модификаторов в стекле было следующим (вес.%): 14,3 Na<sub>2</sub>O, 6,4 CaO и 4,3 MgO. Поляризация проводилась при атмосферном давлении, температуре 300°C и приложенном постоянном напряжении 300 В; продолжительность процесса составляла 30 мин (см. рис. 1). Измерения концентрации натрия, кальция и магния в поляризованном стекле проводились методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭРС) с помощью автоматизированной системы EDS Oxford Instruments AZtecLive, установленной на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) TESCAN LYRA3 [8]. Измерения показали, что ионы натрия отсутствуют в области глубиной примерно 2 мкм от поверхности стекла, в то время как концентрация ионов кальция

и магния остается неизменной (рис. 2,а). Метод ЭРС не чувствителен к гидронии/водороду, однако на изображении СЭМ (рис. 2,б) можно увидеть светлую линию на глубине, соответствующей ступеньке концентрации натрия. Предположительно это соответствует электронам, рассеянным пространственным зарядом, накопленным на границе раздела ионов гидрония и натрия. Этот заряд возникает вследствие разницы в подвижности ионов гидрония и натрия: подвижность первых более чем на три порядка меньше подвижности вторых [7]. Вместе с известными данными по регистрации отдачи ионов гелия (ERDA) поляризованным стеклом [9], это позволяет заключить, что дефицит ионов натрия в основном компенсируется ионами гидрония.

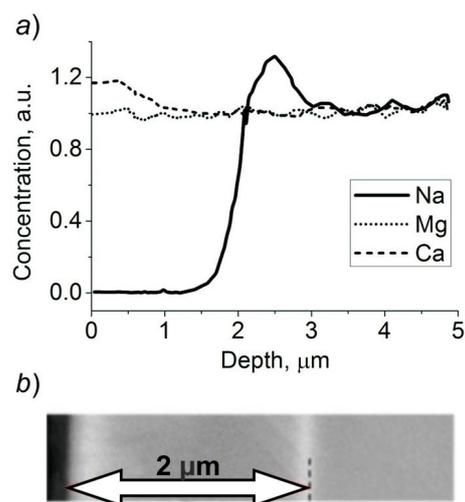


Рис. 2. Распределения нормированной концентрации металлов по глубине вблизи поверхности образца поляризованного стекла (а) и СЭМ-изображение его поперечного сечения (б)



Дефицит ионов натрия в приповерхностной области стекла оказывает существенное влияние на протекание процесса замещения ионов натрия ионами серебра из расплава соли (ионного обмена). Этот процесс наиболее часто используется для формирования интегрально-оптических структур: вследствие более высокой поляризуемости ионов серебра, по сравнению с ионами натрия, обмен  $\text{Ag}^+ \rightarrow \text{Na}^+$  приводит к увеличению показателя преломления на величину  $\Delta n$  в ионообменной области и формированию оптических волноводов [2].

Для исследования влияния поляризации на ионообменные свойства стекла мы поместили поляризованное стекло в расплав нитрата  $\text{Ag}_{0,05}\text{Na}_{0,95}\text{NO}_3$  при температуре  $325^\circ\text{C}$ . Продолжительность обработки составляла 60 мин. После ионного обмена было исследовано поведение показателей преломления в поляризованных и неполяризованных областях стекла. Для этого проводились измерения модовых спектров градиентных оптических волноводов, сформированных в результате ионного обмена в соответствующих областях стекла, на установке MetriconM-2010, использующей призмный ввод светового излучения. Как поляризованные, так и неполяризованные области стекла после ионного обмена демонстрировали каналирование световых волн, однако модовые спектры этих волноводов существенно различались. Мы провели расчет профилей показателя преломления по измеренным модовым спектрам с использованием алгоритма Хейдриха – Уайта [9]. Результаты расчетов представлены на рис. 3.

На рис. 3 видны существенные различия как в величине изменения показателя преломления, так и в глубине области с увеличенным показателем преломления для поляризованного и неполяризованного стекол. Следует отметить, что величина изменения показателя преломления линейно зависит от концентрации серебра в стекле [11]. Таким образом, можно сделать вывод, что максимальная концентрация серебра в поляризованной области стекла оказывается при-

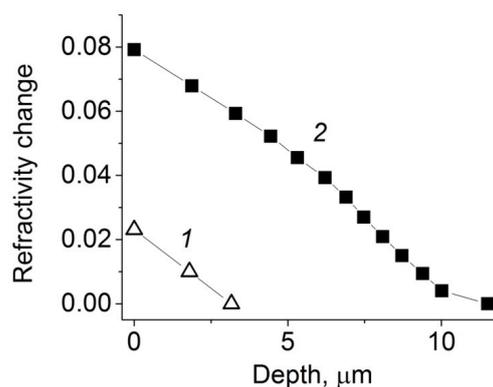


Рис. 3. Рассчитанные профили увеличения показателя преломления в ионообменной области для поляризованного (1) и неполяризованного (2) стекол. Продолжительность ионного обмена – 60 мин

мерно в 3,5 – 4 раза меньше, по сравнению с неполяризованной областью, а глубина проникновения серебра – примерно в 4 раза меньше (при продолжительности ионного обмена 60 мин). Поскольку глубина проникновения ионов пропорциональна корню квадратному из коэффициента диффузии, различие значений глубины позволяет сделать вывод о том, что коэффициент диффузии ионов серебра в поляризованном стекле, по крайней мере в 10–15 раз меньше, чем в чистом стекле. Уменьшение как концентрации, так и глубины проникновения ионов серебра предположительно связано с замещением ионов натрия менее подвижными ионами гидрония и структурными изменениями, вызванными поляризацией. Таким образом, поляризованные области стекла более устойчивы по отношению к ионообменной обработке. Это позволяет использовать их в качестве диэлектрических масок при изготовлении градиентных интегрально-оптических структур на стеклянных подложках или при изготовлении дифракционных решеток.

Изменение структуры стекла после обработки высоким электрическим полем также подтверждается данными комбинационного рассеяния (КР). На рис. 4 приведены спектры КР исходного стекла и стекла после поляризации (спектры получены на КР-микроскопе

WITec Alpha 300R при возбуждении КР излучением лазера с длиной волны 532 нм). На рис. 4 видно, что у поляризованного стекла отсутствует пик в области  $1100\text{ см}^{-1}$ , интенсивность которого определяется наличием в стекле ионов-модификаторов. Сравнение КР-спектров для образцов исходного стекла и стекла, поляризованного при различных приложенных напряжениях, показывает, что чем выше электрическое поле или продолжительность поляризации, тем ближе структура поляризованной области к структуре кварцевого стекла, не содержащего модифицирующих щелочных оксидов [12]. Следовательно, в поляризованных областях снижается количество немостиковых атомов кислорода [12]. Последние связаны, в частности, со щелочными ионами, способными к обмену, поэтому число мест в структуре стекла, которые могут быть заняты ионами, участвующими в процессе, также снижается. Это подтверждает сделанный выше вывод о том, что поляризация повышает устойчивость стекла к ионному обмену.

Недавно было показано, что поляризованные области натриево-силикатного стекла имеют лучшую стойкость к кислотным травителям и худшую к процессу, который стандартно используют для реактивного ионного травления кварцевых подложек, по сравнению с неполяризованными областями [13].

Мы провели исследование химического травления стекла, поляризованного с помощью гребенчатого электрода (см. рис. 1), в водном растворе фторида аммония ( $\text{NH}_4\text{F} : 8\text{H}_2\text{O}$ ). Установлено, что травление неполяризованных областей стекла под углублениями электрода происходит быстрее, чем поляризованных, что приводит к формированию каналов. Максимальная глубина каналов определяется разностью скоростей травления поляризованной и неполяризованной областей и толщиной поляризованного слоя. Для изучения динамики травления поляризованной и неполяризованной областей была построена зависимость глубины канала от времени травления (рис. 5,а); ширина канала, соответствующая ширине углублений

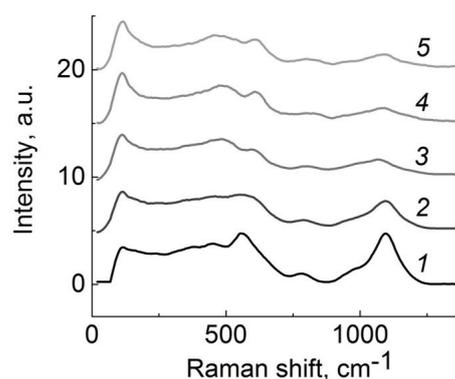


Рис. 4. Спектры комбинационного рассеяния исходного (1) и поляризованных (2 – 5) стекол. При увеличении заряда, прошедшего через приповерхностную область (это отражено в нумерации кривых 2 → 5), структура стекла становится более кварцеподобной

в электроде, составляла 60 мкм. На рис. 5,а видно, что глубина канала вначале практически линейно увеличивается со временем, а после 20-минутного травления зависимость выходит на насыщение, где глубина достигает уровня примерно 900 нм. Таким образом, после 20 минут травления поляризованная область в исследуемом образце полностью стравилась.

Стоит отметить, что стекло в области под углублением электрода не поляризовано только для каналов шириной более 10 мкм. Уменьшение ширины канала приводит к существенному влиянию краевых эффектов и, соответственно, поляризации стекла даже под углублением электрода. Аналогичный эффект наблюдается при увеличении прикладываемого напряжения (рис. 5,б).

Для реактивного ионного травления картина будет обратной: поляризованные области травятся быстрее неполяризованных, и формируемый на поверхности стекла рельеф повторяет геометрию электрода [13]. При этом максимальная глубина каналов также будет определяться глубиной поляризованной области.

Таким образом, поляризация стекла с помощью профилированного электрода позволяет сформировать на поверхности

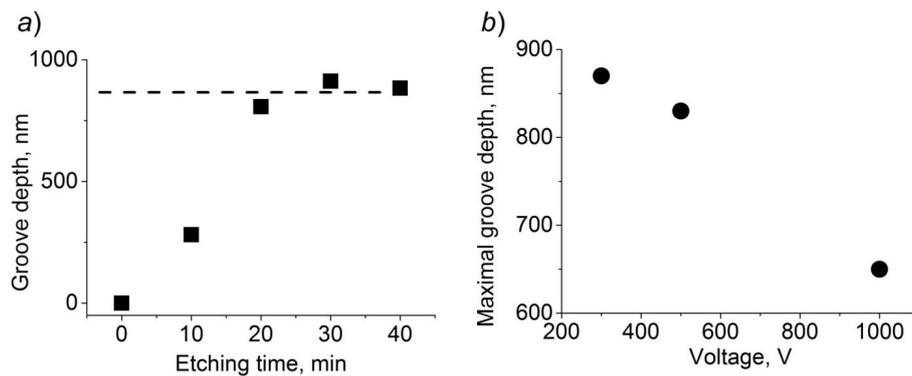


Рис. 5. Зависимости глубины канала в образце стекла от времени травления в растворе  $\text{NH}_4\text{F} : 8\text{H}_2\text{O}$  (a) и максимальной глубины этого канала от приложенного напряжения (b). Ширина канала – 60 мкм; его максимальная глубина соответствует полному стравливанию поляризованного слоя

стекла диэлектрическую маску для химического или ионного травления. В зависимости от задачи, в стекле при этом можно сформировать прямой или обратный (зеркальный) рельеф электрода. Таким методом можно формировать, например, «лабораторию на чипе», а также каналы для микрофлюидики.

### Заключение

В результате выполненных исследований показано, что изменения в составе и структуре многокомпонентных силикатных стекол, индуцированные термической поляризацией, можно использовать для формирования на их поверхности диэлектрических масок для серебряно-натриевого ионного обмена, химического и реактивного ионного травления. Такая возможность определяется тем, что уход подвижных щелочных ионов из субанодной области стекла при его поляризации существенно замедляет процесс ионного об-

мена, а увеличение связности сетки стекла делает его структуру более «кварцеподобной». Приобретенное свойство обуславливает повышение стойкости поляризованных областей стекла к химическим травителям, которые используют для многокомпонентных стекол, и понижение стойкости этих областей к процессу реактивного ионного травления, который традиционно применяют для травления кварцевого стекла.

### Благодарности

Авторы благодарят технического специалиста ООО «Тескан» А.И. Дергачёва за проведение измерений методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭРС).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, тема FSRM-2020-001.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. DeCorby R., Irannejad M. Springer handbook of electronic and photonic materials: glasses for photonic integration. New York City: Springer, 2017. 1536 p.
2. Righini G.C., Chiappini A. Glass optical waveguides: a review of fabrication techniques // Optical Engineering. 2014. Vol. 53. No. 7. P. 071819.
3. Honkanen S., West B.R., Yliniemi S., et al. Recent advances in ion exchanged glass waveguides and devices // Physics and Chemistry of Glasses: European Journal of Glass Science and Technology. Part B. 2006. Vol. 47. No. 2. Pp. 110–120.
4. Брунков П.Н., Гончаров В.В., Липовский А.А., Мелехин В.Г., Петров М.И. Формирование рельефа с субмикронным разрешением при поляризации стекол и стеклометаллических

нанокompозитов // Письма в Журнал технической физики. 2008. Т. 34. Вып. 23. С. 73–80.

5. **Babich E.S., Gangrskaja E.S., Reduto I.V., Béal J., Redkov A.V., Maurer T., Lipovskii A.A.** Self-assembled silver nanoparticles in glass microstructured by poling for SERS application // *Current Applied Physics*. 2019. Vol. 19. No. 10. Pp. 1088–1095.

6. **Lipovskii A.A., Melehin V.G., Petrov M.I., Svirko Y.P., Zhurikhina V.V.** Bleaching versus poling: Comparison of electric field induced phenomena in glasses and glass-metal nanocomposites // *Journal of Applied Physics*. 2011. Vol. 109. No. 1. P. 011101.

7. **Doremus R.H.** Mechanism of electrical polarization of silica glass // *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 87. No. 23. Pp. 1–2.

8. **Dergachev A., Kaasik V., Lipovskii A., Melehin V., Redkov A., Reshetov I., Tagantsev D.** Control of soda-lime glass surface crystallization with thermal poling // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2020. Vol. 533. 1 April. P. 119899.

9. **Lepiński C.M., Giacometti J.A., Leal Ferreira G.F., Freire F.L., Achete C.A.** Electric field

distribution and near-surface modifications in soda-lime glass submitted to a dc potential // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1993. Vol. 159. No. 3. Pp. 204–212.

10. **White J.M., Heidrich P.F.** Optical waveguide refractive index profiles determined from measurement of mode indices: a simple analysis // *Applied Optics*. 1976. Vol. 15. No. 1. Pp. 151–155.

11. **Liñares J., Sotelo D., Lipovskii A.A., Zhurikhina V.V., Tagantsev D.K., Turunen J.** New glasses for graded-index optics: Influence of non-linear diffusion in the formation of optical microstructures // *Optical Materials*. 2000. Vol. 14. No. 2. Pp. 145–153.

12. **Redkov A.V., Melehin V.G., Lipovskii A.A.** How does thermal poling produce interstitial molecular oxygen in silicate glasses? // *The Journal of Physical Chemistry. C*. 2015. Vol. 119. No. 30. Pp. 17298–17307.

13. **Reduto I., Kamenskii A., Brunkov P., Zhurikhina V., Svirko Y.A., Lipovskii A.** Relief micro- and nanostructures by the reactive ion and chemical etching of poled glasses // *Optical Materials Express*. 2019. Vol. 9. No. 7. Pp. 3059–3068.

*Статья поступила в редакцию 14.09.2020, принята к публикации 20.09.2020.*

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**БАБИЧ Екатерина Сергеевна** — кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник научно-образовательного центра «Физика и технология гетерогенных материалов и наногетероструктур» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**РЕДУТО Игорь Владимирович** — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Университета Восточной Финляндии, г. Йоэнсуу, Финляндия.

80101, Финляндия, г. Йоэнсуу  
igor.reduto@uef.fi

**РЕДЬКОВ Алексей Викторович** — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

199178, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большой пр-т В.О., 61  
red-alex@mail.ru



**РЕШЕТОВ Илья Валентинович** – инженер Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, инженер научно-образовательного центра «Физика и технология гетерогенных материалов и наногетероструктур» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
reshetov\_iv@spbstu.ru

**ЖУРИХИНА Валентина Владимировна** – доктор физико-математических наук, директор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**ЛИПОВСКИЙ Андрей Александрович** – доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского академического университета имени Ж.И. Алферова Российской академии наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3  
lipovskii@mail.ru

## REFERENCES

1. **DeCorby R., Irannejad M.**, Springer handbook of electronic and photonic materials: glasses for photonic integration, Springer, New York City, 2017.
2. **Righini G.C., Chiappini A.**, Glass optical waveguides: a review of fabrication techniques, *Optical Engineering*. 53 (7) (2014) 071819.
3. **Honkanen S., West B.R., Yliniemi S., et al.**, Recent advances in ion exchanged glass waveguides and devices, *Physics and Chemistry of Glasses: European Journal of Glass Science and Technology, Part B*, 47 (2) (2006) 110–120.
4. **Brunkov P.N., Melekhin V.G., Goncharov V.V., et al.**, Submicron-resolved relief formation in poled glasses and glass-metal nanocomposites, *Technical Physics Letters*. 34 (12) (2008) 1030–1033.
5. **Babich E.S., Gangrskaja E.S., Reduto I.V., et al.**, Self-assembled silver nanoparticles in glass microstructured by poling for SERS application, *Current Applied Physics*. 19 (10) (2019) 1088–1095.
6. **Lipovskii A.A., Melehin V.G., Petrov M.I., et al.**, Bleaching versus poling: Comparison of electric field induced phenomena in glasses and glass-metal nanocomposites, *Journal of Applied Physics*. 109 (1) (2011) 011101.
7. **Doremus R.H.**, Mechanism of electrical polarization of silica glass, *Applied Physics Letters*. 87 (23) (2005) 1–2.
8. **Dergachev A., Kaasik V., Lipovskii A., et al.**, Control of soda-lime glass surface crystallization with thermal poling, *Journal of Non-Crystalline Solids*. 533 (1 April) (2020) 119899.
9. **Lepienski C.M., Giacometti J.A., Leal Ferreira G.F., et al.**, Electric field distribution and near-surface modifications in soda-lime glass submitted to a dc potential, *Journal of Non-Crystalline Solids*. 159 (3) (1993) 204–212.
10. **White J.M., Heidrich P.F.**, Optical waveguide refractive index profiles determined from measurement of mode indices: a simple analysis, *Applied Optics*. 15 (1) (1976) 151–155.
11. **Liñares J., Sotelo D., Lipovskii A.A., et al.**, New glasses for graded-index optics: Influence of non-linear diffusion in the formation of optical microstructures, *Optical Materials*. 14 (2) (2000) 145–153.
12. **Redkov A.V., Melehin V.G., Lipovskii A.A.**, How does thermal poling produce interstitial molecular oxygen in silicate glasses? *The Journal of Physical Chemistry, C*. 119 (30) (2015) 17298–17307.

13. **Reduto I., Kamenskii A., Brunkov P., et al.**, Relief micro- and nanostructures by the reactive ion and chemical etching of poled glasses, *Optical Materials Express*. 9 (7) (2019) 3059–3068.

*Received 14.09.2020, accepted 20.09.2020.*

## THE AUTHORS

### **BABICH Ekaterina S.**

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

### **REDUTO Igor V.**

*University of Eastern Finland*  
Joensuu, 80101, Finland  
igor.reduto@uef.fi

### **REDKOV Alexey V.**

*Institute for Problems of Mechanical Engineering RAS*  
61 Bolshoi Ave. V.O., St. Petersburg, 199178, Russian Federation  
red-alex@mail.ru

### **RESHETOV Ilya V.**

*Alferov University,*  
*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
reshetov\_iv@spbstu.ru

### **ZHURIKHINA Valentina V.**

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

### **LIPOVSKII Andrey A.**

*Alferov University,*  
*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*  
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation  
lipovskii@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.13415  
УДК 535.3, 535-15, 535.417

## УРОВЕНЬ ВЫХОДНОЙ МОЩНОСТИ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКИХ ОПТОВОЛОКОННЫХ СХЕМ С ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИМИ БРЭГГОВСКИМИ РЕШЕТКАМИ ДЛЯ МУЛЬТИПЛЕКСИРОВАНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Л.Б. Лиокумович<sup>1</sup>, А.О. Костромитин<sup>2,1</sup>,  
Ф.В. Складаров<sup>2,1</sup>, О.И. Котов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

<sup>2</sup> Концерн «ЦНИИ "Электроприбор"»,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Данная работа продолжает цикл статей, посвященных предложенной авторами идеологии расчета параметров элементов и анализа выходной мощности в волоконно-оптических интерферометрических схемах с мультиплексированием чувствительных элементов по времени (TDM). Проанализирована схема мультиплексирования на основе волоконно-оптических брэгговских решеток. Расчетный метод определения параметров элементов предусматривает равные оптические мощности от всех мультиплексированных чувствительных элементов, обеспечивает оценку эффектов, связанных с отклонением параметров схем от заданных расчетным путем. В соответствии с идеологией расчета обоснована последовательность применения необходимых расчетных выражений, приведены примеры результатов расчетов и анализа характерных закономерностей для рассматриваемой структуры оптоволоконной схемы. Предложенный подход рекомендуется использовать для разработки интерферометрических измерителей с мультиплексированием волоконно-оптических чувствительных элементов.

**Ключевые слова:** волоконно-оптический интерферометрический датчик, брэгговская решетка, оптическая мощность, временное мультиплексирование

**Ссылка при цитировании:** Лиокумович Л.Б., Костромитин А.О., Складаров Ф.В., Котов О.И. Уровень выходной мощности интерферометрических оптоволоконных схем с волоконно-оптическими брэгговскими решетками для мультиплексирования чувствительных элементов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 185–202. DOI: 10.18721/JPM.13415

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## AN OUTPUT POWER LEVEL OF THE FIBER-OPTIC INTERFEROMETRIC SCHEMES WITH FIBER BRAGG GRATINGS FOR MULTIPLEXING THE SENSITIVE ELEMENTS

L.B. Liokumovich<sup>1</sup>, A.O. Kostromitin<sup>2,1</sup>,  
Ph.V. Skliarov<sup>2,1</sup>, O.I. Kotov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation;

<sup>2</sup> Concern CSRI "Elektroprigor",  
St. Petersburg, Russian Federation

The paper continues a series of articles devoted to the procedure proposed by the authors how to calculate the required elements' parameters and the output optical power level of the fiber-optic interferometric schemes with time-division multiplexing (TDM) of sensing elements. In particular, the schemes based on fiber Bragg gratings have been analyzed. The proposed method enables to ensure uniformity of powers of optical signals from individual sensing elements, as well as to evaluate how the deviations of elements' parameters from the nominal ones influence the optical powers. According to the calculation methodology, a sequence of applying the required expressions was substantiated and some obtained results and an analysis of characteristic behaviors for the considered optical fiber circuits were exemplified. The proposed approach was recommended for design of interferometric optical fiber sensors with multiplexed sensing elements.

**Keywords:** fiber-optic interferometric sensor, Bragg grating, optical power, time-division multiplexing

**Citation:** Liokumovich L.B., Kostromitin A.O., Skliarov Ph.V., Kotov O.I., An output power level of the fiber-optic interferometric schemes with fiber Bragg gratings for multiplexing the sensitive elements, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 185–202. DOI: 10.18721/JPM.13415

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Волоконно-оптические измерительные системы и устройства обладают рядом достоинств, связанных, прежде всего, с возможностью использования полностью оптических электронейтральных и пассивных оптоволоконных чувствительных трактов, а также трактов для связи чувствительных элементов с оптоэлектронной частью [1]. Среди оптоволоконных измерительных систем выделяются своей привлекательностью интерферометрические [2], благодаря тому, что обеспечивают наилучшее разрешение. В последние десятилетия подобные измерительные системы активно развиваются и внедряются в различных областях техники, например, в навигационных комплексах, в гидроакустике, в приборах нефтегазовой отрасли, в измерительном оборудовании для медицинских целей [3 – 6].

Практическое внедрение подобных измерительных систем прежде всего связано с теми, в которых реализуется мультиплексирование набора оптоволоконных чувствительных элементов (ЧЭ) в единый тракт, подключаемый к оптическому источнику и фотоприемнику. Для этого чаще всего применяется принцип мультиплексирования с разделением по времени (*англ.* Time Division Multiplexing (TDM)) [6], когда в оптоволо-

конную схему вместо непрерывного светового излучения подаются оптические импульсы, а на выходе схемы в ответ на каждый входной импульс формируется последовательность выходных, каждый из которых несет информацию о соответствующем ЧЭ и воздействии на него. Структура такой оптической схемы и параметры всех элементов (чувствительные сегменты волокна, светоделительные элементы, отражатели и т. п.) должны соответствовать целой совокупности соотношений для обеспечения работоспособности такой измерительной системы и ее эффективности.

Важной составляющей в наборе параметров для оптоволоконных схем с мультиплексированием ЧЭ в интерферометрической измерительной системе является так называемая энергетическая эффективность, а именно — уровень мощности выходных импульсов по отношению к мощности импульса на входе схемы. Энергетическая эффективность влияет непосредственно на достигаемое отношение сигнал/шум в формируемой серии интерференционных сигналов и, как следствие, на уровень выходных шумов измерительной системы. Тем не менее, в доступной авторам литературе не представлены комплексные методы расчета энергетической эффективности таких оптоволоконных схем. Обычно приводятся лишь



упрощенные оценки для частных случаев, когда нет возможности учета важных факторов (потери оптической мощности в элементах, возможные отклонения фактических параметров от требуемых оптимальных значений, в том числе случайные отклонения) [7]. Зачастую используются приближения, плохо выполняющиеся на практике, например, предполагается слишком большое или даже бесконечное число мультиплексируемых ЧЭ [7], в то время как в реальных системах обычно мультиплексируется до 16 или 32 ЧЭ, а нередко актуальны схемы и с восемью или даже с четырьмя ЧЭ.

Пример последовательной методики энергетического расчета для оптоволоконных схем с мультиплексируемыми ЧЭ приведен в нашей работе [8], где также показаны возможности анализа характеристик рассмотренных схем на основе развитой методики расчета.

В данной работе предлагается аналогичное рассмотрение методики энергетического расчета и краткий анализ полученных результатов для схемы другого типа, для такой, где в качестве светоделительных элементов используются волоконно-оптические брэгговские решетки (ВОБР) [10]. Этот вариант привлекателен для практического применения, в том числе и потому, что он позволяет обеспечивать улучшенные энергетические характеристики.

Однако такие схемы обладают серьезным недостатком: в них присутствует перекрестная связь между сигналами от разных ЧЭ [10].

В связи с вышеизложенным, чрезвычайно актуальной представляется возможность обоснованного комплексного расчета оптимальной системы параметров ВОБР и уровня мощности выходного оптического излучения в таких схемах, с учетом всех ключевых параметров элементов, а также параметров, характеризующих уровень паразитной перекрестной связи.

### **Рассматриваемая схема и принципы организации расчетов**

Предметом анализа является оптоволоконный тракт для мультиплексируемой

интерферометрической измерительной системы. Ее чувствительные элементы (ЧЭ) представляют собой отрезки волокна, смонтированные в определенных конструктивных узлах; последние оптимизированы для преобразования целевого возмущения, проходящего через этот отрезок, в изменение фазовой задержки света. Ключевой частью такой системы выступает оптическая схема, в которой  $N$  волоконных ЧЭ объединены в некоторый тракт с применением разветвителей и отражателей [11].

В схемах отражательного типа, в качестве ввода и вывода излучения может использоваться фактически один и тот же волоконный вывод (в приборной части системы для разделения могут использоваться дополнительный  $Y$ -разветвитель или циркулятор). В схемах проходного типа вход и выход находятся в разных концах тракта с ЧЭ. Если на вход схемы поступает короткий оптический импульс с мощностью  $P_{in}$ , то на выходе схемы должна сформироваться последовательность выходных импульсов с мощностями  $p_n$ , причем  $n$ -й импульс проходит через ЧЭ от первого до  $n$ -го и не проходит через остальные ЧЭ. Обычно формируется  $N + 1$  импульс с номерами от 0 до  $N$ , где импульс с нулевым номером ( $n = 0$ ) не проходит ни одного ЧЭ. Эти импульсы будут задержаны друг относительно друга вследствие задержки при прохождении соответствующей системы звеньев схемы ЧЭ.

Для схем, рассмотренных в нашей статье [8], а также рассматриваемых в данной работе (включая схемы, приведенные в Приложении 1), задержка света при прохождении звеньев схемы определяется, прежде всего, задержкой при распространении через волоконные ЧЭ. Далее в приборной части, за счет применения так называемого компенсирующего интерферометра, импульсы разделяются, смещаются, и каждый исходный импульс совмещается с предыдущим. В итоге, благодаря отдельной обработке импульсов, на выходе компенсирующего интерферометра можно регистрировать результат интерференции импульсов, разность фаз

которых задается фазовой задержкой света в  $n$ -м ЧЭ, и, следовательно, регистрировать информацию о целевом воздействии на данный элемент. В ходе работы измерительной системы входные импульсы повторяются, за счет чего формируется последовательность отсчетов интерференционного сигнала от каждого ЧЭ (от каждого канала).

Анализ таких схем подразумевает разные виды описания и расчетов, связанные с разными типами факторов, которые следует учитывать и согласовывать для обеспечения работоспособности системы и оптимизации ее характеристик. Здесь рассматривается фактор энергетической эффективности схемы, т. е. анализируются уровни оптической мощности импульсов, формируемых схемой.

По аналогии с подходом, использованном и описанном в статье [8], данная работа подразумевает выбор параметров делительных и отражающих элементов, обеспечивающий одинаковую мощность всех формируемых схемой импульсов:  $p_n = P_0$ . В этом случае основным параметром, характеризующим энергетическую эффективность оптической схемы, служит относительный уровень оптической мощности формируемой серии импульсов  $P_{norm} = P_0/P_{in}$ .

Типы оптоволоконных схем с мультиплексированием ЧЭ, проанализированные в статье [8], организованы так, что  $n$ -й обратный импульс, отраженный от  $n$ -го ЧЭ, дважды ответвляется разветвителем и, как следствие, величина  $P_{norm}$  быстро падает с ростом значения  $N$  (в лучшем случае зависимость выражается примерно как  $1/N^2$ ).

Можно привести другой вариант организации схем с мультиплексированием волоконных ЧЭ, причем более выгодный с точки зрения уровня  $P_{norm}$ . Примером служит схема, привлекательная для практического использования (рис. 1), где используются частично отражающие волоконные элементы (полупрозрачные зеркала). В качестве последних в настоящее время преимущественно используются волоконно-оптические брэгговские решетки (ВОБР). По сравнению со схемами, примеры которых даны в статье [8], вариант,

включающий ВОБР, представляет другой вид (см. Приложение 1), обладающий двумя важными особенностями (положительной и отрицательной):

с одной стороны, схема формирует существенно больший относительный уровень мощности импульсов  $P_{norm}$ , который довольно медленно снижается с ростом значения  $N$ ;

с другой стороны, помимо основной последовательности выходных импульсов, в схеме формируются дополнительные, паразитные, которые вызывают перекрестные связи между целевыми сигналами от разных ЧЭ.

Как показано в Приложении 1, такими свойствами могут обладать не только схемы с проходными отражателями, но и с разветвителями, причем на их основе можно реализовывать схемы и отражательного, и проходного типов. Наличие существенной перекрестной связи значительно снижает привлекательность практического применения описываемых вариантов и нейтрализует достоинства таких схем по энергетической эффективности. А для снижения уровня перекрестной связи приходится выбирать параметры так, чтобы уменьшался относительный уровень мощности  $P_{norm}$ . Все это повышает актуальность развития адекватных методик расчета подобных схем.

Общий принцип и основные этапы расчета параметров элементов (в данном случае это, прежде всего, коэффициенты отражения ВОБР) и мощности выходных оптических импульсов полностью аналогичен подходу, описанному в нашей статье [8]. Часть методики расчета связана с получением и использованием мультипликативных выражений для расчета  $p_n$ , предполагающих, что все параметры элементов схемы заданы. Другая часть методики подразумевает вывод рекуррентных соотношений для основных элементов  $n$ -го звена схемы, за счет чего можно обеспечить выполнение условия равенства мощностей всех выходных импульсов ( $p_n = P_0$ ). Эти части расчетных выражений позволяют не только определять требуемые значения параметров элементов схемы, но также учитывать и анализировать влияние

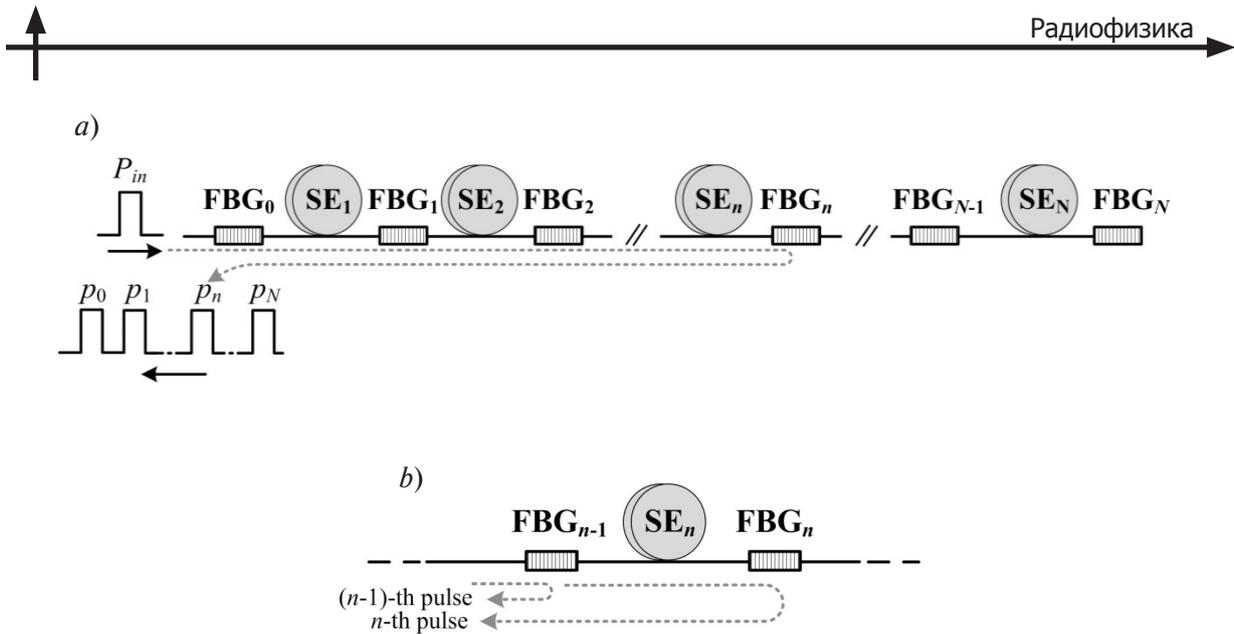


Рис. 1. Пример схемы на основе ВОБР с  $N$  чувствительными элементами (а), а также  $n$ -е звено данной схемы (b); SE $_i$  – чувствительный элемент (Sensitive Element); FBG $_i$  – волоконная брэгговская решетка (Fiber Brag Grating);  $P_{in}, p_n$  – мощности входного и выходных импульсов, соответственно

различных факторов, например потерь в элементах (в том числе случайных), отклонений фактических значений параметров элементов от номинальных или предусмотренных значений, а также прочих моментов, неизбежно присутствующих при создании практических систем.

### Методика расчета параметров ВОБР и общий анализ уровня мощности выходных импульсов

Для описания действия ВОБР в качестве отражательного элемента, будем использовать коэффициент отражения  $R$ , равный отношению уровня мощности оптического излучения, направляемого решеткой в обратном направлении, к уровню мощности, поступающей к ВОБР. При этом мощность излучения, прошедшего через ВОБР, будем описывать коэффициентом пропускания  $K$  на рабочей длине волны, задаваемом выражением

$$K = (1 - R) (1 - \alpha_{el}),$$

где первый множитель учитывает тот факт, что часть мощности направлена решеткой в обратном направлении, а второй – наличие

внутренних (избыточных) потерь оптической мощности; эти потери характеризуется малым параметром  $\alpha_{el}$ .

Будем также использовать коэффициент передачи мощности  $K_f$  для отрезка волокна с ЧЭ, учитывающий потери оптической мощности в данном отрезке. Поскольку в чувствительных элементах волокно может быть скручено в катушку или еще каким-либо образом смонтировано в конструкции ЧЭ, величина этих потерь может быть значимой, даже несмотря на относительно небольшую протяженность этого оптоволоконного отрезка. При наличии в схеме сварных или разъёмных соединений, потери в них также следует учитывать в значениях коэффициентов  $K_f$ .

На практике потери удобно характеризовать в децибелах, с применением стандартных соотношений

$$\alpha_{el[\text{dB}]} = 10 \cdot \lg(1 - \alpha_{el}),$$

$$\alpha_f = 10 \cdot \lg K_f.$$

Находить же значения  $K_f$  и  $\alpha$  по  $\alpha_f$  и  $\alpha_{el[\text{dB}]}$  можно на основе тривиальных обратных соотношений.

С учетом введенных параметров и обозначений, если рассмотреть прохождения входного импульса до  $n$ -й ВОБР и обратно (см. рис. 1, *a*), то нетрудно записать мультипликативное выражение для  $p_n$ :

$$p_n = P_{in} \cdot R_n \cdot \prod_{q=1}^n (K_{q-1}^2 \cdot K_{fq}^2). \quad (1)$$

Формула (1) подразумевает, что если верхний предел произведения меньше нижнего (что имеет место при  $n = 0$ ), то произведение равно единице. На практике часто можно полагать, что все ЧЭ эквивалентны и  $K_f$  не зависит от величины  $n$ . Тогда в выражении (1) этот параметр можно исключить из произведения и использовать дополнительный множитель  $K_f^{2n}$ .

Из анализа одного звена схемы и сравнения разности путей  $(n - 1)$ -го и  $n$ -го импульса (см. рис. 1, *b*) можно получить уравнение, соответствующее балансу  $p_{n-1} = p_n$ ; оно имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} R_{n-1} &= K_{n-1}^2 \cdot K_{fn}^2 \cdot R_n = \\ &= (1 - \alpha_{el(n-1)})^2 (1 - R_{n-1})^2 K_{fn}^2 \cdot R_n, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $n$  может меняться от 1 до  $N$ .

Соотношение (2) представляет собой квадратное уравнение относительно  $R_{n-1}$ , которое имеет решение в виде

$$R_{n-1} = \frac{a + 1 - \sqrt{2a + 1}}{a}, \quad (3)$$

где использовано обозначение  $a = 2[(1 - \alpha_{el(n-1)})K_{fn}]^2 R_n$ .

Второе решение уравнения (2) имеет аналогичную структуру, но со знаком плюс перед квадратным корнем, и не соответствует физическому смыслу в рассматриваемой ситуации, так как приводит к получению значения  $R > 1$ .

Возможность применения рекуррентного

соотношения (3) предполагает выполнение двух условий.

Во-первых, необходимо задать некоторое значение коэффициента отражения замыкающего зеркала  $R_N$ , относительно которого можно далее рассчитывать коэффициенты отражения остальных ВОБР. Выбор этого значения и его влияние будут рассмотрены далее.

Во-вторых, соотношение (3) использует параметры  $K_{fn}$  (для  $n = 1, 2, \dots, N$ ) и  $\alpha_{eln}$  (для  $n = 1, 2, \dots, N - 1$ ), связанные с потерями оптической мощности в элементах схемы. Коэффициенты передачи  $K_{fn}$  зависят от уровня потерь в ЧЭ, и они не связаны с выбором ВОБР, а должны быть известны. Но внутренние потери  $\alpha_{el}$  в ВОБР, вообще говоря, могут быть связаны со значением  $R$  решетки, причем эта связь может быть разной в зависимости от технологии создания решеток и их монтажа в оптическую схему.

Для строгого формального решения рассматриваемой задачи зависимость  $\alpha_{el}$  от  $R$  должна быть так или иначе задана, уравнение (2) должно решаться относительно  $R_{n-1}$  с учетом этой зависимости, а результат может существенно отличаться от задаваемого формулой (3).

В связи с изложенными обстоятельствами, конкретное решение уравнения (2) для общего случае зависимости  $\alpha_{el}(R)$  привести проблематично. Поэтому предлагается в расчетах применять именно соотношение (3), в котором использовать в качестве  $\alpha_{eln}$  некоторое фиксированное и не зависящее от  $n$  значение (типовое или среднее для ВОБР, которые предполагается использовать). При этом если условие малости потерь  $\alpha_{eln} \ll 1$  выполняется достаточно строго, то влияние различия  $\alpha_{el}$  из-за различия  $R_n$  будет мало влиять на получаемые значения  $p_n$ . Более того, после этапа расчета коэффициентов отражения решеток  $R_n$  данные о фактических потерях в ВОБР с этими значениями коэффициентов отражения можно далее учесть при анализе влияния этого фактора на значения  $p_n$ .

Если принять  $\alpha_{eln} = \alpha_{el}$ , то с учетом указанных пояснений рекуррентное выражение (3)



можно записать в более простом виде:

$$R_{n-1} = \frac{K_{fn}^2 \cdot R_n + b - \sqrt{K_{fn}^2 \cdot R_n + b^2}}{K_{fn}^2 \cdot R_n}, \quad (4)$$

где введена константа  $b = 0,5/(1 - \alpha_{el})$ .

Выбрав некоторый уровень отражения последнего отражателя  $R_N$ , можно далее по рекуррентному выражению (4) поочередно получать значения для остальных коэффициентов отражения  $R_n$  от  $n = N - 1$  до  $n = 0$ .

После определения набора требуемых коэффициентов отражения решеток  $R_n$ , в порядке заключительного этапа расчетов можно найти значение мощностей импульсов  $p_n$  на основе выражения (1). Если параметры  $K_{fn}$  и  $\alpha_{eln}$  не зависят от  $n$ , то, согласно принципу вывода выражения (4), все  $p_n$  будут одинаковы и равны  $P_0$ . Поэтому для оценки  $P_0$  можно использовать, например, простейшее соотношение

$$P_0 = p_0 = P_{in} \cdot R_0.$$

С другой стороны, если есть априорная информация о фактических значениях  $K_{fn}$  и  $\alpha_{eln}$ , то с помощью выражения (1) можно найти  $p_n$  и рассмотреть их средние и среднеквадратичные отклонения от  $P_0$ . Если имеются данные о связи избыточных потерь в ВОБР с коэффициентом отражения решетки, то можно найти значения  $\alpha_{eln}$  по рассчитанным  $R_n$  и учесть зависящие от  $n$  потери при вычислении  $p_n$  на основе выражения (1).

Кроме того, в силу тех или иных причин значения  $R'_n$  (реальные значения коэффициентов отражения ВОБР, которые предполагается использовать) могут отличаться от значений  $R_n$  (исходно рассчитанные). Если такие данные известны, то на этом этапе их можно учесть, используя в выражении (1) значения  $R'_n$ , а не  $R_n$ . Примером может служить случай, когда коэффициенты отражения  $R'_n$  реально

изготавливаемых ВОБР задаются с округлением до некоторого уровня, тогда рассчитанные значения  $R_n$  надо будет округлить; либо возможен случай, когда расчеты выполняются для изучения влияния случайных отклонений параметров реальных элементов от заданных.

Для общего анализа энергетической эффективности схем обычно достаточно определения относительного уровня  $P_{norm}$ ; для расчета данного параметра нужно подставить  $P_{in} = 1$  в формулу (1).

Чтобы показать вид зависимостей общего характера, приведем примеры расчетов для случая пренебрежения потерями, когда можно принять, что  $K_{fn} = K_n = 1$ . На рис. 2 с этой целью представлен результат расчета  $R_n$  при  $n = 0, 1, \dots, 16$ , когда  $R_N = 100\%, 50\%, 30\%, 10\%$  и  $5\%$ . Для наглядности дальнейшего анализа приведены зависимости  $R(m)$ , где  $m$  – номер ВОБР от конца тракта, т. е.  $m = N - n$ . При такой нумерации  $R_N = R(0)$ . В соответствии с принципом рекуррентного расчета, представленные зависимости отражают результат для любого числа чувствительных элементов  $N$  в пределах от 0 до 15. Для заданного  $N$  нужно использовать первые  $N + 1$  значений коэффициентов  $R(m)$ , где  $m$  принимает значения от 0 до  $N$ . Остальные же расчетные коэффициенты со значениями  $m > N$  в этом случае не нужны.

Как уже упоминалось, если не вводить в расчеты мощностей по формуле (1) различия между фактическими значениями коэффициентов отражения и исходными расчетными, то мощность  $P_0$  можно оценить как  $P_0 = P_{in} \cdot R_0$ . Тогда

$$P_{norm} = R_0 = R(m)|_{m=N}.$$

Из этого следует, что представленные зависимости  $R(m)$  одновременно отображают связь между величинами  $P_{norm}$  и  $N$ , что также отмечено на рис. 2. Для возможности анализа конкретных значений  $R(m)$  или  $P_{norm}(N)$ , показанных на рис. 2, эти значения приведены в виде таблицы в Приложении 3.

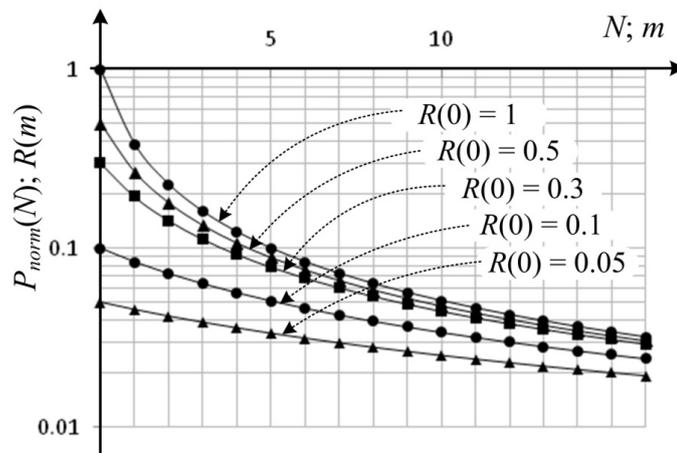


Рис. 2. Зависимости относительного уровня мощности импульсов  $P_{norm}$  от числа элементов  $N$  ( $N$  меняется от 1 до 16) и коэффициентов отражения ВОБР  $R$  от номера решетки  $m$  (нумерация от конца тракта,  $n$  – номер звена схемы,  $m = N - n$  и также меняется от 0 до 16) для разных значений коэффициента отражения конечного элемента  $R(0)$

В случае  $R_N = 1$  (на рис. 2 это соответствует  $R(0) = 1$ ) для области значений  $N$  от 1 до 15 зависимость  $P_{norm}(N)$  с хорошей точностью пропорциональна  $1/N$ ; аппроксимация дает зависимость  $P_{norm} = 0,45 / N^{0,95}$ . Для значений коэффициента отражения конечного элемента, равных 50%, 30% и 10% ( $R(0) = 0,5, 0,3$  и  $0,1$ ), зависимости также хорошо соответствуют степенным, но показатель степени снижается, и при  $R_N = 10\%$  зависимость уже пропорциональна  $1/\sqrt{N}$ . При значении  $R(0) = 0,05$  ( $R_N = 5\%$ ), зависимость уже лучше описывается не степенной, а логарифмической зависимостью; аппроксимация дает функцию

$$P_{norm} = 0,051 - 0,011 \cdot \ln N.$$

Если сравнить эти результаты с аналогичными расчетными данными для схем на основе разветвителей, которые свободны от перекрестных связей каналов [9], то для всех значений  $N$  очевиден существенный выигрыш в уровне выходных оптических импульсов, даже если использовать относительно низкие значения  $R_N$ , такие как 5%. Более того, в случае альтернативного типа схем, зависимости  $P_{norm}(N)$  можно аппрок-

симировать степенными зависимостями, с показателями, близкими к 2 или более высокими [8].

Очевидно, что для любого значения  $N$  максимальный уровень  $P_{norm}$  обеспечивается при  $R_N = 1$ . Однако снижение коэффициента отражения конечной ВОБР и, соответственно, остальных решеток, позволяет снизить уровень перекрестной связи каналов. Количественной характеристикой указанной связи служит коэффициент  $K_{cr}$  (см. Приложение 2). Если пренебречь потерями в волоконных элементах, то для рассматриваемой схемы он вводится выражением (а4) и имеет вид

$$K_{cr} = R^2_{N-1} R_{N-2} / [R_N (1 - R_{N-1})^2].$$

При нумерации  $R(m)$ , используемой на рис. 2, можно записать:

$$K_{cr} = R(1)^2 \cdot R(2) / [R(0) (1 - R(1))^2].$$

С учетом полученных данных (можно, например, использовать сведения из Приложения 3), для случаев  $R_N = 100\%$ ,  $10\%$  и  $5\%$  коэффициенты перекрестной связи  $K_{cr}$  приобретают значения  $0,087$ ;  $6,06 \cdot 10^{-3}$  и  $1,91 \cdot 10^{-3}$  соответственно.

Таблица 1

**Зависимость уровня оптической мощности формируемой системы импульсов от значений ключевых параметров схемы**

$R_N$	$K_{cr}$	$P_{norm}$		
		$N = 4$	$N = 8$	$N = 16$
1,00	0,087	0,123	0,063	0,032
0,10	$6,06 \cdot 10^{-3}$	0,056	0,039	0,024
0,05	$1,91 \cdot 10^{-3}$	0,036	0,028	0,019

Обозначения:  $N$  – число чувствительных элементов,  $R_N$  – коэффициент отражения последнего отражателя в схеме,  $K_{cr}$  – коэффициент перекрестной связи.

Таким образом, уменьшение коэффициента отражения конечного отражателя  $R_N$  в 20 раз приводит к снижению коэффициента перекрестной связи  $K_{cr}$  в 45 раз. Однако при этом будет снижаться относительный уровень мощности оптических импульсов  $P_{norm}$ , формируемых схемой. Это демонстрирует табл. 1, где сопоставлены значения  $R_N$ ,  $K_{cr}$  и  $P_{norm}$ . При этом, согласно данным табл. 1, снижение перекрестной связи почти на два порядка обеспечивается при относительно небольшом снижении  $P_{norm}$ . Для схемы с четырьмя ЧЭ уровень мощности снижается в 3,4 раза. Для более привлекательных вариантов с  $N = 8$  и  $N = 16$  мощность снижается уже менее существенно: для восьми ЧЭ величина  $P_{norm}$  снижается в 2,3 раза, а для шестнадцати – всего в 1,6 раза.

**Влияние потерь мощности в элементах схемы и различия между расчетными и фактическими значениями коэффициентов отражения**

Рассмотренная методика расчета позволяет учитывать потери в элементах схемы. Комплексный анализ влияния потерь на зависимости  $R(m)$  и  $P_{norm}(N)$  вызывает определенные затруднения ввиду слишком высокой вариативности возможных значений параметров при их существенном влиянии на характеристики схемы. В связи с этим ограничимся просто примерами расчетов, показывающих учет таких потерь и их влияние. Так

например, на рис. 3,а показаны зависимости  $R(m)$  или  $P_{norm}(N)$  (при введенной нумерации эти зависимости будут совпадать, см. пояснения выше). График демонстрирует снижение коэффициентов отражения ВОБР, требуемых для равенства мощности выходных импульсов, а также снижение относительного уровня этой мощности вследствие учета потерь в оптоволоконных ЧЭ и избыточных потерь в ВОБР. В этом примере потери элементов всех звеньев схемы полагаются одинаковыми. Нетрудно видеть, что учет незначительных потерь заметно влияет на расчетные зависимости, особенно при большом числе ЧЭ.

На рис. 3,б приведены результаты расчета  $P_{norm}(N)$  при разных значениях  $R_N = R(0)$  для случая учета потерь  $\alpha_f = 0,10$  дБ и  $\alpha_{el} = 0,05$  дБ. Несмотря на заметное влияние потерь на приведенные зависимости (если их сравнивать с кривыми на рис. 2), остается справедливым общий вывод об относительно небольшом снижении уровня выходной мощности при существенном снижении значений  $R_N$  и  $K_{cr}$ .

Как уже было отмечено, важное достоинство рассматриваемой методики – это возможность учета различий между расчетными и фактическими значениями параметров элементов схемы, а также анализа влияния таких различий.

В качестве примера рассмотрим случай, когда для реальных ВОБР коэффициенты отражения могут быть заданы с конечной

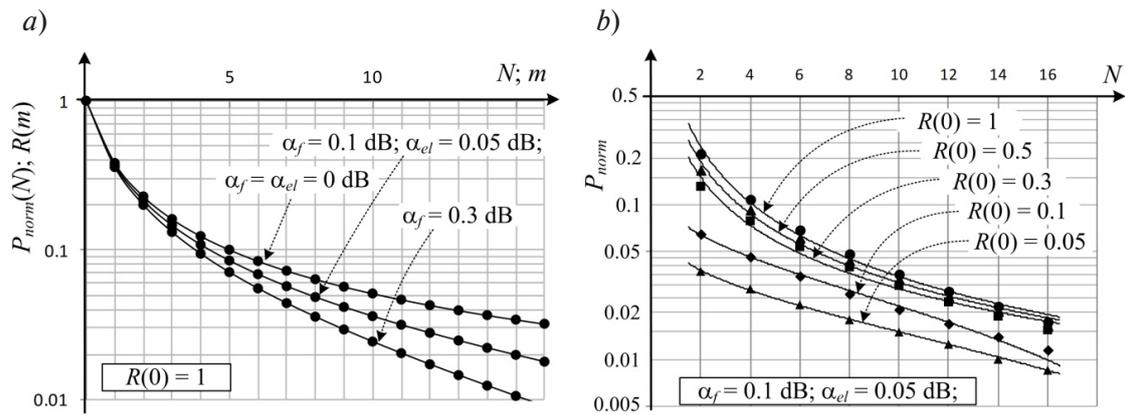


Рис. 3. Примеры результатов расчетов, учитывающих потери оптической мощности в элементах схемы. Представлены зависимости  $R(m)$  (либо  $P_{norm}(N)$ , зависимости совпадают) при  $R(0) = 1$  и разных значениях коэффициентов потерь (a), а также  $P_{norm}(N)$  для разных значений  $R_N$  (b)

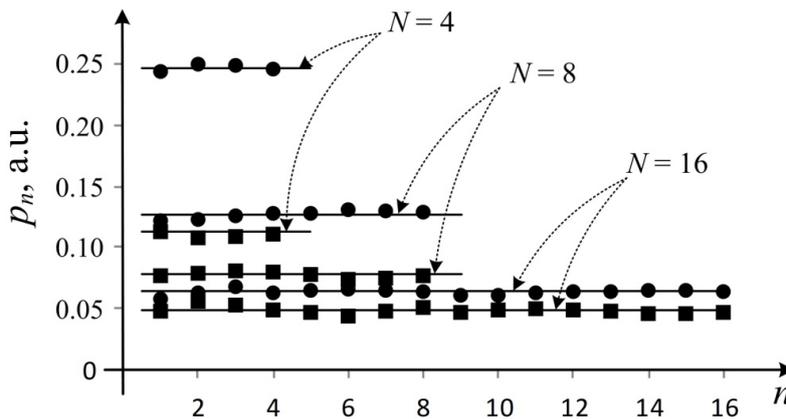


Рис. 4. Зависимости мощности выходных импульсов от номера звена схемы для разных  $N$  и двух значений  $R_N$ , %: 99 и 10 (круглые и квадратные символы соответственно). Значения  $p_n$  нормализованы на мощность входного импульса  $P_m$ . Рассмотрен случай, когда значения  $R'_n$  получены при округлении  $R_n$  до 1 %; сплошными линиями показаны уровни  $P_{norm}$  при отсутствии округления

точностью, например, с точностью до 1%. В Приложении 3 показан результат такого округления значений  $R_n$ , полученных при пренебрежении потерями. Если обратиться к данным таблицы в Приложении 3, то можно убедиться, что округление может вносить существенные различия между  $R'_n$  и  $R_n$ , так как сами исходные значения  $R_n$  невелики, особенно при относительно больших значениях  $N$  и малых коэффициентах отражения  $R_N$ . Влияние округления на неравномерность

$p_n$  демонстрируют графики на рис. 4, где в качестве примера приведены результаты расчетов значений  $p_n$  при подстановке округленных коэффициентов  $R'_n$  в формулу (1). Видно, что при этом вносимые вариации  $p_n$  хотя и заметны, но не существенны. Более точные количественные данные, характеризующие зависимости, приведенные на рис. 4, представлены в табл. 2. Эти данные показывают, что отклонение среднего значения мощностей импульсов отличается от ис-



Таблица 2

**Влияние округления расчетных значений  $R_n$  до 1% при вычислении  
оптической мощности выходных импульсов по формуле (1)**

$N$	$R_n, \%$	$P_{norm}$ (без округления)	$^{mean}p_n$	$(^{SD}p_n / ^{mean}p_n), \%$
4	99	0,246	0,247	1,1
	10	0,113	0,11	2,0
8	99	0,1267	0,1266	2,5
	10	0,0783	0,0776	3,0
16	99	0,006357	0,006369	6,0
	10	0,004842	0,004863	3,6

Обозначения:  $P_{norm}$  – относительный уровень выходной мощности при отсутствии округления;  $^{mean}p_n$  – среднее значение  $p_n$  и  $^{SD}p_n$  – среднеквадратичное (стандартное) отклонение  $p_n$ , нормализованные на мощность входного импульса  $P_{in}$ ; остальные идентичны представленным в табл. 1.

ходной оценки  $P_{norm}$  только в третьем значащем разряде. И даже для  $N = 16$ , где влияние более существенно ввиду низких исходных значений  $R_n$ , среднеквадратичное отклонение набора значений  $p_n$  составляет 6 %, что можно считать приемлемым.

Аналогичным образом можно учитывать другие варианты отклонений фактических параметров от расчетных при вычислении исходных значений  $R_n$  (в том числе фактические значения потерь в элементах) и анализировать их влияние на получаемые значения  $p_n$ . При этом можно учитывать и анализировать как регулярные, так и случайные отклонения значений параметров.

Аналогичным образом можно учитывать другие факторы отклонения  $R'_n$  от  $R_n$ . Также на последнем этапе расчета по формуле (1) можно учесть различия фактических значений других параметров и значений, использованных в первом этапе расчетов, при вычислении исходных значений  $R_n$ , и анализировать их влияние на получаемые значения  $p_n$ . При этом можно учитывать и анализировать как регулярные, так и случайные отклонения значений параметров.

### Заключение

Предложена идеология расчета параметров элементов интерферометрических оп-

товолоконных схем мультиплексированных волоконно-оптических датчиков с использованием ВОБР, позволяющая оптимизировать схему по признакам достижения максимального уровня и контраста формируемых интерференционных сигналов. Показана процедура получения выражений для расчета коэффициентов отражения ВОБР, обеспечивающих одинаковые мощности выходных импульсов. Предложенная методика расчета учитывает потери оптической мощности как в ВОБР, так и в отрезках волокон чувствительных элементов. Показано, что в расчетах можно учесть влияние различий между параметрами элементов, используемыми и получаемыми в процессе исходного расчета, и фактическими параметрами элементов, которые будут применены при создании реальной оптической схемы.

Приведены примеры расчетов параметров ВОБР в рассмотренной схеме для разного числа чувствительных элементов и разных уровней перекрестной связи в схеме. Примеры расчетов демонстрируют возможность анализа влияния потерь в элементах схемы и использования округленных значений коэффициентов отражения ВОБР.

Представленные методы и результаты расчетов могут непосредственно использоваться при проектировании оптоволоконных

интерферометрических измерительных систем на основе мультиплексирования чувствительных элементов в схеме с ВОБР.

**Приложение 1**  
**Два класса оптоволоконных схем с мультиплексированными чувствительными элементами**

Для пояснения особенностей анализируемой схемы кратко опишем два класса оптоволоконных схем для интерферометрических систем с мультиплексированием чувствительных элементов (ЧЭ). В качестве характерных примеров схем первого класса можно указать схемы, рассмотренные в нашей статье [8] и показанные на рис. А1. Первая является схемой отражательного типа, вторая – проходного типа.

Возможен другой класс оптических схем, примеры которых показаны на рис. А2. Этот класс также включает отражательные (*a, b*) и проходные (*c*) схемы. В таких схемах можно использовать отражающие волоконные элементы с низкими потерями, например ВОБР, в режиме частичного отражения/пропускания.

Во всех этих схемах *n*-й выходной оптический импульс формируется, проходя через чувствительные элементы от 1-го до *n*-го. В

отражательных схемах с совмещенным входным/выходным волоконным выводом импульс проходит через эти ЧЭ дважды; в схемах с разделенными волокнами входа и выхода импульс проходит ЧЭ однократно.

Нетрудно убедиться, что в схемах на рис. А1 *n*-й импульс, пройдя через каждый ЧЭ от первого до *n*-го, проходит также через *n*-й разветвитель этого звена схемы по прямому пути (прохождение основной доли мощности) и дважды проходит через разветвитель *n*-го звена по перекрестному пути (ответвление малой доли мощности). В схемах на рис. А2 (*b* и *c*) все происходит аналогичным образом, но *n*-й импульс проходит через *n*-й разветвитель в перекрестном направлении только один раз. В случае схемы ВОБР (*a*) имеет место та же ситуация, если полагать, что прохождение света через ВОБР соответствует прямому прохождению через разветвитель, а отражение от решетки соответствует перекрестному прохождению через него. Именно дополнительный перекрестный проход через разветвитель в схемах первого класса приводит к существенному снижению уровня мощности импульсов, по сравнению со схемами второго класса, поскольку требуемый перекрестный коэффициент пропу-

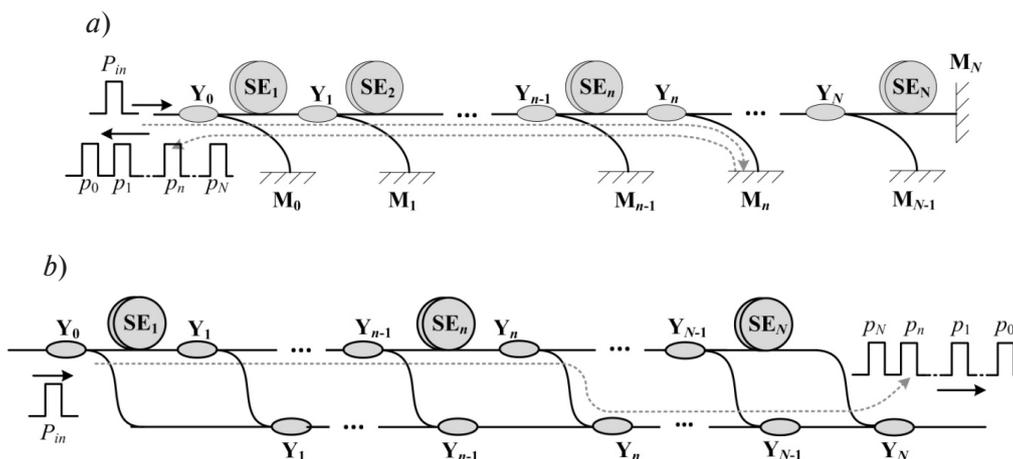


Рис. А1. Оптоволоконные схемы мультиплексирования ЧЭ первого класса: отражательного типа на основе разветвителей и зеркал (*a*) и проходного типа на основе разветвителей (*b*);  $SE_i$  – чувствительный элемент (Sensitive Element);  $Y_i$  – волоконный разветвитель Y-типа;  $M_i$  – зеркало (mirror);  $P_{in}, P_n$  – мощности входного и выходных импульсов, соответственно

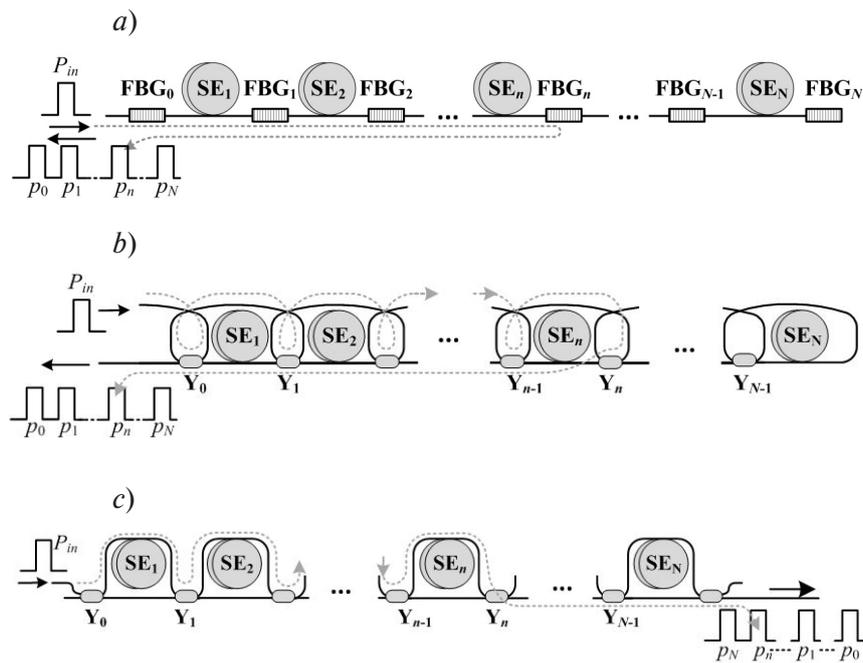


Рис. А2. Оптоволоконные схемы мультиплексирования ЧЭ второго класса: отражательные на основе ВОБР (a) и разветвителей (b), а также проходного типа с разветвителями (c);  $FBG_i$  – волоконные брэгговские решетки (Fiber Brag Grating), остальные обозначения идентичны приведенным на рис. А1

скания разветвителей мал и уменьшается с ростом числа ЧЭ  $N$ .

Однако нетрудно видеть, что в схемах второго класса  $n$ -й выходной импульс может формироваться и при других путях распространения, что более детально описано в Приложении 2. Например, в схеме на рис А1, b импульс может не пройти через  $n$ -й ЧЭ, но дважды пройти через любой предыдущий элемент. А в схеме на рис. А1, c импульс может пройти ЧЭ с 1-го по  $(n - 1)$ -й, потом пройти мимо  $n$ -го ЧЭ и затем пройти через любой из последующих. Если общее число пройденных ЧЭ будет равно  $n$ , то в выходной последовательности импульсов этот импульс будет находиться в  $n$ -й позиции. Это приводит к тому, что далее в формировании интерференционного сигнала  $n$ -го канала участвуют импульсы, фазы которых отличаются не только задержкой в  $n$ -м ЧЭ, но и фазовыми задержками в других ЧЭ. Формирование дополнительного  $n$ -го импульса связано с дополнительными перекрестными проходами разветвителей и существенным дополнитель-

ным ослаблением. Но тем не менее, наличие не только основных, но и дополнительных импульсов в выходной последовательности приводит к перекрестному влиянию измеряемых целевых возмущений в разных каналах. Более детальное рассмотрение путей формирования дополнительных импульсов в схеме с ВОБР дано в Приложении 2.

Отметим, что в схемах первого класса (см., например, рис. А1) альтернативных путей формирования  $n$ -го импульса в выходной последовательности нет. Однако для того, чтобы при организации схемы исключить такую возможность, неизбежно приходится вводить дополнительный перекрестный проход разветвителя и существенно ухудшать энергетическую эффективность схемы.

Таким образом, снижение относительно уровня мощности выходных импульсов является своего рода расплатой за исключение перекрестной связи каналов, и наоборот, можно увеличивать уровень мощности импульсов, если допускать перекрестную связь каналов.

**Приложение 2**

**Формирование паразитных выходных импульсов в схеме мультиплексирования на основе ВОБР**

Рассмотрим формирование дополнительных выходных импульсов, определяющих перекрестную связь каналов в рассматриваемой оптоволоконной схеме с ВОБР. Основная последовательность выходных импульсов формируется при прохождении  $n$ -го импульса до  $n$ -ой решетки и обратно, и при этом отражение происходит один раз (на рис. А3 этот путь обозначен номером 1). Однако возможны и другие пути прохождения схемы, которые имеют ту же протяженность, за счет чего возникают дополнительные импульсы, совпадающие с основным  $n$ -м импульсом. Прежде всего такие дополнительные варианты связаны с однократным дополнительным переотражением между ВОБР, когда отражение происходит три раза, причем один раз свет отражается от  $(n - 1)$ -й ВОБР. На рис. А3 такие варианты показаны под номерами 2, 3. Под номером 3 показаны два варианта с отражениями от ВОБР и номерами  $(n - 2)$  и  $(n - 3)$ , которые различаются направлением прохода. Но можно предложить и аналогичные пути с переотражениями между двумя любыми соседними ВОБР. Важно отметить, что в этом случае происходит ослабление дополнительного импульса и его мощность отличается от мощности основного импульса множителем

$$k_{crn}(k) = R_k R_{k-1} K_{fk} R_{n-1} \times [R_n (1 - R_{n-1})^2 (1 - \alpha_{el(n-1)})^2 K_{fn}]^{-1}, \quad (a1)$$

где подразумевается дополнительное переотражение от ВОБР с номерами  $k$  и  $(k - 1)$  (полагается, что  $k \leq n$ ).

Первые четыре множителя учитывают факторы ослабления паразитного импульса, добавленные к факторам ослабления основного, а множители в квадратных скобках учитывают те факторы ослабления, которые есть у основного импульса, но отсутствуют у паразитного. Дополнительное отражение

может происходить не только между соседними ВОБР, но отстоящими на несколько позиций (например, см. рис. А3, вариант 4). В этом более сложном случае коэффициент ослабления имеет дополнительные компоненты:

$$k_{crn}(k, m) = R_k R_m (K_{fk} K_{f(k+1)} \dots K_{fm}) \times \{R_{n-\Delta} [R_n (1 - R_{n-\Delta})^2 \times (1 - \alpha_{el(n-\Delta)})^2 K_{fn} \dots K_{f(n-\Delta)}]^{-1}\}, \quad (a2)$$

где  $\Delta = k - m$ ; разные  $k$  и  $m$  ( $k \geq m$ ) могут быть любыми, но меньше, чем  $n$ .

На рис. А3, вариант 4, показан случай для  $k = n - 2, m = n - 4$ .

Как следует из пояснений, дополнительных траекторий  $n$ -го импульса может быть много. И хотя для конкретного значения  $N$  их число конечно, полное рассмотрение общего случая проблематично. Представляется целесообразным обратить внимание на вариант, когда дополнительный импульс имеет максимальную мощность. Согласно методике, развитой в данной статье, выравнивание мощностей выходных импульсов требует выполнения условия  $R_n > R_{n-1}$ . Если также предположить, что потери в элементах малы и примерно одинаковы, то нетрудно видеть, что наибольший уровень дополнительных импульсов с однократным переотражением будет в случае 2, показанном на рис. А3 для  $k = n$  и  $n = N$ . Поэтому с учетом выражения (a1) в качестве некоторой количественной меры, характеризующей относительный уровень мощности дополнительных импульсов и перекрестной связи, можно привести коэффициент

$$K_{cr} = k_{crN}(N - 1) = R_{N-1}^2 R_{N-2} K_{f(N-1)} \times [R_N (1 - R_{N-1})^2 \times (1 - \alpha_{el(N-1)})^2 K_{fN}]^{-1}. \quad (a3)$$

Для случая, когда можно не учитывать потери в элементах схемы, коэффициент  $K_{cr}$  можно записать в виде

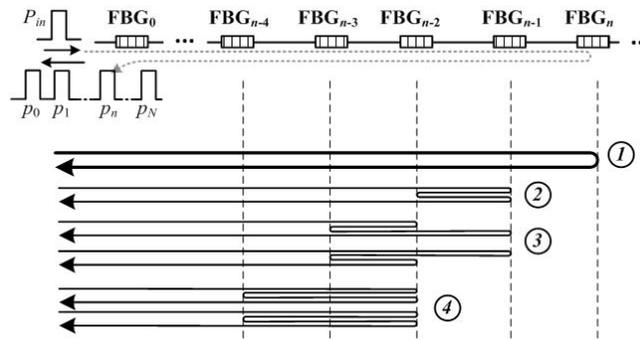


Рис. А3. Варианты (1 – 4) прохождения света через схему с ВОБР с формированием дополнительного  $n$ -го импульса на выходе

$$K_{cr} = R_{N-1}^2 R_{N-2} / [R_N(1 - R_{N-1})^2]. \quad (a4)$$

Кроме траекторий, показанных на рис. А3, можно привести и другие типы формирования дополнительного  $n$ -го импульса, за счет двукратного переотражения. В этом случае импульс отражается, например, от  $(n - 2)$ -й ВОБР и еще дважды переотражается между ней и  $(n - 3)$ -й ВОБР. Однако нетрудно понять, что в этом случае уровень мощности будет иметь существенное дополнительное ослабление, прежде всего за счет дополнительного умножения на два коэффициента отражения ВОБР. Поэтому мерой перекрестной связи более логично полагать коэффициент (а3).

Приложение 3

Результаты расчетов зависимостей  $R(m)$

В основном тексте статьи результаты расчетов зависимостей  $R(m)$  представлены графически на рис. 2 ( $m$  – номер ВОБР от конца схемы). Однако для более точного понимания и анализа этих результатов целесообразно видеть числовые значения рассчитанных коэффициентов  $R(m)$ . Для случая отсутствия потерь результаты расчетов  $R(m)$  при трех значениях  $R_N$  представлены в таблице. Также для иллюстрации использования ВОБР с округленными коэффициентами  $R'$ , там же показан вариант  $R'(m)$  с округлением до 1 %.

Таблица

Результаты расчетов зависимости коэффициентов отражения ВОБР  $R$  от номера решетки  $m$ , с округлением значений и без него

$m$	$R$ , без округления			$R$ , округление до 1%	
	$R_N = R(0) = 1$	$R_N = R(0) = 0,1$	$R_N = R(0) = 0,05$	$R_N = R(0) = 1$	$R_N = R(0) = 0,1$
18	0,0318	0,0242	0,01940	0,03	0,03
15	0,0339	0,0254	0,02018	0,03	0,03
14	0,0363	0,0268	0,02102	0,04	0,03
13	0,0391	0,0283	0,02193	0,04	0,03
12	0,0424	0,0299	0,02293	0,04	0,03
11	0,0462	0,0318	0,02402	0,05	0,03
10	0,0508	0,0339	0,02521	0,05	0,04
9	0,0564	0,0364	0,02653	0,06	0,04

Окончание таблицы

8	0,0633	0,0392	0,02800	0,06	0,04
7	0,0722	0,0424	0,02964	0,07	0,05
6	0,0839	0,0462	0,03147	0,08	0,05
5	0,0999	0,0508	0,03355	0,10	0,06
4	0,1234	0,0564	0,03592	0,12	0,06
3	0,1605	0,0634	0,03865	0,16	0,07
2	0,2278	0,0722	0,04182	0,23	0,08
1	0,3820	0,0839	0,04555	0,38	0,10
0	1,0000	0,1000	0,05000	1,00	0,03

Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jones J.D.C.** 30 Years of the OFS conference: the origins and directions of our subject // Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering. 2014. Vol. 9157. P. 9157C2.
2. **Udd E., Spillman Jr. W.B.** (Eds.) Fiber optic sensors: an introduction for engineers and scientists. 2<sup>nd</sup> edition. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2011. 512 p.
3. **Measures R.M.** Structural monitoring with fiber optic technology. Cambridge, Massachusetts, USA: Academic Press, 2001. 716 p.
4. **Langhammer J., Eriksrud M., Berg C., Nakstad H.** Fiber optic permanent seismic system for increased hydrocarbon recovery // Proceedings of the 11<sup>th</sup> International Congress of the Brazilian Geophysical Society. European Association of Geoscientists & Engineers. Salvador, Brasil, 24–28 Aug. 2009. cp-195-00408.
5. **Plotnikov M.Y., Lavrov V.S., Dmitraschenko P.Y., Kulikov A.V., Meshkovskiy I.K.** Thin cable fiber-optic hydrophone array for passive acoustic surveillance applications // IEEE Sensors Journal. 2019. Vol. 19. No. 9. Pp. 3376–3382.
6. **Akkaya O.C., Digonnet M.J.F., Kino G.S., Solgaard O.** Time-division-multiplexed interferometric sensor arrays // Journal of Lightwave Technology. 2013. Vol. 31. No. 16. Pp. 2701–2708.
7. **Kersey A.D.** Multiplexed interferometric fiber sensors // Proceedings of the 7<sup>th</sup> Optical Fiber Sensors Conference, December 2 – 6, 1990. The Institution of Radio and Electronics Engineers. Sydney, New South Wales, Australia. 1990. Pp. 313–319.
8. **Костромитин А.О., Ликумович Л.Б., Складаров Ф.В., Котов О.И.** Анализ выходной мощности оптоволоконных интерферометрических схем с мультиплексированными чувствительными элементами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 2. С. 126–141.
9. **Liao Y., Austin E., Nash P.J., Kingsley S.A., Richardson D.J.** Highly scalable amplified hybrid TDM/DWDM array architecture for interferometric fiber-optic sensor systems // Journal of Lightwave Technology. 2013. Vol. 31. No. 6. Pp. 882–888.
10. **Ren Z., Cui K., Zhu R., Peng W., Qian J.** Efficient and compact inline interferometric fiber sensor array based on fiber Bragg grating and rectangular-pulse binary phase modulation // IEEE Sensors Journal. 2018. Vol. 18. No. 23. Pp. 9556–9561.
11. **Yoshida M., Hirayama Y., Takahara A.** Real-time displacement measurement system using phase-shifted optical pulse interferometry: Application to a seismic observation system // Japanese Journal of Applied Physics. 2016. Vol. 55. No. 2. P. 022701.

*Статья поступила в редакцию 30.09.2020, принята к публикации 14.10.2020.*

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

**ЛИОКУМОВИЧ Леонид Борисович** — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

**КОСТРОМИТИН Алексей Олегович** — инженер АО “Концерн «ЦНИИ “Электроприбор”», Санкт-Петербург; аспирант Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

197046, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Малая Посадская ул., 30  
kostromitin.aleksei@yandex.ru

**СКЛЯРОВ Филипп Владимирович** — начальник группы АО “Концерн «ЦНИИ “Электроприбор”», Санкт-Петербург; аспирант Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

197046, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Малая Посадская ул., 30  
sklyarov.fil@gmail.com

**КОТОВ Олег Иванович** — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
kotov@rphf.spbstu.ru

**REFERENCES**

1. **Jones J.D.C.**, 30 Years of the OFS conference: the origins and directions of our subject, Proceedings of SPIE — The International Society for Optical Engineering. 9157 (2014) 9157C2.
2. **Udd E., Spillman Jr W.B.** (Eds.), Fiber optic sensors: an introduction for engineers and scientists, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, USA, 2011.
3. **Measures R.M.**, Structural monitoring with fiber optic technology, Academic Press, Cambridge, Massachusetts, USA, 2001.
4. **Langhammer J., Eriksrud M., Berg C., Nakstad H.**, Fiber optic permanent seismic system for increased hydrocarbon recovery, Proceedings of the 11<sup>th</sup> International Congress of the Brazilian Geophysical Society, European Association of Geoscientists & Engineers, Salvador, Brasil, 24–28 Aug. 2009, cp-195-00408.
5. **Plotnikov M.Y., Lavrov V.S., Dmitraschenko P.Y., et al.**, Thin cable fiber-optic hydrophone array for passive acoustic surveillance applications, IEEE Sensors Journal. 19 (9) (2019) 3376–3382.
6. **Akkaya O.C., Digonnet M.J.F., Kino G.S., Solgaard O.**, Time-division-multiplexed interferometric sensor arrays, Journal of Lightwave Technology. 31 (16) (2013) 2701–2708.
7. **Kersey A.D.**, Multiplexed interferometric fiber sensors, Proceedings of the 7<sup>th</sup> Optical Fiber Sensors Conference, December 2 – 6, 1990, The Institution of Radio and Electronics Engineers, Australia, Sydney, New South Wales (1990) 313–319.
8. **Kostromitin A.O., Liokumovich L.B., Skliarov P.V., Kotov O.I.**, The fiber-optic interferometric schemes with multiplexed sensitive elements: an analysis of output optical power level, St. Petersburg Polytechnical State University Journal.

Physics and Mathematics. 13 (2) (2020) 126–141.

9. **Liao Y., Austin E., Nash P.J., et al.**, Highly scalable amplified hybrid TDM/DWDM array architecture for interferometric fiber-optic sensor systems, *Journal of Lightwave Technology*. 31 (6) (2013) 882–888.

10. **Ren Z., Cui K., Zhu R., et al.**, Efficient and compact inline interferometric fiber sensor array

based on fiber Bragg grating and rectangular-pulse binary phase modulation, *IEEE Sensors Journal*. 18 (23) (2018) 9556–9561.

11. **Yoshida M., Hirayama Y., Takahara A.**, Real-time displacement measurement system using phase-shifted optical pulse interferometry: Application to a seismic observation system, *Japanese Journal of Applied Physics*. 55 (2) (2016) 022701.

*Received 30.09.2020, accepted 14.10.2020.*

## THE AUTHORS

### **LIOKUMOVICH Leonid B.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

leonid@spbstu.ru

### **KOSTROMITIN Aleksey O.**

*Concern CSRI “Elektropribor”;*

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

30 Malaya Posadskaya St., St. Petersburg, 197046, Russian Federation

kostromitin.aleksei@yandex.ru

### **SKLIAROV Philip V.**

*Concern CSRI “Elektropribor”;*

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

30 Malaya Posadskaya St., St. Petersburg, 197046, Russian Federation

sklyarov.fil@gmail.com

### **KOTOV Oleg I.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

kotov@rphf.spbstu.ru

DOI: 10.18721/JPM.13416

УДК 519.63: 539.3

## ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ АПОСТЕРИОРНЫЕ ОЦЕНКИ ТОЧНОСТИ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ ДЕФОРМИРУЕМОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА

Я. Вальдман<sup>1</sup>, М.Е. Фролов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Южночешский университет,  
г. Ческе-Будеёвице, Чешская Республика;

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,  
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе представлен исторический обзор и последние результаты, связанные с теоретическим обоснованием и численной реализацией функциональных оценок точности приближенных решений задач механики деформируемого твердого тела, а также построением адаптивных алгоритмов. Эффективное практическое применение данных методов представляет собой актуальную задачу, в том числе для современной инженерной практики.

**Ключевые слова:** оценки погрешности, метод конечных элементов, адаптивные алгоритмы, механика твердого тела

**Ссылка при цитировании:** Вальдман Я., Фролов М.Е. Функциональные апостериорные оценки точности решений задач механики деформируемого твердого тела // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 4. С. 203–215. DOI: 10.18721/JPM.13416

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## FUNCTIONAL-TYPE A POSTERIORI ERROR ESTIMATES FOR SOLUTIONS OF PROBLEMS IN DEFORMABLE SOLID MECHANICS

J. Valdman<sup>1</sup>, M.E. Frolov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> University of South Bohemia in České Budějovice,  
Czech Republic;

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,  
St. Petersburg, Russian Federation

The paper provides a historical review and recent developments on theoretical justification and numerical implementations of functional a posteriori error estimates and adaptive algorithms for approximate solutions to problems in deformable solid mechanics. The efficient practical implementation of such methods is a relevant objective, including for modern engineering practice.

**Keywords:** error estimates, finite element method, adaptive algorithms, solid mechanics

**Citation:** Valdman J., Frolov M.E., Functional-type a posteriori error estimates for solutions of problems in deformable solid mechanics, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (4) (2020) 203–215. DOI: 10.18721/JPM.13416

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Тематика, связанная с построением методов численного решения краевых задач и методов апостериорного контроля погрешности получаемых приближенных решений находится в фокусе внимания ученых и инженеров не одно десятилетие. Число публикаций на эту тему исчисляется тысячами. О важности развития данного направления также свидетельствует высокая значимость тематического кластера «Метод конечных элементов», «Методы Галёркина», «Погрешности» (*англ.* Finite Element Method; Galerkin Methods; Errors) в рейтингах. Вопросы, которые затрагивает теория апостериорного контроля ошибок, выходят за рамки исключительно вычислительной математики или инженерного анализа, поднимая проблемы математического моделирования в целом и даже философии.

В инженерную практику приходит использование огромных вычислительных ресурсов, неимоверно усложняются моделируемые физические процессы, проблемы рассматриваются комплексно, мультидисциплинарно, на разных масштабах физических явлений, практически без упрощений, генерируется большое количество данных и решений. Такие задачи успешно решаются, в том числе в Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого (см., например, статьи [1 – 3]). При этом часто используются коммерческие программные продукты известных разработчиков с закрытым кодом, что не дает в полной мере «заглянуть внутрь» таких систем и оценить все математические и алгоритмические аспекты их реализации. Это мотивирует специалистов на стыке вычислительной математики, физики, механики, инженерных наук на поиск универсальных методов объективной оценки полученных результатов. Для этого разрабатываются как технические методики, так и строгие, математически обоснованные подходы, затрагивающие в той или иной мере два ключевых вопроса:

1. Какова точность полученного решения конкретной задачи и всегда ли мы можем ее

надежно оценить?

2. В каких зонах решение требует уточнения (крайне желательно, чтобы такая процедура могла быть автоматизирована)?

К сожалению, единого подхода к оценке погрешности, который отличался бы одновременно универсальностью, простотой в получении новых теоретических результатов и в их алгоритмической реализации, а также низкой вычислительной трудоемкостью, просто не существует. Поэтому выбор тех или иных приоритетов – это вопрос на стыке с философскими проблемами, и он не может быть сделан однозначно.

## Классические апостериорные оценки

Начало современного этапа интенсивного развития методов построения апостериорных оценок принято связывать с работами [4, 5], вышедшими в конце 70-х годов XX века. Эти работы вызвали значительный интерес, выразившийся в появлении к началу-середине 1980-х гг. сразу нескольких подходов, направленных на проверку точности результатов, получаемых в процессе математического и инженерного моделирования. С середины 1990-х гг., за следующее десятилетие разными авторами было выпущено несколько монографий (см, в частности, работы [6 – 9] и ссылки в них), обобщающих накопленный за это время опыт.

Таким образом, в теории метода конечных элементов появилось отдельное направление, связанное с верификацией численных решений и валидацией математических моделей. Поскольку апостериорные оценки позволяют оценить величину отклонения приближенного решения от неизвестного точного решения, то появляется возможность отделить ошибку, вносимую математической моделью, от ошибки численного решения. Только в этом случае можно делать корректный вывод о пригодности математической модели и ее адекватности при анализе того или иного объекта исследования.

Среди групп методов, получивших в то время наибольшее распространение и даже реализованных в коммерческих программ-



ных продуктах (ANSYS, MATLAB и т. п.) для ряда простых краевых задач, выделим явные и неявные методы невязок, и методы постобработки производных приближенного решения.

Первые из них существенно проще, чем вторые, но они требуют вычисления вспомогательных постоянных, чтобы оценки адекватно отражали не только локальное распределение погрешности по области расчета (были индикаторами), но и ее глобальную величину (были надежными гарантированными оценками погрешности сверху). На практике такой упрощенный подход сталкивается с существенными трудностями, поэтому методы этой группы применяются именно к адаптации сеток.

Неявные методы обходят проблему вычисления констант посредством введения в структуру методов решения последовательности локальных задач с граничными условиями различных типов, что увеличивает их трудоемкость, но далеко не всегда дает оценки нормы ошибки сверху.

И, наконец, еще одна группа классических методов основана на эффекте суперсходимости, который используется для построения и теоретического обоснования индикаторов погрешности в различных задачах. Данные методы основаны на усреднении значений производных или напряжений в точках суперсходимости. Они вычислительно нетрудоемкие и достаточно просты в реализации, показывают хорошую локальную индикацию зон с большой погрешностью даже в том случае, когда не имеют строгого математического обоснования, но не дают надежных оценок погрешности сверху.

Помимо указанных выше монографий, с более подробным обзором результатов на русском языке можно ознакомиться в статье [10].

Основная особенность классических методов апостериорного контроля точности заключается в том, что их строгое математическое обоснование изначально базируется на том предположении, что мы рассматриваем не какое-то произвольное приближенное ре-

шение, а точное решение соответствующей конечномерной задачи — галёркинскую аппроксимацию. Это далеко не всегда так, если речь идет о коммерческих пакетах, в которых решение может не обладать данным свойством из-за особенностей численных алгоритмов. Например, возникает необходимость борьбы с вычислительным локинг-эффектом (locking phenomenon) при решении задач теории пластин. Это делается, в частности, путем использования на части элементов более грубых по точности формул численного интегрирования и приводит к негалёркинским решениям.

### **Классические апостериорные оценки в механике деформируемого твердого тела**

Поскольку более эффективное решение инженерных задач имеет не меньшее самостоятельное значение, чем развитие теории численных методов, интерес исследователей практически одновременно был направлен на разработку методов адаптивного решения механических задач, а не только на общую теорию апостериорного контроля точности как самостоятельный раздел вычислительной математики. Достижения фактически стали возникать одновременно; методы предлагались и обосновывались на примере классических эллиптических краевых задач (уравнения Пуассона или стационарной задачи диффузии), а успешные идеи распространялись на плоские или пространственные задачи линейной теории упругости, теории пластин и т. п. (см., например, статьи [11 – 13] и сборник работ [14]).

Еще в конце 1940-х гг. появился метод гиперокружностей [15], который потом был обобщен в других работах и назван методом ошибок в определяющих соотношениях (см., например, монографию [16]). Метод осреднения градиента [12, 17, 18] также был распространен в 1987 – 1992 гг. на задачи механики деформируемого твердого тела и в настоящее время присутствует в пакете ANSYS в виде встроенной процедуры для анализа точности решений ряда простых задач. При этом в работах можно найти подробное об-

суждение различных аспектов численной реализации процедур усреднения. Ссылки на ранние публикации, распространяющие явные и неявные методы невязок на задачи механики, приводятся, в частности, в монографиях [6, 19] и обзоре [20]. Подробности также можно найти, в том числе, в более поздних монографиях [21, 22] и относительно недавней работе [23].

### Апостериорные оценки функционального типа

Функциональный подход основан на привлечении строгих математических методов: математической физики, функционального анализа, вариационного исчисления (в частности, теории двойственности), теории уравнений в частных производных, и использует слабые (обобщенные) постановки исследуемых задач. Он изначально рассматривает в качестве элемента, погрешность которого необходимо оценить, произвольное решение задачи из соответствующего ей функционального пространства. Это обеспечивает подходу достаточную общность и надежность, поскольку позволяет анализировать ошибки в решениях вне зависимости от скрытых деталей реализации вычислительных процедур, связанных с расчетом этих решений в коммерческих пакетах.

Свойство галёркинской ортогональности, которое является ключевым для классических методов, здесь не играет существенной роли в теории, хотя может быть использовано при практической реализации. Оценки остаются оценками сверху (гарантированными) для всех конформных аппроксимаций, что справедливо не только в теории, но и при численной реализации – это важное свойство означает надежность метода апостериорного контроля ошибок. Подобная универсальность и общность подхода характерна для работ С.Г. Михлина [24]. Функциональный подход был предложен и развивается главным научным сотрудником Санкт-Петербургского отделения Математического института (ПОМИ) им. В.А. Стеклова РАН, профессором Санкт-Петербургского

политехнического университета Петра Великого (СПбПУ) С.И. Репиным вместе с единомышленниками в России и ряде европейских стран: Финляндии, Чехии, Австрии, Швейцарии и Германии. Подробный обзор развития этих исследований можно найти в монографии [22].

Ключевой особенностью подхода является то, что он не только дает гарантированные (не нарушающиеся при практической реализации) верхние оценки погрешности, но и пригоден для широкого спектра приближенных решений. В то же время функциональный подход отличается от геометрических рассуждений метода гиперокружностей, не требует построения равновесных полей и успешно распространен в плане теории на нелинейные задачи.

Формальной точкой отсчета возникновения этого направления можно считать 1996 г., когда появилась первая работа [25], а развитием – выпуск вслед за этим цикла работ С.И. Репина [26 – 29]. Дальнейшую историю применения данного подхода можно проследить по источникам, указанным в монографиях [9, 22, 30].

В общем виде, если не вдаваться в специфику каждой конкретной задачи, оценка выглядит следующим образом:

$$\|u - \tilde{u}\| \leq M(\tilde{u}, D, \tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, C_1, C_2, \dots), \quad (1)$$

где в левой части стоит норма разности между точным решением  $u$  и приближением  $\tilde{u}$ , а в правой возникает функционал  $M$  – мажоранта отклонения.

Аргументами функционала являются приближенное решение  $\tilde{u}$ , параметры задачи  $D$ , набор вещественных констант  $(C_1, C_2, \dots)$ , определяющихся данными задачи, но не свойствами решения или дискретизации. Наконец, набор  $(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots)$  представляет собой совокупность свободных элементов, управляющих точностью верхней оценки. Функционал  $M$  должен обращаться в нуль тогда и только тогда, когда  $\tilde{u}$  – точное решение; должен быть явно вычислимым на прак-



тике; обеспечивать точную оценку погрешности при разумном с физической точки зрения выборе совокупности  $(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots)$ .

Отметим, что для сравнения различных методов существуют локальные и глобальные характеристики, введенные в литературе, но только одна из них — индекс эффективности апостериорной оценки — получила самое широкое распространение и признана бесспорной. Индекс эффективности в случае мажорант погрешности функционального типа вычисляется как отношение значения функционала  $M$  к норме оцениваемой им ошибки. Таким образом, для гарантированных верхних оценок его значение никогда не бывает ниже 1,0 — оптимального значения, при котором метод в точности воспроизводит неизвестную норму погрешности по всей области. Существуют и различные локальные характеристики (см., например, работу [22] и цитируемую там литературу), но они не столь общеупотребительны, как индекс эффективности.

С практической точки зрения, численная реализация методов данной группы не так проста, как для классических индикаторов погрешности, о которых шла речь выше. Повышенная вычислительная трудоемкость и необходимость приложения дополнительных усилий для создания эффективных алгоритмов вычисления апостериорных оценок функционального типа — это плата за универсальность и надежность подхода. Исследования в этом направлении продолжаются и далеки от завершения. Для плоских задач в рамках классической линейной упругости численные результаты были впервые получены в работе [31], при помощи альтернативной более эффективной реализации — в [32]. Для плоских задач теории упругости Коссера оценка получена в работе [33], модифицирована в [34], а обзор численных исследований можно найти в статье [23].

Для задач упругопластичности первый теоретический результат был получен в 1996 г. [25], далее был накоплен достаточный опыт как теоретического, так и практического развития оценок (см. публикации [35 — 38] и ци-

тируемую там литературу, а также смежные исследования [39, 40]).

Наконец, исследование функционального подхода к решению задач теории пластин началось с работы [41], посвященной теории тонких пластин Кирхгоффа — Лява. Первый вариант такой оценки для пластин Рейсснера — Миндлина был получен в 2004 г. [42]. Обзор дальнейших результатов, в том числе относительно численной реализации, можно найти в недавней работе [43].

За последние годы получены новые интересные результаты для задачи с препятствием [44 — 46] и для задач во внешних областях [47], а также для параболических уравнений [48, 49] и для норм, отличающихся от энергетической нормы [50]. Особо отметим работу [46], которая посвящена классу нелинейных задач со свободными границами и также показывает, что мажоранты могут контролировать не только ошибку решения в энергетическом пространстве, но и некоторые меры расстояния до точного решения для нелинейных задач. При этом получаются достаточно эффективные и явно вычисляемые двусторонние оценки, что подробнее изложено в следующем разделе.

### Методология применения подхода

В случае задач, решение которых не обладает повышенной гладкостью и содержит сингулярности, их эффективное численное решение требует привлечения адаптивных методов, основанных на апостериорных оценках. При этом циклически реализуются следующие шаги, хорошо известные в западной литературе, начиная с пионерской и очень широко цитируемой работы [51] (см. также статью [52]):

$$\begin{aligned} \text{SOLVE} &\rightarrow \text{ESTIMATE} \rightarrow \\ &\rightarrow \text{MARK} \rightarrow \text{REFINE}. \end{aligned} \quad (2)$$

Такой подход направлен на получение приближенного решения задачи более высокой точности при меньших затрачиваемых вычислительных ресурсах. Алгоритм, тем не менее, для каждого класса задач требует обо-

снования своей эффективности, которая не следует автоматически из известных априорных оценок скорости сходимости, поскольку последние получены в предположении повышенной регулярности точного решения и гладкости границы расчетной области.

Хорошо известно, что метод конечных элементов (МКЭ, *англ.* Finite Element Method (FEM)) даже для типовых эллиптических задач может сходиться медленно. Таким образом, истинная скорость сходимости адаптивного численного метода существенно зависит от алгоритмических деталей реализации. Отметим, что начало исследованиям в области адаптивных МКЭ (AFEM) положила известная работа [53].

Применение алгоритма (2) дает достаточно широкие возможности при реализации. Методы могут различаться конечными элементами для шага SOLVE, инженерными или строгими подходами к оценке погрешности и индикации ее локального распределения по расчетной области для шага ESTIMATE – в данном случае может быть использована апостериорная оценка типа (1). Ключевое отличие для шага REFINE может быть связано с алгоритмом дробления сеток (*h*-версия) либо увеличением порядка точности аппроксимации (*p*-версия) или использованием более эффективного комбинированного способа (*hp*-версия). Для нелинейных задач с неизвестными свободными границами (например, неизвестными заранее упругопластическими зонами) существует еще один тип улучшения сеток (*rp*-версия), когда граница элемента подгоняется под свободную границу. При этом происходит перемещение узлов существующей конечно-элементной сетки, чтобы улучшить дискретизацию без введения дополнительных степеней свободы (см., например, работу [54]). Наконец, влияние оказывают и разные критерии отбора элементов разбиения для шага MARK.

Реализация функционального подхода в пакетах программ достаточно нетривиальна. Как это можно сделать эффективно в пакете MATLAB, описано, например, в недавних работах [55 – 57]. Созданные коды реализуют

узловые и граничные элементы низкого порядка, они векторизованы и обеспечивают как в плоском, так и в пространственном случаях разумное время сборки даже для дискретизаций с большим количеством неизвестных (до нескольких миллионов).

В настоящее время интерес представляет применение накопленного опыта к различным задачам механики, в частности, при реализации вычисления апостериорных оценок для плоских задач теории упругости Коссе-ра, которая также была выполнена в пакете MATLAB [23].

В завершение остановимся несколько подробнее на вопросе эффективности функционального подхода.

Для линейных задач вычисление мажоранты связано с решением дополнительной задачи минимизации квадратичного функционала  $M^2$ , что приводит к необходимости решать вторую систему линейных алгебраических уравнений. При этом интерес представляют не простые стандартные конечные элементы, а элементы, характерные для смешанных МКЭ (подробности см., например, в работах [23, 32, 43]). Сама задача оценки погрешности математически существенно сложнее, чем исходная краевая задача. Поэтому трудно ожидать, что ее можно всегда решить с малыми вычислительными затратами, по сравнению с исходной. В некоторых случаях это удастся сделать, но, как правило, оценка погрешности требует усилий (и ресурсов, и нетривиальных алгоритмических решений). Трудоемкость вычисления апостериорной оценки редко получается меньше, чем трудоемкость решения исходной задачи.

В большинстве случаев оценки удастся реализовать так, чтобы они мажорировали неизвестную погрешность с индексом эффективности, не превышающем 2,5 (см. работы [22, 23, 32, 43] и цитируемую там литературу). При определенных дополнительных вычислительных затратах, завышение получается не более, чем в 1,2 – 1,3 раза (см. работы [23, 36] и др.). В простых эллиптических краевых задачах даже удается получить индекс эф-



фективности, близкий к оптимальному значению, а именно 1,0. Тогда функциональный подход дает результат, близкий к точному воспроизведению погрешности, достижимость которого доказана теоретически.

Приведем пример того, что это означает на практике. Пусть выбран критерий останковки процесса расчета по достижению гарантированной общей глобальной точности решения, равной 90%. Тогда при истинной погрешности приближенного решения 7% (которую на самом деле мы не знаем) и индексе эффективности 1,3 останковка произойдет на данной сетке, поскольку мажоранта  $M$ , которую мы вычисляем при этом, показывает погрешность меньше 10%. Дополнительных вычислительных затрат, необходимых для анализа сеточной сходимости, при этом не возникает, поскольку решать задачу на более мелкой сетке и производить сравнение не нужно. При индексе эффективности до 2,5 оценка покажет уровень погрешности до 20% и будет принято решение об одной избыточной итерации равномерного дробления сетки, чтобы уменьшить погрешность вдвое. Этот результат также считается приемлемым, поскольку, как уже было отмечено, сама задача оценки точности принципиально сложнее, чем исходная задача без такого контроля.

Что касается адаптивных алгоритмов, то следует отметить, что адаптация сеток

позволяет получать решения того же уровня точности, что и для равномерных разбиений, на существенно меньшем числе узлов. Разница достигает нескольких десятков раз даже при сравнении с равномерными разбиениями до 100 тыс. узлов [23]. В дальнейшем эта разница только растет, что вполне окупает вычислительные затраты, необходимые для построения оценок и индикаторов погрешности.

### Заключение

В работе описаны основные исторические и современные достижения в области построения надежных (гарантированных) оценок точности приближенных решений задач механики деформируемого твердого тела. В основном обсуждение затрагивает методы, разработанные в рамках функционального подхода. Эффективное практическое применение методов данной группы представляет собой нетривиальную и актуальную задачу, имеющую прямое приложение к современной инженерной практике. В данном направлении требуется еще немало усилий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы повышения конкурентоспособности ведущих университетов Российской Федерации (Проект 5-100-2020, реализуемый СПбПУ Петра Великого).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Nemov A., Novokshenov A., Lagutkina A., Sycheva S., Mamchits D., Borovkov A., Vershkov V., Shelukhin D., Lukyanov V.** Multiphysics engineering analysis for high field side reflectometry // *Fusion Engineering and Design*. 2017. Vol. 124. November. Pp. 501–506.
2. **Antonova O., Borovkov A., Boldyrev Yu., Voynov I.** Variational problem for hydrogenerator thrust bearing // *Materials Physics and Mechanics*. 2017. Vol. 34. No. 1. Pp. 97–102.
3. **Alekseev S., Tarasov A., Borovkov A., Aleshin M., Klyavin O.** Validation of EURON-CAP frontal impact of frame off-road vehicle: road traffic accident simulation // *Materials Physics and Mechanics*. 2017. Vol. 34. No. 1. Pp. 59–69.
4. **Babuška I., Rheinboldt W.C.** A-posteriori error estimates for the finite element method // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1978. Vol. 12. No. 10. Pp. 1597–1615.
5. **Babuška I., Rheinboldt W.C.** Error estimates for adaptive finite element computations // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. 1978. Vol. 15. No. 4. Pp. 736–754.
6. **Verfürth R.** A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques. Chichester, Stuttgart: John Wiley & Sons, B.G. Teubner, 1996. 127 p.
7. **Ainsworth M., Oden J.T.** A posteriori error

estimation in finite element analysis. New York: John Wiley & Sons, 2000. 240 p.

8. **Babuška I., Strouboulis T.** The finite element method and its reliability. New York: The Clarendon Press Oxford University Press, 2001. 802 p.

9. **Neittaanmäki P., Repin S.** Reliable methods for computer simulation: Error control and a posteriori estimates. Amsterdam: Elsevier, 2004. 305 p.

10. **Репин С.И., Фролов М.Е.** Применение методов математической физики к контролю точности решений задач механики // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2007. № 1 (49). С. 203–209.

11. **Ladevèze P., Leguillon D.** Error estimate procedure in the finite element method and applications // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1983. Vol. 20. No. 3. Pp. 485–509.

12. **Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z.** A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 1987. Vol. 24. No. 2. Pp. 337–357.

13. **Johnson C., Hansbo P.** Adaptive finite element methods in computational mechanics // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1992. Vol. 101. No. 1–3. Pp. 143–181.

14. **Ladevèze P., Oden J.T.** (Eds.). Advances in adaptive computational methods in mechanics. Amsterdam: Elsevier, 1998. 525 p.

15. **Prager W., Syngé J.L.** Approximations in elasticity based on the concept of function space // Quarterly of Applied Mathematics. 1947. Vol. 5. No. 3. Pp. 241–269.

16. **Ladevèze P., Pelle J.-P.** Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics. New York: Springer, 2005. 413 p.

17. **Zhu J.Z., Zienkiewicz O.C.** Adaptive techniques in the finite element method // Communications in Applied Numerical Methods. 1988. Vol. 4. No. 2. Pp. 197–204.

18. **Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z.** The superconvergent patch recovery (SPR) and adaptive finite element refinement // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1992. Vol. 101. No. 1–3. Pp. 207–224.

19. **Bangerth W., Rannacher R.** Adaptive finite element methods for differential equations. Basel, Birkhäuser: Springer, 2003. 220 p.

20. **Verfürth R.** A review of a posteriori error estimation techniques for elasticity problems // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1999. Vol. 176. No. 1–4. Pp. 419–440.

21. **Verfürth R.** A posteriori error estimation techniques for finite element methods. Oxford: Oxford University Press, 2013. 416 p.

22. **Mali O., Neittaanmäki P., Repin S.** Accuracy verification methods: Theory and algorithms. Dordrecht: Springer Science & Business Media, 2014. 355 p.

23. **Churilova M.A., Frolov M.E.** Comparison of adaptive algorithms for solving plane problems of classical and Cosserat elasticity // Materials Physics and Mechanics. 2017. Vol. 32. No. 3. Pp. 370–382.

24. **Михлин С.Г.** Вариационные методы в математической физике. М.: Наука, 1970. 512 с.

25. **Repin S.I., Xanthis L.S.** A posteriori error estimation for elastoplastic problems based on duality theory // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1996. Vol. 138. No. 1–4. Pp. 317–339.

26. **Репин С.И.** A posteriori error estimates for approximate solutions of variational problems with power growth functionals // Записки научных семинаров ПОМИ. 1997. Т. 249. С. 244–255.

27. **Репин С.И.** A posteriori error estimation for nonlinear variational problems by duality theory // Записки научных семинаров ПОМИ. 1997. Т. 243. С. 201–214.

28. **Repin S.I.** A unified approach to a posteriori error estimation based on duality error majorants // Mathematics and Computers in Simulation. 1999. Vol. 50. No. 1–4. Pp. 305–321.

29. **Repin S.I.** A posteriori error estimation for variational problems with uniformly convex functionals // Mathematics of Computation. 2000. Vol. 69. No. 230. Pp. 481–500.

30. **Repin S.** A posteriori estimates for partial differential equations. Berlin: de Gruyter, 2008. 316 p.

31. **Muzalevsky A.V., Repin S.I.** 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.

32. **Фролов М.Е.** Применение функциональных оценок погрешности со смешанными аппроксимациями к плоским задачам линей-



ной теории упругости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2013. Т. 53. № 7. С. 1178–1191.

33. **Репин С.И., Фролов М.Е.** Оценки отклонения от точного решения для плоских задач в теории упругости Коссера // «Проблемы математического анализа». Межвузовский сборник. 2011. Вып. 62. С. 153–161.

34. **Фролов М.Е.** Функциональные апостериорные оценки погрешности решений плоских задач в теории упругости Коссера // Прикладная математика и механика. 2014. Т. 78. № 4. С. 595–603.

35. **Repin S., Valdman J.** Functional a posteriori error estimates for incremental models in elastoplasticity // Central European Journal on Mathematics. 2009. Vol. 7. No. 3. Pp. 506–519.

36. **Neittaanmäki P., Repin S., Valdman J.** Estimates of deviations from exact solutions of elasticity problems with nonlinear boundary conditions // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2013. Vol. 28. No. 6. Pp. 597–630.

37. **Repin S., Sysala S., Haslinger J.** Computable majorants of the limit load in Hencky's plasticity problems // Computers and Mathematics with Applications. 2018. Vol. 75. No. 1. Pp. 199–217.

38. **Sysala S., Haslinger J., Repin S.** Reliable computation and local mesh adaptivity in limit analysis // Programs and Algorithms of Numerical Mathematics, Proceedings of Seminar. Hejnice. June 24–29, 2018. Institute of Mathematics CAS, Prague. 2019. Pp. 149–158.

39. **Carstensen C., Orlando A., Valdman J.** A convergent adaptive finite element method for the primal problem of elastoplasticity // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2006. Vol. 67. No. 13. Pp. 1851–1887.

40. **Gruber P., Kienesberger J., Langer U., Schöberl J., Valdman J.** Fast solvers and a posteriori error estimates in elastoplasticity // Numerical and Symbolic Scientific Computing: Progress and Prospects. New York: Springer. 2012. Pp. 45–63.

41. **Neittaanmäki P., Repin S.I.** A posteriori error estimates for boundary-value problems related to the biharmonic operator // East-West Journal of Numerical Mathematics. 2001. Vol. 9. No. 2. Pp. 157–178.

42. **Репин С.И., Фролов М.Е.** Об оценке отклонений от точного решения задачи о пластине Рейсснера – Миндлина // Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. Записки научных семинаров ПОМИ. 2004. Т. 310. № 35. С. 145–157.

43. **Frolov M., Chistiakova O.** Adaptive algorithm based on functional-type a posteriori error estimate for Reissner – Mindlin plates // Advanced Finite Element Methods with Applications. Selected papers from the 30th Chemnitz Finite Element Symposium, Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE). 2019. Vol. 128. Ch. 7. Pp. 131–141.

44. **Apushkinskaya D., Repin S.** Biharmonic obstacle problem: guaranteed and computable error bounds for approximate solutions // arXiv:2003.09261v2. 2020.

45. **Apushkinskaya D., Repin S.** Thin obstacle problem: Estimates of the distance to the exact solution // Interfaces and Free Boundaries. 2018. Vol. 20. No. 4. Pp. 511–531.

46. **Repin S., Valdman J.** Error identities for variational problems with obstacles // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 2018. Vol. 98. No. 4. Pp. 635–658.

47. **Pauly D., Repin S.** A posteriori estimates for the stationary Stokes problem in exterior domains // St. Petersburg Mathematical Journal. 2020. Vol. 31. No. 3. Pp. 533–555.

48. **Langer U., Matculevich S., Repin S.** Guaranteed error bounds and local indicators for adaptive solvers using stabilised space–time IgA approximations to parabolic problems // Computers & Mathematics with Applications. 2019. Vol. 78. No. 8. Pp. 2641–2671.

49. **Matculevich S.V., Repin S.I.** Estimates for the difference between exact and approximate solutions of parabolic equations on the basis of Poincaré inequalities for traces of functions on the boundary // Differential Equations. 2016. Vol. 52. No. 10. Pp. 1355–1365.

50. **Repin S.I.** Estimates of the deviation from exact solutions of boundary value problems in measures stronger than the energy norm // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2020. Vol. 60. No. 5. Pp. 749–765.

51. **Dörfler W.** A convergent adaptive algorithm

for Poisson's equation // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1996. Vol. 33. No. 3. Pp. 1106–1124.

52. **Canuto C., Noyette R.H., Stevenson R., Verani M.** On  $p$ -robust saturation for  $hp$ -AFEM // Computers & Mathematics with Applications. 2017. Vol. 73. No. 9. Pp. 2004–2022.

53. **Babuška I., Vogelius M.** Feedback and adaptive finite element solution of one-dimensional boundary value problems // Numerische Mathematik. 1984. Vol. 44. No. 1. Pp. 75–102.

54. **Franke D., Düster A., Nübel V., Rank E.** A comparison of the  $h$ -,  $p$ -,  $hp$ -, and  $rp$ -version of the FEM for the solution of the 2D Hertzian contact problem // Computational Mechanics. 2010.

Vol. 45. No. 5. Pp. 513–522.

55. **Rahman T., Valdman J.** Fast MATLAB assembly of FEM matrices in 2D and 3D: nodal elements // Applied Mathematics and Computation. 2013. Vol. 219. No. 13. Pp. 7151–7158.

56. **Anjam I., Valdman J.** Fast MATLAB assembly of FEM matrices in 2D and 3D: edge elements // Applied Mathematics and Computation. 2015. Vol. 267. 15 September. Pp. 252–263.

57. **Čermák M., Sysala S., Valdman J.** Efficient and flexible MATLAB implementation of 2D and 3D elastoplastic problems // Applied Mathematics and Computation. 2019. Vol. 355. Pp. 595–614.

*Статья поступила в редакцию 29.09.2020, принята к публикации 14.10.2020.*

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ВАЛЬДМАН Ян** – *PhD, доцент института математики Южночешского университета, г. Ческе-Будеёвице, Чешская Республика.*

370 05, Branišovská 1645/31A, České Budějovice 2, Česká Republika  
jan.valdman@gmail.com

**ФРОЛОВ Максим Евгеньевич** – *доктор физико-математических наук, директор Института прикладной математики и механики, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
frolov\_me@spbstu.ru

#### REFERENCES

1. **Nemov A., Novokshenov A., Lagutkina A., et al.**, Multiphysics engineering analysis for high field side reflectometry, Fusion Engineering and Design. 124 (November) (2017) 501–506.

2. **Antonova O., Borovkov A., Boldyrev Yu., Voynov I.**, Variational problem for hydrogenerator thrust bearing, Materials Physics and Mechanics. 34 (1) (2017) 97–102.

3. **Alekseev S., Tarasov A., Borovkov A., et al.**, Validation of EURONCAP frontal impact of frame off-road vehicle: road traffic accident simulation, Materials Physics and Mechanics. 34 (1) (2017) 59–69.

4. **Babuška I., Rheinboldt W.C.**, A-posteriori

error estimates for the finite element method, International Journal for Numerical Methods in Engineering. 12 (10) (1978) 1597–1615.

5. **Babuška I., Rheinboldt W.C.**, Error estimates for adaptive finite element computations, SIAM Journal on Numerical Analysis. 15 (4) (1978) 736–754.

6. **Verfürth R.**, A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques, John Wiley & Sons, B.G. Teubner, Chichester, Stuttgart, 1996.

7. **Ainsworth M., Oden J.T.**, A posteriori error estimation in finite element analysis, John Wiley & Sons, New York, 2000.



8. **Babuška I., Strouboulis T.**, The finite element method and its reliability, The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 2001.
9. **Neittaanmäki P., Repin S.**, Reliable methods for computer simulation: Error control and a posteriori estimates, Elsevier, Amsterdam, 2004.
10. **Repin S.I., Frolov M.E.**, Implementation of methods of mathematical physics to error control in mechanical problems, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. 1 (49) (2007) 203–209 (in Russian).
11. **Ladevèze P., Leguillon D.**, Error estimate procedure in the finite element method and applications, SIAM Journal on Numerical Analysis. 20 (3) (1983) 485–509.
12. **Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z.**, A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, International Journal for Numerical Methods in Engineering. 24 (2) (1987) 337–357.
13. **Johnson C., Hansbo P.**, Adaptive finite element methods in computational mechanics, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 101 (1–3) (1992) 143–181.
14. **Ladevèze P., Oden J.T.** (Eds.), Advances in adaptive computational methods in mechanics, Elsevier, Amsterdam, 1998.
15. **Prager W., Synge J.L.**, Approximations in elasticity based on the concept of function space, Quarterly of Applied Mathematics. 5 (3) (1947) 241–269.
16. **Ladevèze P., Pelle J.-P.**, Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics, Springer, New York, 2005.
17. **Zhu J.Z., Zienkiewicz O.C.**, Adaptive techniques in the finite element method, Communications in Applied Numerical Methods. 4 (2) (1988) 197–204.
18. **Zienkiewicz O.C., Zhu J.Z.**, The superconvergent patch recovery (SPR) and adaptive finite element refinement, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 101 (1–3) (1992) 207–224.
19. **Bangerth W., Rannacher R.**, Adaptive finite element methods for differential equations, Birkhäuser, Basel, 2003.
20. **Verfürth R.**, A review of a posteriori error estimation techniques for elasticity problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 176 (1–4) (1999) 419–440.
21. **Verfürth R.**, A-posteriori error estimation techniques for finite element methods, Oxford University Press, Oxford, 2013.
22. **Mali O., Neittaanmäki P., Repin S.**, Accuracy verification methods: Theory and algorithms, Springer Science & Business Media, Dordrecht, 2014.
23. **Churilova M.A., Frolov M.E.**, Comparison of adaptive algorithms for solving plane problems of classical and Cosserat elasticity, Materials Physics and Mechanics. 32 (3) (2017) 370–382.
24. **Mikhlin S.G.**, Variational methods in mathematical physics, Translated by T. Boddington, Pergamon Press, Oxford, 1964.
25. **Repin S.I., Xanthis L.S.**, A posteriori error estimation for elastoplastic problems based on duality theory, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 138 (1–4) (1996) 317–339.
26. **Repin S.I.**, A posteriori error estimates for approximate solutions of variational problems with power growth functionals, Zapiski Nauchnykh Seminarov POMI. 249 (1997) 244–255.
27. **Repin S.I.**, A posteriori error estimation for nonlinear variational problems by duality theory, Zapiski Nauchnykh Seminarov POMI. 243 (1997) 201–214.
28. **Repin S.I.**, A unified approach to a posteriori error estimation based on duality error majorants, Mathematics and Computers in Simulation. 50 (1–4) (1999) 305–321.
29. **Repin S.I.**, A posteriori error estimation for variational problems with uniformly convex functionals, Mathematics of Computation. 69 (230) (2000) 481–500.
30. **Repin S.I.**, A posteriori estimates for partial differential equations, de Gruyter, Berlin, 2008.
31. **Muzalevsky A.V., Repin S.I.**, 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.
32. **Frolov M.E.**, Application of functional error estimates with mixed approximations to plane problems of linear elasticity, Computational Mathematics and Mathematical Physics. 53 (7) (2013) 1000–1012.

33. **Repin S., Frolov M.**, Estimates for deviations from exact solutions to plane problems in the Cosserat theory of elasticity, *Journal of Mathematical Sciences*. 181 (2) (2012) 281–291, Translated from “Problems in Mathematical Analysis”. (62) (2011) 153–161.
34. **Frolov M.**, Functional a posteriori estimates of the error in the solutions of plane problems in Cosserat elasticity theory, *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 78 (4) (2014) 425–431.
35. **Repin S., Valdman J.**, Functional a posteriori error estimates for incremental models in elasto-plasticity, *Central European Journal on Mathematics*. 7 (3) (2009) 506–519.
36. **Neittaanmäki P., Repin S., Valdman J.**, Estimates of deviations from exact solutions of elasticity problems with nonlinear boundary conditions, *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. 28 (6) (2013) 597–630.
37. **Repin S., Sysala S., Haslinger J.**, Computable majorants of the limit load in Hencky's plasticity problems, *Computers and Mathematics with Applications*. 75 (1) (2018) 199–217.
38. **Sysala S., Haslinger J., Repin S.**, Reliable computation and local mesh adaptivity in limit analysis, *Programs and Algorithms of Numerical Mathematics, Proceedings of Seminar*. Hejnice, June 24–29, 2018. Institute of Mathematics CAS, Prague. (2019) 149–158.
39. **Carstensen C., Orlando A., Valdman J.**, A convergent adaptive finite element method for the primal problem of elastoplasticity, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 67 (13) (2006) 1851–1887.
40. **Gruber P., Kienesberger J., Langer U., et al.**, Fast solvers and a posteriori error estimates in elastoplasticity, *Numerical and symbolic scientific computing. Progress and prospects*, Springer, New York. (2012) 45–63.
41. **Neittaanmäki P., Repin S.I.**, A posteriori error estimates for boundary-value problems related to the biharmonic operator, *East-West Journal of Numerical Mathematics*. 9 (2) (2001) 157–178.
42. **Repin S., Frolov M.**, Estimation of deviations from the exact solution for the Reissner – Mindlin plate problem, *Journal of Mathematical Sciences*. 132 (3) (2006) 331–338. Translated from *Zapiski Nauchnykh Seminarov POMI*. 310 (35) (2004) 145–157.
43. **Frolov M., Chistiakova O.**, Adaptive algorithm based on functional-type a posteriori error estimate for Reissner – Mindlin plates, *Advanced Finite Element Methods with Applications. Selected papers from the 30<sup>th</sup> Chemnitz Finite Element Symposium, Lecture Notes in Computational Science and Engineering (LNCSE)*. 128 (7) (2019) 131–141.
44. **Apushkinskaya D., Repin S.**, Biharmonic obstacle problem: guaranteed and computable error bounds for approximate solutions. arXiv:2003.09261v2 (2020).
45. **Apushkinskaya D., Repin S.**, Thin obstacle problem: Estimates of the distance to the exact solution, *Interfaces and Free Boundaries*. 20 (4) (2018) 511–531.
46. **Repin S., Valdman J.**, Error identities for variational problems with obstacles, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*. 98 (4) (2018) 635–658.
47. **Pauly D., Repin S.**, A posteriori estimates for the stationary Stokes problem in exterior domains, *St. Petersburg Mathematical Journal*. 31 (3) (2020) 533–555.
48. **Langer U., Matculevich S., Repin S.**, Guaranteed error bounds and local indicators for adaptive solvers using stabilised space–time IgA approximations to parabolic problems, *Computers & Mathematics with Applications*. 78 (8) (2019) 2641–2671.
49. **Matculevich S.V., Repin S.I.**, Estimates for the difference between exact and approximate solutions of parabolic equations on the basis of Poincaré inequalities for traces of functions on the boundary, *Differential Equations*. 52 (10) (2016) 1355–1365.
50. **Repin S.I.**, Estimates of the deviation from exact solutions of boundary value problems in measures stronger than the energy norm, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 60 (5) (2020) 749–765.
51. **Dörfler W.**, A convergent adaptive algorithm for Poisson's equation, *SIAM Journal on Numerical Analysis*. 33 (3) (1996) 1106–1124.
52. **Canuto C., Nochetto R.H., Stevenson R., Verani M.**, On  $p$ -robust saturation for  $hp$ -AFEM, *Computers & Mathematics with Applications*. 73 (9) (2017) 2004–2022.
53. **Babuška I., Vogelius M.**, Feedback and



adaptive finite element solution of one-dimensional boundary value problems, *Numerische Mathematik*. 44 (1) (1984) 75–102.

54. **Franke D., Düster A., Nübel V., Rank E.**, A comparison of the  $h$ -,  $p$ -,  $hp$ -, and  $rp$ -version of the FEM for the solution of the 2D Hertzian contact problem, *Computational Mechanics*. 45 (5) (2010) 513–522.

55. **Rahman T., Valdman J.**, Fast MATLAB assembly of FEM matrices in 2D and 3D: nodal

elements, *Applied Mathematics and Computation*. 219 (13) (2013) 7151–7158.

56. **Anjam I., Valdman J.**, Fast MATLAB assembly of FEM matrices in 2D and 3D: edge elements, *Applied Mathematics and Computation*. 267 (15 September) (2015) 252–263.

57. **Čermák M., Sysala S., Valdman J.**, Efficient and flexible MATLAB implementation of 2D and 3D elastoplastic problems, *Applied Mathematics and Computation*. 355 (2019) 595–614.

*Received 29.09.2020, accepted 14.10.2020.*

## THE AUTHORS

### **VALDMAN Jan**

*University of South Bohemia in České Budejovice*

370 05, Branišovská 1645/31A, České Budějovice 2, Česká Republika

jan.valdman@gmail.com

### **FROLOV Maxim E.**

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University*

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

frolov\_me@spbstu.ru



Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.  
PHYSICS AND MATHEMATICS»  
ТОМ 13, № 4, 2020**

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

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*  
канд. физ.-мат. наук *О.А. Яцуржинская* – научный редактор, корректор  
*А.С. Колгатина* – переводчик  
*Н.А. Бушманова* – ответственный секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт <http://ntv.spbstu.ru>

E-mail: [physics@spbstu.ru](mailto:physics@spbstu.ru)

Компьютерная верстка *А.А. Кононовой*

---

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Адрес университета: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

## УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости  
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.  
Физико-математические науки»

### 1. 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 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под двоянными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание ISSN 2304-9782 (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). 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**, включая следующие шифры научных специальностей: 01.02.04, 01.02.05, 01.04.01, 01.04.02, 01.04.03, 01.04.04, 01.04.05, 01.04.06, 01.04.07, 01.04.10, 01.04.15, 01.04.21.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ РАН, а также в международную систему по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

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).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word**.

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Рисунки представляются только в черно-белом варианте. 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 – Бушманова Наталья Александровна  
или по e-mail: physics@spbstu.ru**