

Volume 1 • Number 1 • 2014

ISSN 2312-4334

East European Journal of Physics



Karazin Kharkiv National University Publishing

ISSN 2312-4334

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE

East European Journal of Physics

Volume 1 · Number 1

2014

East European Journal of Physics

EEJP is an international peer-reviewed journal devoted to experimental and theoretical research on the nuclear physics, cosmic rays and particles, high-energy physics, solid state physics, plasma physics, physics of charged particle beams, plasma electronics, radiation materials science, physics of thin films, condensed matter physics, functional materials and coatings, medical physics and physical technologies in an interdisciplinary context.

Published quarterly in hard copy and online by Karazin Kharkiv national University Publishing.

The editorial policy is to maintain the quality of published papers at the highest level by strict peer review.

Approved for publication by the Academic Council of the Karazin Kharkiv National University (February 28, 2013, protocol No.3)

Editor-in-Chief

Azarenkov N.A. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

Deputy editor

Girka I.A. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

Editorial Board

Adamenko I.N., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Akulov V.P., City University of New York, USA

Antonov A.N., Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria

Barannik E.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Beresnev V.M., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Berezhnoy Yu.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Bizyukov A.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Broda B., University of Lodz, Poland

Budagov Yu.A., Joint Institute of Nuclear Research, Dubna, Russia

Dragovich B.G., University of Belgrade, Serbia

Duplij S.A., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Garkusha I.E., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Gofman Yu., Jerusalem College of Technology, Israel

Grekov D.L., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Khodusov V.D., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Kondratenko A.N., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Korchin A.Yu., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Krivoruchenko M.I., Institute for Theoretical and Experimental Physics, Moscow, Russia

Lavrinenko S.D., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Lazurik V.T., Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Mel'nik V.N., Institute of Radio Astronomy, Kharkiv, Ukraine

Merenkov N.P., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Noterdaeme J.-M., Max Planck Institute for Plasma Physics, Garching, Germany

Nurmagambetov A.Yu., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Ostrikov K.N., Plasma Nanoscience Centre Australia, Clayton, Australia

Peletminsky S.V., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Pilipenko N.N., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Radinschi I., Gheorghe Asachi Technical University, Iasi, Romania

Slyusarenko Yu.V., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Smolyakov A.I., University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada

Shul'ga N.F., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Tkachenko V.I., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine

Technical Editor

Girnyk S.A.

Editorial office

Department of Physics and Technologies

Karazin Kharkiv National University

Kurchatov av., 31, office 402, Kharkiv, 61108

Ukraine

Tel: +38-057-335-18-33

E-mail: eejp@univer.kharkov.ua

Web-page: <http://eejp.univer.kharkov.ua>

Certificate of State registration No.20644-10464P, 21.02.2014

East European Journal of Physics

Volume 1

Number 1

2014

REVIEWS

- Structure properties of neutron-rich exotic nuclei** 4
A.N. Antonov, M.K. Gaidarov, P. Sarriguren, E. Moya de Guerra

ORIGINAL PAPERS

- Energetic characteristics of the surface electromagnetic wave at plasma-plasma interface in magnetic field** 21
S.V. Ivko, I.B. Denysenko, N.A. Azarenkov
- Comparative kinetics of ions for different modes of parametric instability of intense Langmuir waves in plasma** 30
A.V. Kirichok, V.M. Kuklin, A.V. Pryjmak
- Electrotransport as a way of metals deep purification** 37
G.P. Kovtun
- Effect of irradiation on properties of CdTe detectors** 47
A.I. Kondrik
- Influence of the relativistic electron beam spectral characteristics on the instability development process at near-limiting currents** 53
G.E. Sarukhanian, A.M. Gorban'
- Plasma filters in technique of the vacuum-arc composite coating deposition** 57
D.S. Aksyonov, I.I. Aksenov, V.A. Belous, Yu.A. Besedina, S.I. Mel'nikov
- Electron beam transport in dielectric tubes** 70
O.S. Druj, V.V. Yegorenkov, A.V. Shchagin, V.B. Yuferov
- The features of multiscaling and hierarchy of structures in zirconium alloys** 74
V.G. Kirichenko
- Enhanced surface diffusion of particles under the action of an external time-periodic fields** 80
I.G. Marchenko, I.I. Marchenko
- Neutron-absorbing method for concentrations Measuring of a boron-10 isotope in water solution of boric acid and water solution of boric acid** 87
A.N. Orobinskiy
- Defining the role of radiation risk factor in cancer causation among KIPT workers: prognosis of stochastic effects and forming of risk groups** 95
A. Mazilov, I. Stadnyk

PACS: 21.60.Jz, 21.65.Ef, 21.10.Gv, 21.30.Fe, 27.40.+z, 27.50.+e

STRUCTURE PROPERTIES OF NEUTRON-RICH EXOTIC NUCLEI

A.N. Antonov*, **M.K. Gaidarov***, **P. Sarriguren†**, **E. Moya de Guerra****

**Institute for Nuclear Research and Nuclear Energy, Bulgarian Academy of Sciences
Sofia 1784, Bulgaria*

*†Instituto de Estructura de la Materia, IEM-CSIC
Serrano123, E-28006 Madrid, Spain*

***Departamento de Física Atomica, Molecular Nuclear, Facultad de Ciencias Fisicas, Universidad Complutense de Madrid
E-28040 Madrid, Spaine*

e- mail: aantonov@inrne.bas.bg

Received February 11, 2014

Theoretical study of important bulk properties of nuclei far from stability such as the nuclear skin and its correlation with the density dependence of the symmetry energy in uniform matter is reviewed. The formation of neutron skin and its evolution with an increase of the neutron number is investigated on the basis of a self-consistent deformed mean-field Hartree-Fock method using density-dependent Skyrme force and pairing correlations in BCS approach. We study isotopic chains of Ni, Kr, and Sn nuclei and consider all the experimentally observed isotopes from neutron-deficient to neutron-rich ones. Various definition of the neutron skin thickness based on the differences between neutron and proton radii as well as on comparison of the tail soft neutron and proton density distributions have been tested. The effects of deformation on the neutron skins in even-even deformed nuclei are discussed on the example of Kr isotopes. The symmetry energy, the neutron pressure and the asymmetric compressibility of spherical Ni, Sn, and Pb and deformed Kr and Sm neutron-rich even-even nuclei are calculated within the coherent density fluctuation model using the symmetry energy as a function of density within the Brueckner energy-density functional. The correlation between the thickness of the neutron skin and the characteristics related with the density dependence of the nuclear symmetry energy is investigated for isotopic chains of these nuclei. The mass dependence of the nuclear symmetry energy and the neutron skin thickness are also studied together with the role of the neutron-proton asymmetry. The studied correlations reveal a smoother behavior in the case of spherical nuclei than for deformed ones. We also note that the neutron skin thickness obtained for ^{208}Pb with SLy4 force is found to be in a good agreement with the recent data. In addition, we analyse the existence of peculiarities of the studied quantities in Ni and Sn isotopic chains that are not present in the Pb chain.

KEYWORDS: exotic nuclei, neutron skin thickness, symmetry energy, deformed Hartree-Fock+BCS method, energy-density functional

INTRODUCTION

The detailed study of the properties of unstable nuclei has been at the fore front of nuclear physics research for the past few years. The ultimate goal of such studies is to develop models and interaction potentials by uncovering novel manifestations of nuclear structure when moving away from the valley of stability, among which nuclear haloes and skins, new regions of nuclear deformation, the disappearance of shell closures or the appearance of new magic numbers may be cited. The most straightforward way to assess the presence of such phenomena is to follow nuclear properties along extended isotopic chains analyzing contrasted behaviors between stable and unstable species.

The determination of charge radii and extraction of nuclear matter radii are crucial for studying the evolution of neutron and proton skins along isotopic chains. To get information on the neutron skin thickness one needs data obtained with probes having different sensitivities to the proton and neutron distributions. The methods for extracting the neutron skin thickness mostly include experiments on hadron scattering [1,2], antiprotonic atoms [3], parity violating electron scattering [4,5,6], as well as giant dipole resonance method [7] and spin-dipole resonance method [8,9].

On the theoretical side, calculations of nuclear charge and matter radii of exotic nuclei are usually performed in the framework of mean-field approaches, namely the Hartree-Fock (HF) method or the Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) method including pairing correlations (e.g., Ref. [10]). Recently, the self-consistent relativistic mean-field (RMF) model has been widely applied to studies of both stable and unstable nuclei (e.g., Ref. [11]). Many calculations show that the RMF model can reproduce with a good precision a number of ground-state nuclear properties including the charge radii [12]. The charge rms radii were successfully described in Ref.[10], where the generator coordinate method (GCM) on top of Gogny HFB calculations was explored.

Theoretical identification of the skin structure in neutron-rich weakly bound nuclei, however, is still a matter of discussion. In Ref. [13] a definition of the neutron skin and its appearance were presented in terms of spherical HF calculations. The proposed criteria which deal with proton and neutron densities allowed one to predict neutron skins in nuclei far from the β stability line. The Helm model [14, 15] has been applied in Ref. [16] to analyze neutron and proton skins, as well as halos, of even-even Ni, Sn, and Pb isotopes in terms of form factors.

Recently, the interest in the symmetry energy has been stirred up by novel astrophysical observations and by the availability of exotic beams in accelerators that provide additional information to the standard nuclear asymmetry studies based on stable nuclei. Particularly important in the different areas, and similarly uncertain, is the density dependence of the symmetry energy in uniform matter. The neutron skin thickness, generally defined as the difference between neutron and proton rms radii in the atomic nucleus, is closely correlated with this dependence. Moreover, it has been shown that the neutron skin thickness in heavy nuclei, like ^{208}Pb , calculated in mean-field models with either nonrelativistic or relativistic effective nuclear interactions, displays a linear correlation with the slope of the neutron equation of state (EOS) obtained with the same interactions at a neutron density $\rho \approx 0.10 \text{ fm}^{-3}$ [17, 18].

The ground states of atomic nuclei are characterized by different equilibrium configurations related to corresponding geometrical shapes. The study of the latter, as well as the transition regions between them, has been a subject of a large number of theoretical and experimental studies (for a review, see, for example, Ref. [19] and references therein). The position of the neutron drip line is closely related to the neutron excess and the deformation in nuclei. In fact, the latter increases the surface area, thus leading to a larger surface symmetry energy in a neutron-rich nucleus with a deformed shape. Conversely, the precise determination of the surface symmetry energy is important to describe the deformability of neutron-rich systems and also to validate theoretical extrapolations. Therefore, it is worth to explore how the nuclear symmetry energy changes in the presence of deformation and correlates with the neutron skin thickness within a given isotopic chain.

Nowadays, the experimental information about the symmetry energy is fairly limited. The need to have information about this quantity in finite nuclei, even theoretically obtained, is a major issue because it allows one to constrain the bulk and surface properties of the nuclear energy-density functionals quite effectively. The symmetry energy of finite nuclei at saturation density is often extracted by fitting ground state masses with various versions of the liquid-drop mass formula within liquid-drop models [20, 21, 22]. It has been also studied in the random phase approximation based on the Hartree-Fock (HF) approach [23] or effective relativistic Lagrangians with density-dependent meson-nucleon vertex functions [24], energy density functionals of Skyrme force [25, 26] as well as relativistic nucleon-nucleon interaction [27, 28].

In the present review (as well as in Refs. [29, 30, 31]), the properties of a wide range of medium and heavy exotic nuclei are described using the self-consistent deformed mean-field Hartree-Fock method with density dependent Skyrme interactions [32, 33] and pairing correlations. Pairing between like nucleons has been included by solving the BCS equations at each iteration either with a fixed pairing gap parameter (determined from the odd-even experimental mass differences) or with a fixed pairing strength parameter. In our calculations the following Skyrme force parametrizations are used: SLy4 [34], SGII [35], Sk3 [36], and LNS [37]. These are among the most extensively used Skyrme forces and are considered as standard references.

The main aim of this study is twofold. First, to clarify theoretically the emergence of the neutron and proton skins in neutron-rich and neutron-deficient isotopes, respectively, by testing different definitions for the skin thickness in the framework of the deformed Skyrme HF+BCS model. We choose isotopes of some medium and heavy nuclei such as Ni ($A=48-78$), Kr ($A=70-100$), and Sn ($A=100-136$) because many of these sets, which lie in the nuclear chart between the proton and neutron drip lines can be formed as radioactive ions to perform scattering experiments. Alternatively to one of the criteria for the neutron skin proposed in Ref. [13] we consider another one which treats proton and neutron densities in a similar way. The calculated charge rms radii are compared with the laser or muonic atoms spectroscopy measurements of isotope shifts performed on Sn [38, 39, 40, 41], Ni [42, 43], and Kr [44] isotopes. Our theoretically calculated neutron skin thicknesses are compared with the available experimental data extracted from methods mentioned above for even-even Sn isotopes with masses from 112 to 124. We also study whether the emergence of a skin is influenced by the nuclear shape, an issue that has not been sufficiently studied so far. The question of the skin formation in nuclei having a non-spherical shape is discussed in detail on the example of Kr isotopes, assuming axial symmetry.

Second, in addition to various linear relations between several quantities in bulk matter and for a given nucleus that have been observed and tested within different theoretical methods (e.g. nonrelativistic calculations with different Skyrme parameter sets and relativistic models), we establish a correlation between the skin thickness and some nuclear matter properties in finite nuclei, such as the symmetry energy s , the symmetry pressure p_0 (proportional to the slope of the bulk symmetry energy), and the asymmetric compressibility ΔK , clarifying to what extent this correlation is appropriate for a given isotopic chain. The symmetry energy is studied on the basis of the Brueckner energy-density functional for nuclear matter [45, 46] and using the coherent density fluctuation model (CDFM) (e.g., Refs. [47, 48, 49]). The CDFM has been successfully applied to different tasks: to calculate nuclear properties of the ground and first monopole states, in scaling analyses and others. In addition to some spherical medium and heavy Ni ($A=74-84$) and Sn ($A=124-152$) isotopes (considered also in Refs. [29, 50]), we present results for a chain of Pb ($A=202-214$) isotopes being inspired by the significant interest (in both experiment [51, 52, 53] and theory [54, 55, 56, 57]) to study, in particular, the neutron

distribution of ^{208}Pb and its rms radius. An investigation of the same possible relation is carried out for chains of deformed neutron-rich even-even Kr ($A=82-96$) (including, as well, the case of some extreme neutron-rich nuclei up to ^{120}Kr) and Sm ($A=140-156$) isotopes. At the end we give some numerical arguments in proof of the existence of some peculiarities in the properties of Ni and Sn isotopic chains that are not present in the Pb chain.

DEFORMED SKYRME HF+BCS FORMALISM

Assuming time reversal, the single-particle Hartree-Fock solutions for axially symmetric deformed nuclei are characterized by the eigenvalue Ω_i of the third component of the total angular momentum on the symmetry axis and by the parity π_i . The state i can be written as

$$\Phi_i(\vec{R}, \sigma, q) = \chi_{q_i}(q) \left[\Phi_i^+(r, z) e^{i\Lambda^- \varphi} \chi_+(\sigma) + \Phi_i^-(r, z) e^{i\Lambda^+ \varphi} \chi_-(\sigma) \right], \quad (1)$$

where $\chi_{q_i}(q)$, $\chi_{\pm}(\sigma)$ are isospin and spin functions, $\Lambda^{\pm} = \Omega_i \pm 1/2 \geq 0$. r, z, φ are the cylindrical coordinates of \vec{R} .

The wave functions Φ_i are expanded into the eigenfunctions, ϕ_{α} , of an axially symmetric deformed harmonic-oscillator potential in cylindrical coordinates. We use 12 major shells in this expansion,

$$\Phi_i(\vec{R}, \sigma, q) = \chi_{q_i}(q) \sum_{\alpha} C_{\alpha}^i \phi_{\alpha}(\vec{R}, \sigma), \quad (2)$$

with $\alpha = \{n_r, n_z, \Lambda, \Sigma\}$ and

$$\phi_{\alpha}(\vec{R}, \sigma) = \psi_{n_r}^{\Lambda}(r) \psi_{n_z}(z) \frac{e^{i\Lambda\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \chi_{\Sigma}(\sigma), \quad (3)$$

in terms of Hermite and Laguerre polynomials

$$\psi_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z!}} \beta_z^{1/2} e^{-\xi^2/2} H_{n_z}(\xi), \quad (4)$$

$$\psi_{n_r}^{\Lambda}(r) = \sqrt{\frac{n_r}{(n_r + \Lambda)!}} \beta_{\perp} \sqrt{2} \eta^{\Lambda/2} e^{-\eta/2} L_{n_r}^{\Lambda}(\eta), \quad (5)$$

with

$$\begin{aligned} \beta_z &= (m\omega_z/\hbar)^{1/2}, & \beta_{\perp} &= (m\omega_{\perp}/\hbar)^{1/2}, \\ \xi &= z\beta_z, & \eta &= r^2\beta_{\perp}^2. \end{aligned} \quad (6)$$

The spin-independent proton and neutron densities are given by

$$\rho(\vec{R}) = \rho(r, z) = \sum_i 2v_i^2 \rho_i(r, z), \quad (7)$$

in terms of the occupation probabilities v_i^2 resulting from the BCS equations and the single-particle densities ρ_i . The multipole decomposition of the density can be written as [32]

$$\rho(r, z) = \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(R) P_{\lambda}(\cos \theta) = \rho_0(R) + \rho_2(R) P_2(\cos \theta) + \dots, \quad (8)$$

with multipole components λ

$$\rho_{\lambda}(R) = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_{-1}^{+1} P_{\lambda}(\cos \theta) \rho(R \cos \theta, R \sin \theta) d(\cos \theta), \quad (9)$$

and normalization given by

$$\int \rho(\vec{R}) d\vec{R} = X; \quad 4\pi \int R^2 dR \rho_0(R) = X, \quad (10)$$

with $X = Z, N$ for protons and neutrons, respectively.

The mean square radii for protons and neutrons are defined as

$$\langle r_{p,n}^2 \rangle = \frac{\int R^2 \rho_{p,n}(\vec{R}) d\vec{R}}{\int \rho_{p,n}(\vec{R}) d\vec{R}}, \quad (11)$$

and correspondingly, the root-mean square (rms) radii for protons and neutrons are given by

$$r_{p,n} = \langle r_{p,n}^2 \rangle^{1/2}. \quad (12)$$

The mean square radius of the charge distribution in a nucleus can be expressed as

$$\langle r_{ch}^2 \rangle = \langle r_p^2 \rangle + \langle r_{ch}^2 \rangle_p + (N/Z) \langle r_{ch}^2 \rangle_n + r_{CM}^2 + r_{SO}^2, \quad (13)$$

where $\langle r_p^2 \rangle$ is the mean square radius of the point proton distribution in the nucleus (11), $\langle r_{ch}^2 \rangle_p$ and $\langle r_{ch}^2 \rangle_n$ are the mean square charge radii of the charge distributions in a proton and a neutron, respectively. r_{CM}^2 is a small correction due to the center of mass motion, which is evaluated assuming harmonic-oscillator wave functions. The last term r_{SO}^2 is a tiny spin-orbit contribution to the charge density. Correspondingly, we define the charge rms radius

$$r_c = \langle r_{ch}^2 \rangle^{1/2}. \quad (14)$$

NEUTRON SKINS IN EXOTIC NUCLEI

To study the neutron skin thickness we will use first the difference between the neutron and proton rms radii to characterize the different spatial extensions of neutron and proton densities. A more effective tool to analyze skins [16], however, is the Helm model [14, 15]. This is a model that allows one to extract in a simple way from the form factor the two main characteristics of the density, a diffraction radius and a surface thickness. In this model one describes the density by convoluting a hard sphere (hs) density having diffraction radius R_d with a gaussian of variance σ ,

$$\rho_{Helm}(r; R_d, \sigma) = \rho_{hs}(r; R_d) * \rho_G(r; \sigma), \quad (15)$$

where

$$\rho_{hs}(r, R_d) = \frac{3X}{4\pi R_d^3} \Theta(R_d - r), \quad (16)$$

and

$$\rho_G(r; \sigma) = (2\pi\sigma^2)^{-3/2} e^{(-r^2/2\sigma^2)}. \quad (17)$$

The corresponding Helm form factor is

$$F_{Helm}(q) = F_{hs}(q; R_d) F_G(q; \sigma) = \frac{3}{qR_d} j_1(qR_d) e^{-\sigma^2 q^2/2}. \quad (18)$$

Now, the most prominent feature of the density distribution, namely its extension, can be related to the first zero in the form factor, this is the diffraction radius

$$R_d = 4.49341/q_1, \quad (19)$$

where q_1 is the first zero of the form factor. The nuclear surface width σ can be related to the height of the second maximum of the form factor located at q_{max} :

$$\sigma^2 = \frac{2}{q_{max}^2} \ln \frac{3j_1(q_{max}R_d)}{R_d q_{max} F(q_{max})}. \quad (20)$$

Taking into account that the second moment of a convoluted distribution is given by the sum of the second moments of the two single distributions, one gets the Helm rms radius

$$R_{rms}^{Helm} = \sqrt{\frac{3}{5} (R_d^2 + 5\sigma^2)}. \quad (21)$$

Taking out the factor $\sqrt{3/5}$, that relates the rms radii to the radii of the equivalent uniform hard spheres, we define

$$R_{hs} = \sqrt{5/3} \langle r^2 \rangle^{1/2} \quad (22)$$

and

$$R_{Helm} = \sqrt{5/3} R_{rms}^{Helm} = \sqrt{R_d^2 + 5\sigma^2}. \quad (23)$$

From these definitions we construct the following neutron-proton radius differences that will be used:

$$\Delta R_d = R_d(n) - R_d(p), \quad (24)$$

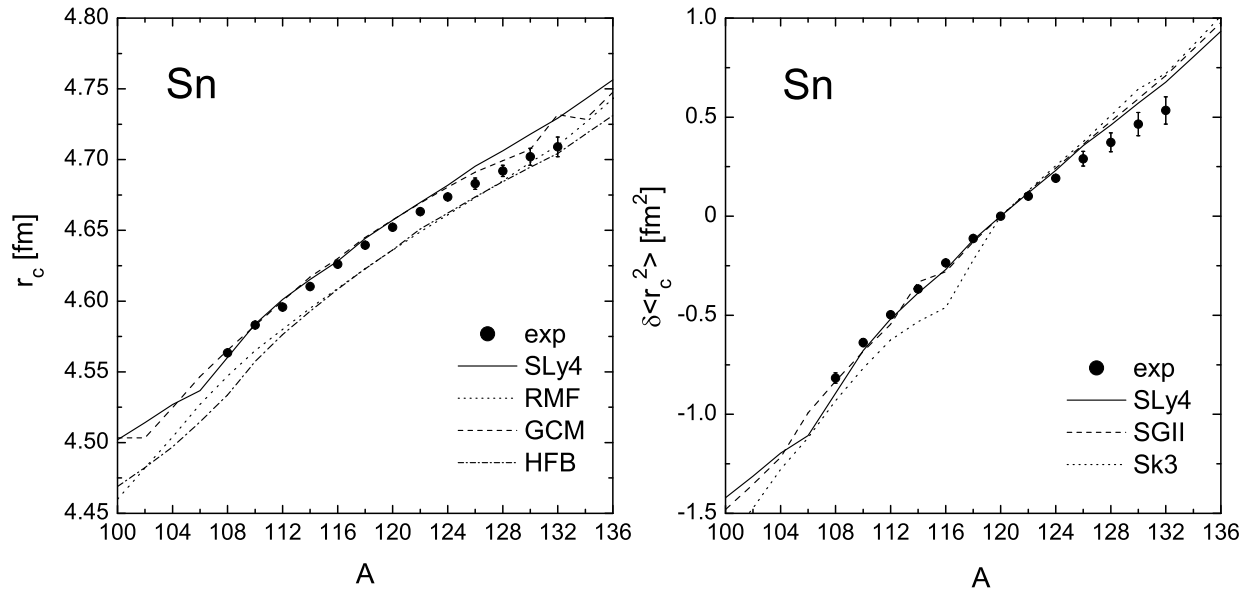


FIGURE 1. Left panel: Charge rms radii r_c of tin isotopes. The SLy4 result is compared with the results from RMF calculations [11], HFB [10] and GCM [10]. Experimental data are from [38, 39, 40, 41]; Right panel: Theoretical (with different Skyrme forces) and experimental isotope shifts $\delta \langle r_c^2 \rangle$ of tin isotopes relative to ^{120}Sn .

$$\Delta R_{\text{hs}} = R_{\text{hs}}(n) - R_{\text{hs}}(p) = \sqrt{5/3} \left[\langle r_n^2 \rangle^{1/2} - \langle r_p^2 \rangle^{1/2} \right], \quad (25)$$

$$\Delta R_{\text{Helm}} = R_{\text{Helm}}(n) - R_{\text{Helm}}(p). \quad (26)$$

Beginning with Sn isotopes for which more data and calculations are available, we show on the right panel of Fig. 1 our results for the squared charge radii differences in Sn isotopes obtained from three different Skyrme forces, SLy4, SGII and Sk3. We compare them to experiment, taking the radius of ^{120}Sn as the reference [41]. On the left panel we compare our SLy4 results for the charge radii with the other theoretical approaches mentioned above. The general purpose of Fig. 1 is firstly to show that different Skyrme forces do not differ much in their predictions of the charge rms radii and secondly, to show that our results with SLy4 are comparable to other theoretical predictions including approaches that go beyond the mean-field approximation, as well as relativistic approaches. We conclude that our method reproduces the experimental data with a similar accuracy to other microscopic calculations that, as explained above, may be more sophisticated but may also be more time consuming. This agreement provides a good starting point to make predictions for other quantities such as neutron-proton radii differences, where the experimental information is scarce and it is not as accurate as in the case of charge radii.

In Fig. 2 we plot the differences between the rms of neutrons and protons $\Delta r_{np} = r_n - r_p$. On the left panel we show our results for Sn isotopes and compare them to RMF results and to experimental data. As we can see the experimental data are located between the predictions of both theoretical approaches and in general, there is agreement with experiment within the error bars. On the right panels we see the predictions for Δr_{np} in the cases of Ni and Kr isotopes, where there are no data. As it can be seen, the RMF results for the difference Δr_{np} systematically overestimate the Skyrme HF results. The reason for this is related to the difference in the nuclear symmetry energy and, consequently, to the different neutron EOS which has been extensively studied in recent years [25, 26, 58, 59].

Figure 3 shows the neutron (solid) and proton (dashed) densities $\rho_0(R)$ (8) in the $^{100,120,136}\text{Sn}$ isotopes. From left to right we see the evolution of these densities with the increase of the number of neutrons. In the case of ^{100}Sn ($N=Z=50$) we see that the two densities are practically the same except for Coulomb effects that make the protons to be more extended and, therefore, this has to be compensated with a small depression in the interior. The effect of adding more and more neutrons is to populate and extend the neutron densities. This makes also the proton distribution to follow the neutron one, increasing its spatial extension. The cost of this radius enlargement in the case of protons is a depression in the nuclear interior to preserve the normalization to the constant number of protons $Z = 50$. Then, it can be seen graphically the emergence of a region at the surface where the protons have practically disappeared while the neutrons still survive. We will quantify later this region in terms of the neutron skin thickness definitions.

The thickness of a neutron skin in nuclei may be defined in different ways. One of these possibilities is to define it as the difference between the root mean square radius of neutrons and that of protons, as we have plotted in Fig. 2. Similarly, it can be defined as the difference between the neutron and proton radii of the equivalent uniform spheres

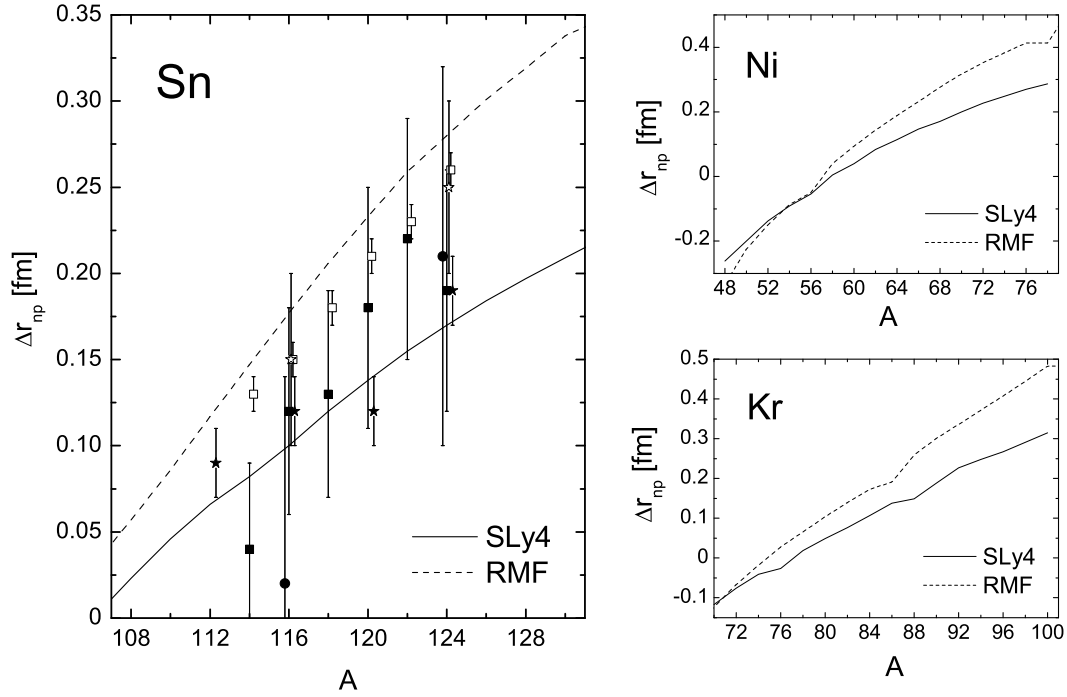


FIGURE 2. Difference between neutron and proton rms radii Δr_{np} of Sn, Ni, and Kr isotopes calculated with SLy4 force. The RMF calculation results are from Ref. [11]. The experimental data for Sn isotopes measured in (p, p) reaction (open stars) [1, 2], antiproton atoms (full stars) [3], giant dipole resonance method (full circles) [7] and spin dipole resonance method (full and open squares) [8, 9] are also shown.

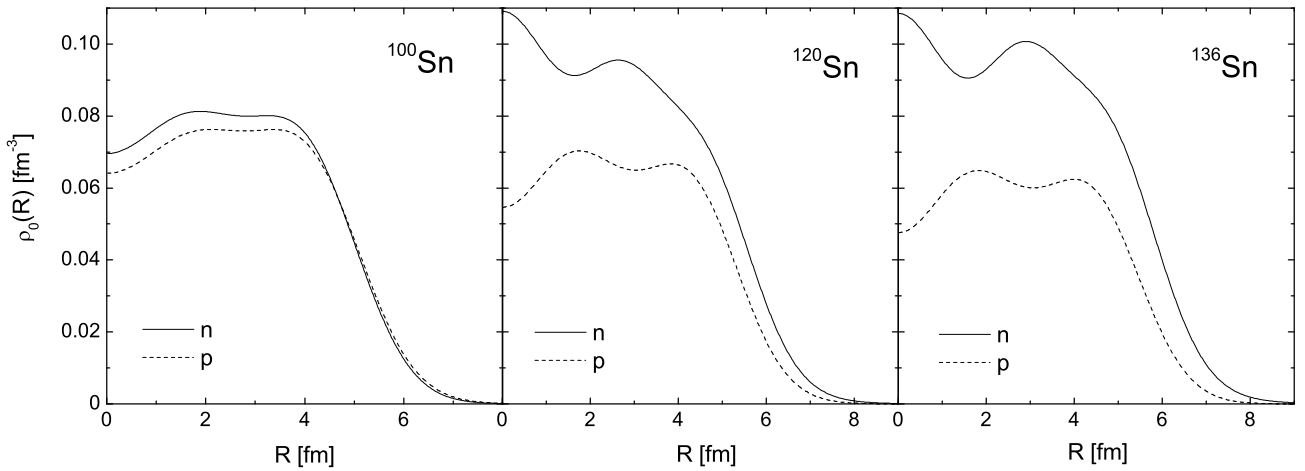


FIGURE 3. HF+BCS proton and neutron densities $\rho_0(R)$ of ^{100}Sn , ^{120}Sn , and ^{136}Sn calculated with SLy4 force.

[Eq. (25)]. Alternatively, it can be defined as the difference between the neutron and proton diffraction radii (24) or Helm radii (26).

On the other hand, the skin thickness can be also defined in terms of some criteria that the neutron and proton densities must fulfill. In Ref. [13] the neutron skin thickness is defined as the difference between two radii, R_1 and R_2 , where R_1 is the radius at which the ratio of the neutron density to the proton density is equal to some given value (4 in [13]) and R_2 is the radius at which the neutron density becomes smaller than some percentage of the density at the center of the nucleus (1 % in [13]). When this difference, $\Delta R = R_2 - R_1$, is larger than some established value (in [13] this value is 1 fm, which is comparable to the range of the nuclear force), a neutron skin with skin thickness ΔR is said to occur. We have also considered the case where the first criterion for the inner radius R_1 of the neutron skin is changed. We use instead of the above criterion for R_1 , the radius at which the proton density becomes smaller than 1% of the latter at the center, which is similar to the criterion used to define the outer radius R_2 , but in this case for proton density instead of the neutron density. When we use the conditions in Ref. [13], we call it criterion (a). When we use the alternative condition for R_1 , we call it criterion (b).

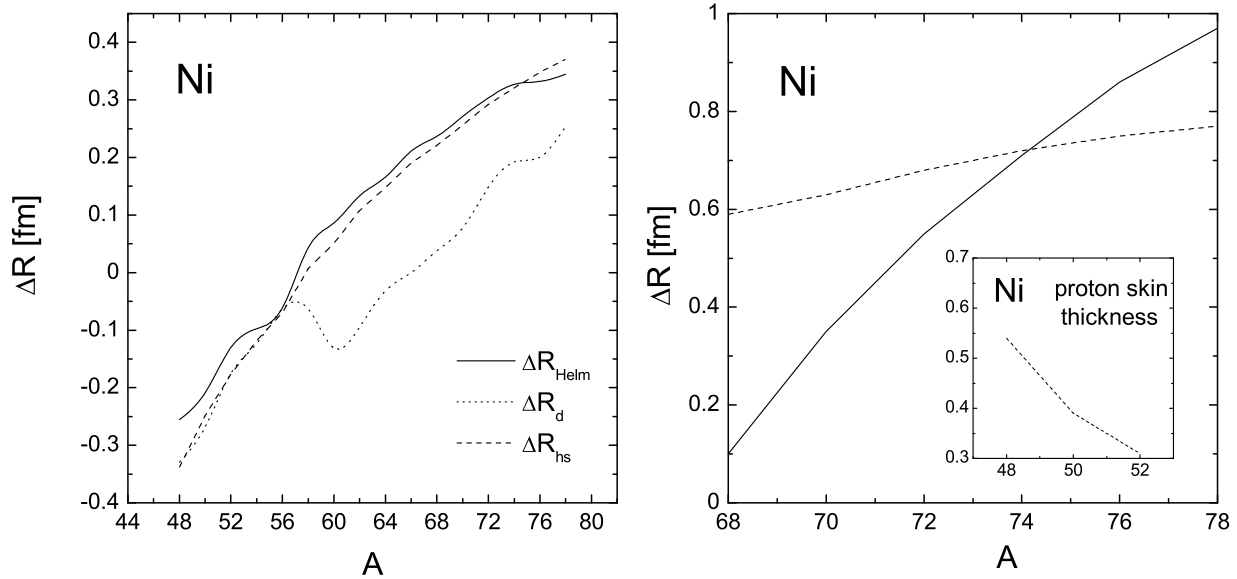


FIGURE 4. Neutron skin thicknesses for Ni isotopes. Left panel: ΔR_d [Eq. (24)], ΔR_{hs} [Eq. (25)], and ΔR_{Helm} [Eq. (26)]; Right panel: corresponding to criterion (a) (solid line) and criterion (b) (dotted line). A formation of proton skin thickness with the criterion (b) is also shown.

We show in Fig. 4 the results obtained for the neutron skin thickness in Ni isotopes according to the different definitions discussed above. The left panel contains the results for definitions involving directly the difference between neutron and proton radii [Eqs. (24)–(26)]. The skin thickness predicted by the difference of the diffraction radii is in general smaller than the thickness predicted by the other two more involved options that are very similar in this range of masses. The right panel contains the neutron skin thickness defined according to the criteria on the density distributions (a) (solid line) and (b) (dashed line). They only differ in the way in which the starting radius of the skin R_1 is chosen. One can see that we obtain larger neutron skin thicknesses when using criterion (b) in the lighter isotopes, but this is reversed for heavier isotopes and we get larger thickness when using criterion (a).

We also consider the most neutron-deficient region of Ni isotopes in a search for the formation of a proton skin. Reversing the definitions of R_1 and R_2 and applying the criterion (b) with protons and neutrons interchanged, the obtained results are shown in the inset of the right panel in Fig. 4. We find no proton skin when applying criterion (a). One can see that a small skin starts developing in these isotopes but we cannot push it further because ^{48}Ni is already at the proton drip line. The results are then not conclusive enough to assess the existence of a proton skin in these isotopes.

When the nucleus is deformed, the thickness of the neutron skin might depend on the direction. It is an interesting and natural question to ask whether the deformed densities give rise to a different skin size in the different directions. It is also interesting to know whether the emergence of the skin may be influenced by the nuclear shape. We first study the intrinsic density distributions $\rho(\vec{R})$ in various selected directions. For that purpose we show in Figs. 5 and 6 the densities of ^{98}Kr for oblate and prolate shapes, respectively. We can see the spatial distributions for neutrons (solid) and protons (dotted) in three different directions: z -direction ($r = 0$), r -direction ($z = 0$), and $r = z$ direction. We can observe that the profiles of the densities as well as the spatial extensions change with the direction. Clearly, the densities are more extended in the z -direction in the case of prolate shapes. The opposite is true in the case of oblate shapes. The case $r = z$ gives always intermediate densities. We have added in the three directions a couple of full dots, indicating the radii R_1 and R_2 that defines the skin thickness according to the above mentioned criterion (a).

It is also worth looking at the points in the (r, z) plane that define the ellipses where the criteria for R_1 and R_2 are met. Figure 7 shows these points for protons (thin lines) and neutrons (thick lines) and for the two shapes, prolate (solid) and oblate (dashed). We can see that the size of the skin changes little with the directions perpendicular to the surface, but shows a tendency to increase on the shorter axis. It is interesting to note that the skin size of the spherical component $\rho_0(R)$ is an intermediate value. The overall skin thickness is also similar in the oblate and prolate equilibrium shapes. From this example we may conclude that the skin thickness does not depend much on the oblate or prolate character of the deformation.

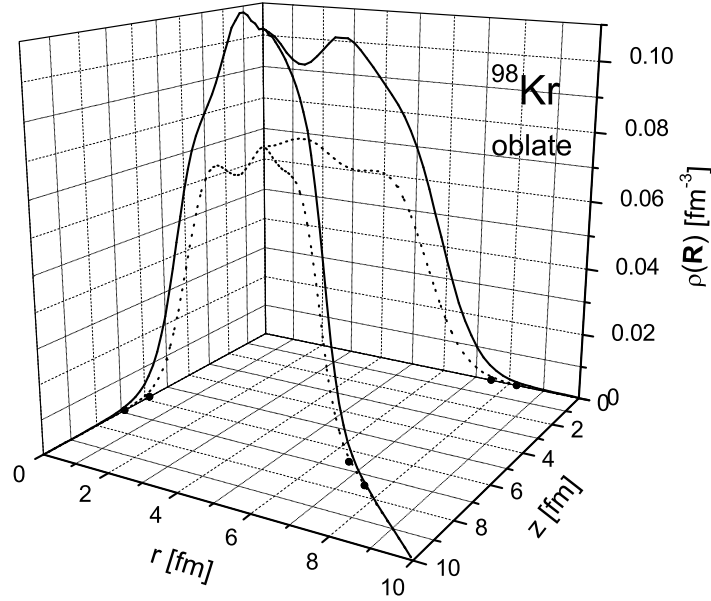


FIGURE 5. Neutron (solid line) and proton (dotted line) density distributions $\rho(\vec{R})$ in different directions for oblate shape of ^{98}Kr . The full dots shown on the (r, z) plane correspond to radii R_1 and R_2 according to criterion (a).

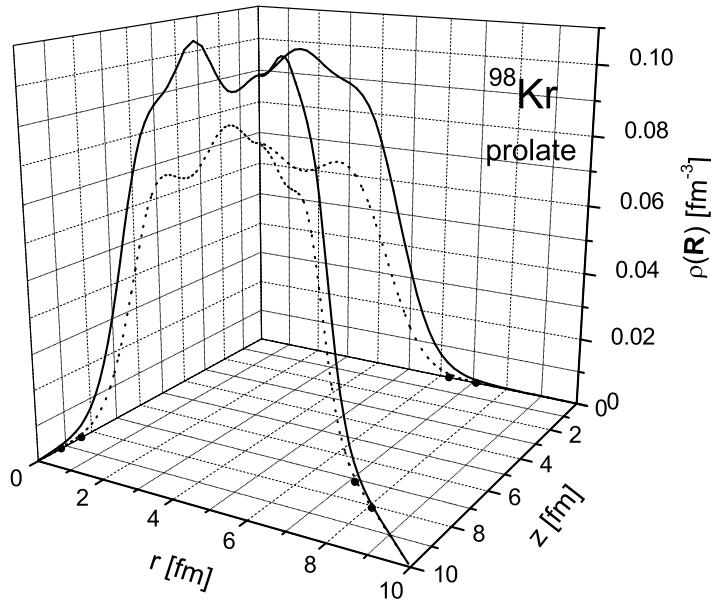


FIGURE 6. Same as in Fig. 5, but for prolate shape of ^{98}Kr .

SYMMETRY ENERGY AND SURFACE PROPERTIES OF NEUTRON-RICH EXOTIC NUCLEI

The symmetry energy $S(\rho)$ is related to the Taylor series expansion of the energy per particle for nuclear matter (NM) in terms of the isospin asymmetry $\delta = (\rho_n - \rho_p)/\rho$

$$E(\rho, \delta) = E(\rho, 0) + S(\rho)\delta^2 + O(\delta^4) + \dots, \quad (27)$$

where $\rho = \rho_n + \rho_p$ is the baryon density with ρ_n and ρ_p denoting the neutron and proton densities, respectively (see, e.g. [58, 60]). Odd powers of δ are forbidden by the isospin symmetry and the terms proportional to δ^4 and higher orders are found to be negligible.

Near the saturation density ρ_0 the energy of isospin-symmetric matter, $E(\rho, 0)$, and the symmetry energy, $S(\rho)$, can be expanded as

$$E(\rho, 0) = E_0 + \frac{K}{18\rho_0^2}(\rho - \rho_0)^2 + \dots, \quad (28)$$

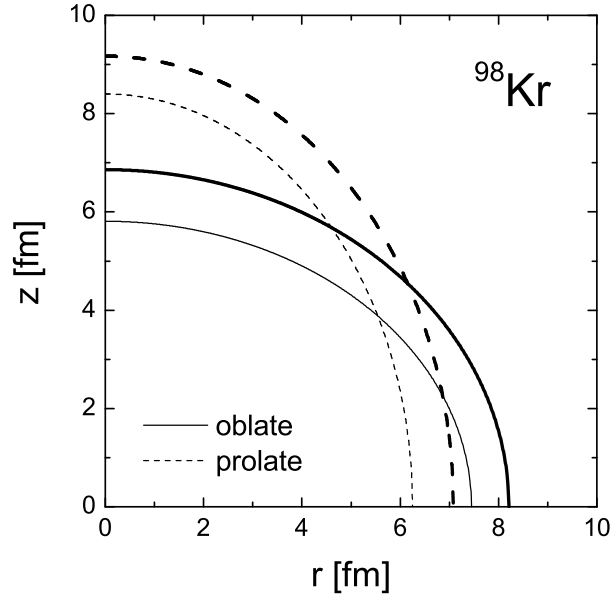


FIGURE 7. Radii R_1 and R_2 according to criterion (a) for neutrons (thick lines) and protons (thin lines) in ^{98}Kr nucleus (shown in rz plane) corresponding to its oblate (solid lines) and prolate (dashed lines) shape.

and

$$S(\rho) = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 E(\rho, \delta)}{\partial \delta^2} \right|_{\delta=0} = a_4 + \frac{p_0}{\rho_0^2} (\rho - \rho_0) + \frac{\Delta K}{18\rho_0^2} (\rho - \rho_0)^2 + \dots \quad (29)$$

The parameter a_4 is the symmetry energy at equilibrium ($\rho = \rho_0$). The pressure p_0^{NM}

$$p_0^{NM} = \rho_0^2 \left. \frac{\partial S}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_0} \quad (30)$$

and the curvature ΔK^{NM}

$$\Delta K^{NM} = 9\rho_0^2 \left. \frac{\partial^2 S}{\partial \rho^2} \right|_{\rho=\rho_0} \quad (31)$$

of the nuclear symmetry energy at ρ_0 govern its density dependence and thus provide important information on the properties of the nuclear symmetry energy at both high and low densities. The widely used "slope" parameter L^{NM} is related to the pressure p_0^{NM} [Eq. (30)] by

$$L^{NM} = \frac{3p_0^{NM}}{\rho_0}. \quad (32)$$

The CDFM was suggested and developed in Refs. [47, 48, 49]. The model is related to the delta-function limit of the generator coordinate method [48, 49, 61]. In the model the one-body density matrix (OBDM) $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ is written as a coherent superposition of the OBDM's for spherical "pieces" of nuclear matter $\rho_x(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (so-called "fluctons") with density $\rho_x(\mathbf{r}) = \rho_0(x)\Theta(x - |\mathbf{r}|)$ with $\rho_0(x) = 3A/(4\pi x^3)$:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 \rho_x(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (33)$$

with

$$\rho_x(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 3\rho_0(x) \frac{j_1(k_F(x)|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{(k_F(x)|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)} \Theta\left(x - \frac{|\mathbf{r} + \mathbf{r}'|}{2}\right). \quad (34)$$

The generator coordinate x is the radius of a sphere containing Fermi gas of all A nucleons uniformly distributed in it. In Eq. (34) j_1 is the first-order spherical Bessel function and

$$k_F(x) = \left(\frac{3\pi^2}{2}\rho_0(x)\right)^{1/3} \equiv \frac{\alpha}{x} \quad (35)$$

with

$$\alpha = \left(\frac{9\pi A}{8}\right)^{1/3} \simeq 1.52A^{1/3} \quad (36)$$

is the Fermi momentum of such a formation.

In the CDFM the Wigner distribution function which corresponds to the OBDM from Eq. (33) is:

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 W_x(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad (37)$$

where

$$W_x(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{4}{(2\pi)^3} \Theta(x - |\mathbf{r}|) \Theta(k_F(x) - |\mathbf{k}|). \quad (38)$$

Correspondingly to $W(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ from Eq. (37), the density $\rho(\mathbf{r})$ in the CDFM is expressed by means of the same weight function $|\mathcal{F}(x)|^2$:

$$\rho(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} W(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 \frac{3A}{4\pi x^3} \Theta(x - |\mathbf{r}|) \quad (39)$$

normalized to the mass number:

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = A. \quad (40)$$

If one takes the delta-function approximation to the Hill-Wheeler integral equation in the generator coordinate method one gets a differential equation for the weight function $\mathcal{F}(x)$ [48, 49, 61]. Instead of solving this differential equation we adopt a convenient approach to the weight function $|\mathcal{F}(x)|^2$ proposed in Refs. [47, 48, 49]. In the case of monotonically decreasing local densities (*i.e.* for $d\rho(r)/dr \leq 0$), the latter can be obtained by means of a known density distribution $\rho(r)$ for a given nucleus:

$$|\mathcal{F}(x)|^2 = -\frac{1}{\rho_0(x)} \left. \frac{d\rho(r)}{dr} \right|_{r=x}. \quad (41)$$

The normalization of the weight function is:

$$\int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 = 1. \quad (42)$$

Considering the pieces of nuclear matter with density $\rho_0(x)$ one can use for the matrix element $V(x)$ of the nuclear Hamiltonian the corresponding nuclear matter energy from the method of Brueckner *et al.* [45, 46]. In this energy-density method the expression for $V(x)$ reads

$$V(x) = AV_0(x) + V_C - V_{CO}, \quad (43)$$

where

$$\begin{aligned} V_0(x) = & 37.53[(1 + \delta)^{5/3} + (1 - \delta)^{5/3}] \rho_0^{2/3}(x) + b_1 \rho_0(x) + b_2 \rho_0^{4/3}(x) + b_3 \rho_0^{5/3}(x) \\ & + \delta^2 [b_4 \rho_0(x) + b_5 \rho_0^{4/3}(x) + b_6 \rho_0^{5/3}(x)] \end{aligned} \quad (44)$$

with $b_1 = -741.28$, $b_2 = 1179.89$, $b_3 = -467.54$, $b_4 = 148.26$, $b_5 = 372.84$, and $b_6 = -769.57$. $V_0(x)$ in Eq. (43) corresponds to the energy per nucleon in nuclear matter (in MeV) with the account for the neutron-proton asymmetry. V_C is the Coulomb energy of protons in a "flucton" and V_{CO} is the Coulomb exchange energy. Thus, in the Brueckner EOS [Eq. (44)], the potential symmetry energy turns out to be proportional to δ^2 . Only in the kinetic energy the dependence on δ is more complicated. Substituting $V_0(x)$ in Eq. (29) and taking the second derivative, the symmetry energy $S^{NM}(x)$ of the nuclear matter with density $\rho_0(x)$ (the coefficient a_4 in Eq. (29)) can be obtained:

$$S^{NM}(x) = 41.7 \rho_0^{2/3}(x) + b_4 \rho_0(x) + b_5 \rho_0^{4/3}(x) + b_6 \rho_0^{5/3}(x). \quad (45)$$

The corresponding analytical expressions for the pressure $p_0^{NM}(x)$ and asymmetric compressibility $\Delta K^{NM}(x)$ of such a system in the Brueckner theory have the form:

$$p_0^{NM}(x) = 27.8 \rho_0^{5/3}(x) + b_4 \rho_0^2(x) + \frac{4}{3} b_5 \rho_0^{7/3}(x) + \frac{5}{3} b_6 \rho_0^{8/3}(x) \quad (46)$$

and

$$\Delta K^{NM}(x) = -83.4 \rho_0^{2/3}(x) + 4b_5 \rho_0^{4/3}(x) + 10b_6 \rho_0^{5/3}(x). \quad (47)$$

Under some approximation in the CDFM the symmetry energy, the slope and the curvature for finite nuclei are obtained as infinite superpositions of the corresponding quantities of nuclear matter (with a given density $\rho_0(x)$) weighted by means of the function $|\mathcal{F}(x)|^2$:

$$s = \int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 S^{NM}(x), \quad (48)$$

$$p_0 = \int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 p_0^{NM}(x), \quad (49)$$

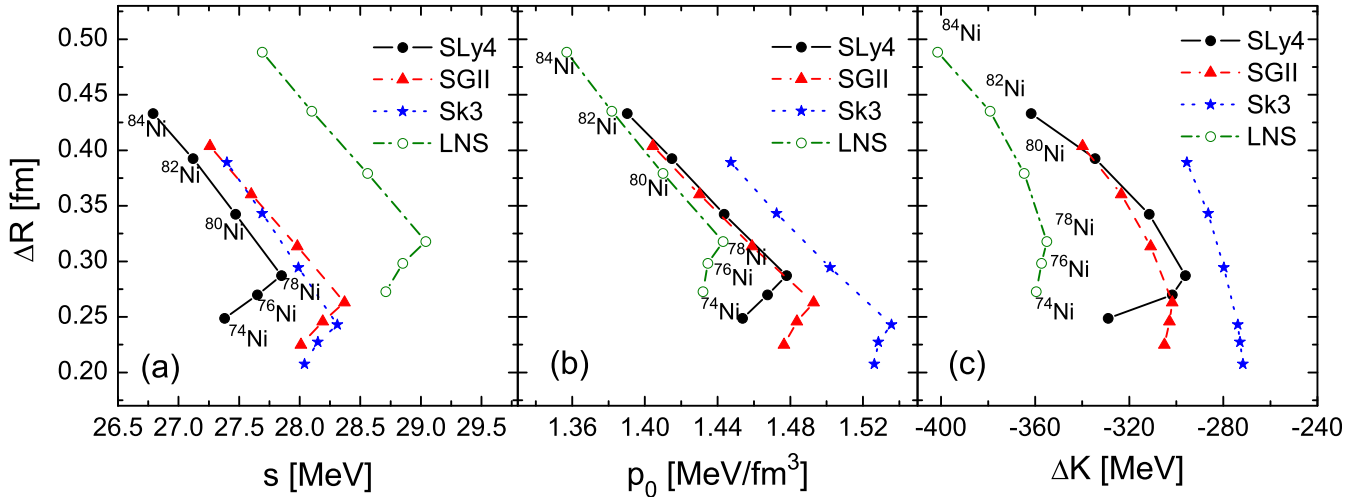


FIGURE 8. HF+BCS neutron skin thicknesses ΔR for Ni isotopes as a function of the symmetry energy s (a), pressure p_0 (b), and asymmetric compressibility ΔK (c) calculated with SLy4, SGII, Sk3, and LNS forces.

$$\Delta K = \int_0^\infty dx |\mathcal{F}(x)|^2 \Delta K^{NM}(x). \quad (50)$$

The symmetry energy, the pressure and the asymmetric compressibility are calculated within the CDFM according to Eqs. (48)-(50) by using the weight functions (41) calculated from the self-consistent HF+BCS densities [33] with different Skyrme force parametrizations.

The main emphasis of our study is to inspect the correlation of the neutron skin thickness $\Delta R = \Delta r_{np} = r_n - r_p$ of nuclei in a given isotopic chain with the s , p_0 and ΔK parameters extracted from the density dependence of the symmetry energy around the saturation density. We show first in Fig. 8 the results for Ni isotopes. It is seen from Fig. 8(a) that there exists an approximate linear correlation between ΔR and s for the even-even Ni isotopes with $A=74-84$. We observe a smooth growth of the symmetry energy till the double-magic nucleus ⁷⁸Ni ($N=50$) and then a linear decrease of s while the neutron skin thickness of the isotopes increases. This behavior is valid for all Skyrme parametrizations used in the calculations, in particular, the average slope of ΔR for various forces is almost the same. The LNS force yields larger values of s comparing to the other three Skyrme interactions. In this case the small deviation can be attributed to the fact that the LNS force has not been fitted to finite nuclei and therefore, one cannot expect a good quantitative description at the same level as purely phenomenological Skyrme forces. As a consequence, the neutron skin thickness calculated with LNS force has a larger size with respect to the other three forces whose results for ΔR are comparable with each other.

The analysis of the correlation between the neutron skin thickness and some macroscopic nuclear matter properties in finite nuclei is continued by showing the results for a chain of Sn isotopes. This is done in Fig. 9, where the results obtained with SLy4, SGII, Sk3, and LNS Skyrme forces are presented for isotopes with $A=124-152$. Similarly to the case of Ni isotopes with transition at specific shell closure, we observe a smooth growth of the symmetry energy till the double-magic nucleus ¹³²Sn ($N=82$) and then an almost linear decrease of s while the neutron skin thickness of the isotopes increases. In Ref. [29] we have studied a formation of a neutron skin in tin isotopes with smaller A where very poor experimental information is available. For instance, a large uncertainty is shown to exist experimentally in the neutron skin thickness of ¹²⁴Sn, i.e., its value varies from 0.1 to 0.3 fm depending on the experimental method. Our theoretical prediction $\Delta R=0.17$ fm for this nucleus is found to be within the above experimental band. A similar approximate linear correlation between ΔR and p_0 for Sn isotopes is also shown in Fig. 9(b). The asymmetric compressibility ΔK given in Fig. 9(c) is less correlated than p_0 with ΔR within the Sn isotopic chains.

An illustration of a possible correlation of the neutron-skin thickness ΔR with the s and p_0 parameters extracted from the density dependence of the symmetry energy around the saturation density for the Kr isotopic chain is given in Fig. 10. It can be seen from Fig. 10 that there exists an approximate linear correlation between ΔR and s for the even-even Kr isotopes with $A=82-96$. Similarly to the behavior of ΔR vs s dependence for the cases of Ni and Sn isotopes shown in Figs. 8 and 9, respectively, we observe a smooth growth of the symmetry energy up to the semi-magic nucleus ⁸⁶Kr ($N=50$) and then a linear decrease of s while the neutron-skin thickness of the isotopes increases. This linear tendency expressed for Kr isotopes with $A > 86$ is similar for the cases of both oblate and prolate deformed shapes. We note that all Skyrme parametrizations used in the calculations reveal similar behavior; in particular, the average slope of ΔR for various forces is almost the same. In addition, one can see from Fig. 10 a stronger deviation between the results for oblate and prolate shape of Kr isotopes in the case of SGII parametrization when displaying the correlation between ΔR and s . This is valid also for the correlation between ΔR and p_0 , where more distinguishable results for both types of deformation are present. The neutron skin thickness ΔR for Kr isotopes correlates with p_0 almost linearly, as in the symmetry-energy

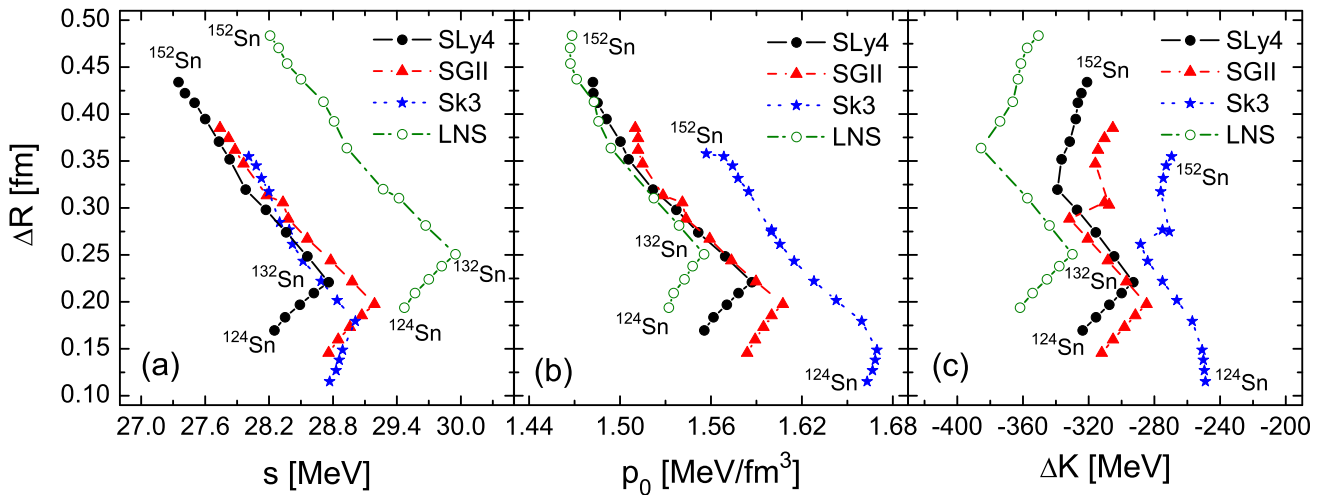


FIGURE 9. Same as in Fig. 8, but for Sn isotopes.

case, with an inflexion point transition at the semi-magic ^{86}Kr nucleus. In addition, one can see also from Fig. 10 that the calculated values for p_0 are smaller in the case of LNS and SLy4 forces than for the other two Skyrme parameter sets. In general, we would like to note that the behavior of deformed Kr isotopes shown in Fig. 10 is comparable with the one found for the spherical Ni and Sn isotopes having a magic proton number. The small differences just indicate that stability patterns are less regular within isotopic chains with a non-magic proton number.

As a general discussion of the results shown in Figures 8, 9, and 10 we would like to note that the growth of the symmetry energy with the increase of the mass number for a given isotopic chain up to the double-magic nuclei followed by its decrease is related to the fact that, in particular, for a stiff symmetry energy, it is favorable to push the excess neutrons to the surface where the symmetry energy is small. In other words, the strong correlation of the neutron-skin thickness of heavy nuclei with the density dependence of the symmetry energy is a result of the dynamical competition between the surface tension and the difference between the symmetry energy at the center and surface of the nucleus.

The theoretical neutron skin thickness ΔR of Pb nuclei ($A=202-214$) against the parameters of interest, s , p_0 , and ΔK , is illustrated in Fig. 11. All predicted correlations manifest an almost linear dependence and no pronounced kink at ^{208}Pb is observed. Similarly to all isotopes presented in this study, the LNS force produces larger symmetry energies s than the other three forces also for Pb nuclei with values exceeding 30 MeV. Another peculiarity of the results obtained with LNS is the almost constant ΔK observed in Fig. 11a.

Further attention deserves the value of the neutron skin thickness in ^{208}Pb , whose determination has motivated recent experiments. The model-independent measurement of parity-violating asymmetry (which is sensitive to the neutron distribution) in the elastic scattering of polarized electrons from ^{208}Pb at JLAB within the PREX Collaboration [51, 52] has provided the first electroweak observation of $\Delta R = 0.33^{+0.16}_{-0.18}$ fm in ^{208}Pb . Obviously, future precise measurements are needed to reduce the quoted uncertainties of ΔR . The distorted wave electron scattering calculations for ^{208}Pb [55] extracted a result for the neutron skin thickness which agrees with that reported in the experimental paper [52]. The value of ΔR for ^{208}Pb (0.1452 fm) deduced from the present HF+BCS calculations with SLy4 force agrees with the recent experimentally extracted skin thickness ($0.156^{+0.025}_{-0.021}$ fm) using its correlation with the dipole polarizability [53]. However, this experimental value was derived by means of covariance analysis based on one Skyrme functional (SV-min). In this respect, a systematic study with a variety of EDFs as well as experimental tests in other nuclei would be important because the correlation between polarizability, neutron skin thickness, and symmetry energy is model-dependent (see, for example, Fig. 1 of Ref. [57]). In addition, our theoretically obtained value of ΔR for ^{208}Pb agrees well with the value 0.18 ± 0.027 fm from Ref. [62]. It is lower than the one obtained in Refs. [25] and [28] with the same Skyrme force, but is in agreement with the values calculated with self-consistent densities of several nuclear mean-field models (see Table I in Ref. [63]). The p_0 and ΔK values for ^{208}Pb are in a good agreement with those from Ref. [25].

Following the analysis within the CDFM approach [30], we give (e.g., in Ref. [31]) more detailed study of the weight function $|\mathcal{F}(x)|^2$ (that is related to the density and thus, to the structural peculiarities) to understand the kinks observed in the relationships between ΔR and s , as well as ΔR and p_0 . The latter were shown to exist [30] in double-magic nuclei in the cases of Ni (at ^{78}Ni) and Sn (at ^{132}Sn) isotopic chains. As one can see in Fig. 10 of the present work, they exist also in the considered cases of Kr (at ^{86}Kr) isotopes. In contrast, such a kink does not exist in the case of Pb isotopic chain (at ^{208}Pb , particularly). Here we would like only to analyze the quantity

$$\Delta s_{\pm} = \frac{s_{A \pm 2} - s_A}{s_A} \quad (51)$$

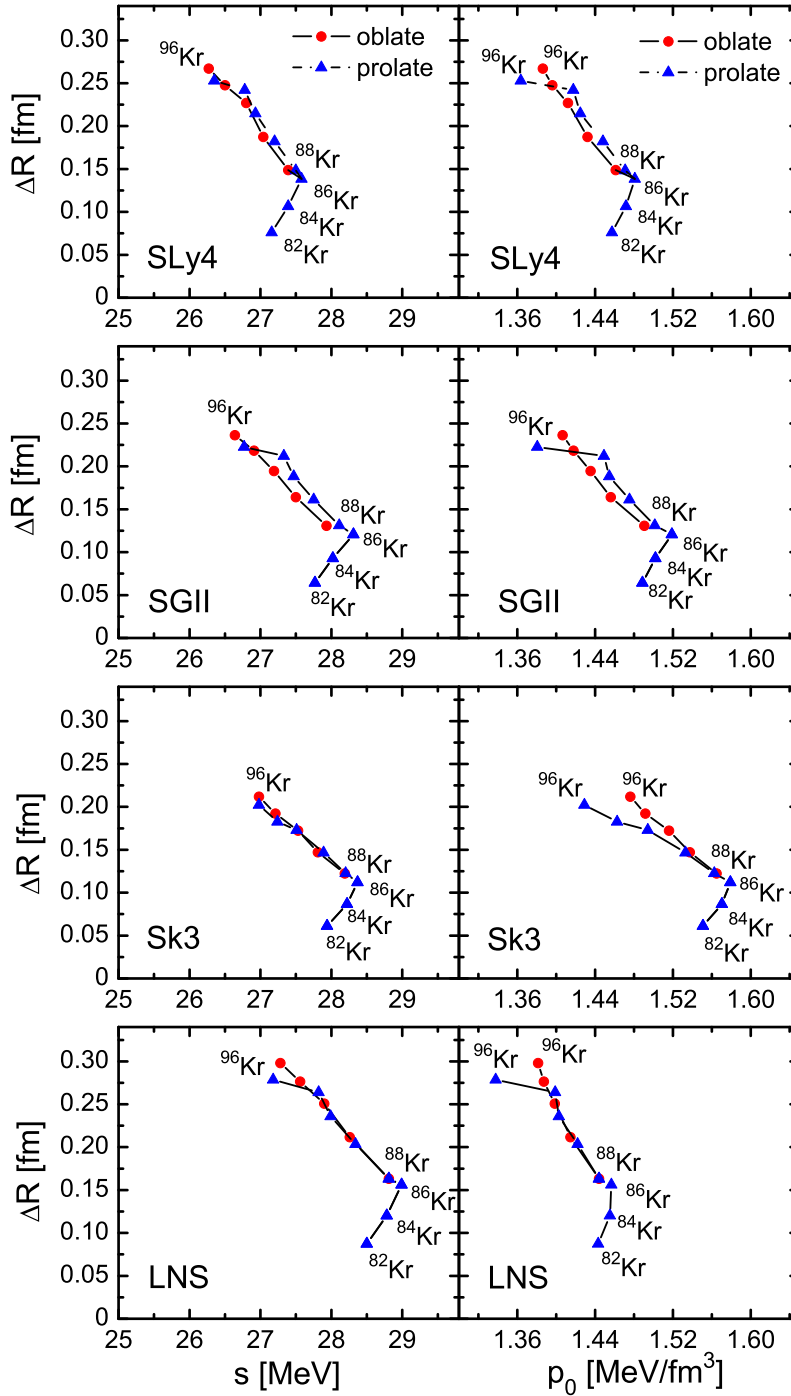


FIGURE 10. HF+BCS neutron skin thicknesses ΔR for Kr isotopes as a function of the symmetry energy s and the pressure p_0 calculated with SLy4, SGII, Sk3, and LNS forces and for oblate and prolate shapes. The results for oblate and prolate shape for $A = 82, 84$ isotopes are indistinguishable.

that is a direct measure of the relative deviation of the symmetry energy with respect to the double-magic nuclei taking them as reference nuclei in each of the chains, where the kinks are expected. The values of Δs_+ and Δs_- are listed in Table 1, where the two numbers for each isotopic chain correspond to the range of integration Δx that contains the peak of $|\mathcal{F}(x)|^2$ [31]. One can see first from this Table that the absolute values of Δs_+ and Δs_- for Pb isotopes are comparable with each other, which is not the case for the two other isotopic chains. Second, and very important is that the Δs_+ value turns out to be negative and Δs_- value to be positive for Pb isotopes at the range of integration Δx , and this is the main difference regarding to the corresponding values (both are negative) in the Ni and Sn chains.

These differences can be attributed to the profiles of the density distributions, particularly in the surface region. Their monopole components $\rho_0(R)$ (coming from the density multipole expansion) are given in Fig. 12, where curves for five Ni, Sn, Pb isotopes around double-magic ^{78}Ni , ^{132}Sn , and ^{208}Pb nuclei are presented in panels (a), (b), and (c),

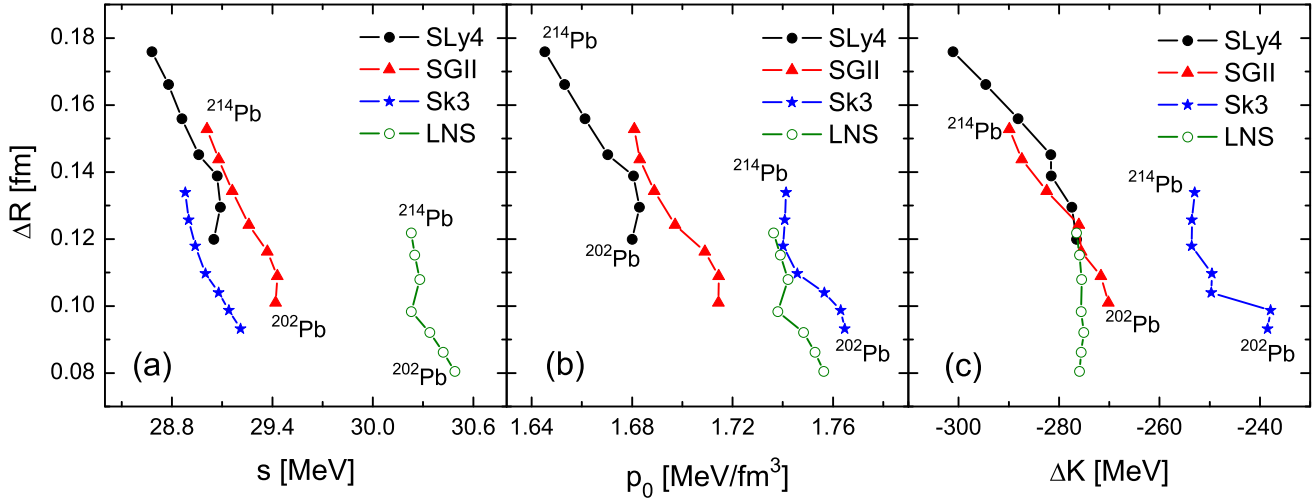


FIGURE 11. HF+BCS neutron skin thicknesses ΔR for Pb isotopes as a function of the symmetry energy s (a), pressure p_0 (b), and asymmetric compressibility ΔK (c) calculated with SLy4, SGII, Sk3, and LNS force.

TABLE 1. Relative deviation values of the symmetry energy Δs_+ and Δs_- [Eq. (51)] for the range of integration Δx in Eq. (48) and for Ni, Sn, and Pb isotopes.

	Ni	Sn	Pb
Δs_+	-0.0137	-0.0070	-0.0035
Δs_-	-0.0072	-0.0049	0.0038

respectively. One can see from Fig. 12 the same trend in the tails of the three isotopic chains, which are ordered according to the mass number A , being higher for heavier isotopes to produce larger radii. On the other hand the behavior in the top part of the surface region, shown in the inset of the panels, is different. In the case of Ni and Sn isotopes in panels (a) and (b), one observes that the double-magic nuclei have the largest density with all the neighboring isotopes lying below. In the case of Pb isotopes in panel (c), the density increases from heavier to lighter isotopes with the double-magic nucleus in between. In Pb isotopes, this ordering is opposite in the tail. As a result of this, the slope of the density in Pb isotopes, and therefore $|\mathcal{F}(x)|^2$, decreases with the number of neutrons continuously and no kink is present in the symmetry energy. On the other hand, in the case of Ni and Sn isotopes, the slope of the density is larger for the double-magic isotopes generating a kink in the symmetry energy.

SUMMARY

In the present work we review results of our studies on some important properties of neutron-rich exotic nuclei mainly related with the nuclear surface and characterized by a skin emergence and quantities coming from the density dependence of the nuclear symmetry energy.

For a first time the various definitions which have been previously proposed to determine the neutron skin thickness, involving both matter radii and tails of nuclear densities, have been compared within a deformed Skyrme HF+BCS model. Three Skyrme parametrizations have been involved in the calculations: SGII, Sk3 and SLy4. Most of the results shown in the paper are obtained with SLy4 force, but the other Skyrme interactions produce similar results. We found that all definitions of the neutron skin predict to a different extent the existence of a skin in nuclei far from the stability line. Particularly, a pronounced neutron skin can be attributed to heavier isotopes of the three chains considered, namely with $A > 132$ for Sn, $A > 74$ for Ni, and $A > 96$ for Kr isotopes. We also found that for a given isotopic chain the increase of the skin with the neutron number in the neutron-rich nuclei exhibits a rather constant slope, which is different depending on the definition of nuclear skin. More significant neutron skin is obtained when analyzing its formation by means of definition from Ref. [13] (called criterion (a)) or using an alternative one (called criterion (b)). In this case we get an absolute size of the skin larger than 0.4 fm and almost reaching 1 fm for the heaviest isotopes (in the case of criterion (a)). At the same time, the neutron skin determined by the difference between neutron and proton radii using diffraction parameters defined in the Helm model shows a more smooth gradual increase with the neutron excess and it is in size of around 0.3–0.4 fm.

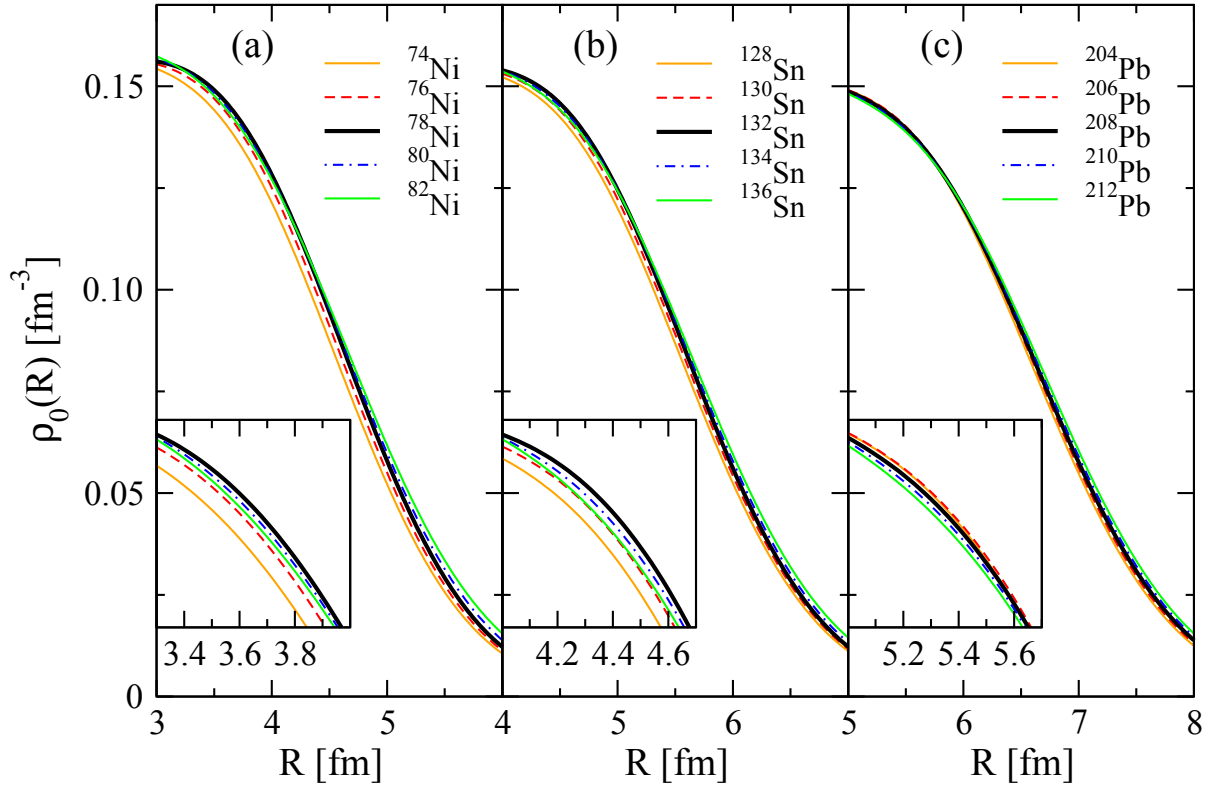


FIGURE 12. HF+BCS total densities in the surface region for five Ni ($A=74-82$) isotopes (a), five Sn ($A=128-136$) isotopes (b), and five Pb ($A=204-212$) isotopes (c) around double-magic ^{78}Ni , ^{132}Sn , and ^{208}Pb nuclei, respectively, calculated with SLy4 force.

We also show on the example of the neutron-deficient Ni isotopes the possibility to find a proton skin in a similar way to the neutron skin. Although the analysis, which was performed in our paper for this case, uses an alternative criterion to that applied in [13], it indicates a situation close to proton skin formation in Ni isotopes very close to the proton drip line. However, the search for the existence of proton skin could be explored in the most proton-rich nuclei approaching the proton drip lines of lighter nuclei, where $Z > N$.

In the present work the effects of deformation on the skin formation are studied in Kr isotopes which are well deformed nuclei. Taking as an example ^{98}Kr and ^{100}Kr isotopes, we found that the profiles of the proton and neutron densities, as well as the spatial extensions change with the direction in both oblate and prolate shapes. At the same time, the neutron skin thickness remains almost equal along the different directions perpendicular to the surface. We found out a very weak dependence of the neutron skin formation on the character of deformation.

A theoretical approach to the nuclear many-body problem combining the deformed HF+BCS method with Skyrme-type density-dependent effective interactions and the CDFM has been used to study nuclear properties of finite nuclei. For this purpose, we examined three chains of spherical neutron-rich Ni, Sn, and Pb isotopes and two chains of deformed neutron-rich Kr and Sm isotopes, most of them being far from the stability line and representing an interest for future measurements with radioactive exotic beams. In addition to the three Skyrme parametrizations already discussed and used one more LNS Skyrme force has been involved in the calculations.

For a first time, we have demonstrated the capability of CDFM to be applied as an alternative way to make a transition from the properties of nuclear matter to the properties of finite nuclei investigating the nuclear symmetry energy s , the neutron pressure p_0 and the asymmetric compressibility ΔK in finite nuclei. This has been carried out on the base of the Brueckner energy-density functional for infinite nuclear matter. One of the advantages of the CDFM is the possibility to obtain transparent relations for the intrinsic EOS quantities analytically by means of a convenient approach to the weight function.

We have found that there exists an approximate linear correlation between the neutron skin thickness of even-even nuclei from the Ni ($A=74-84$), Sn ($A=124-152$), and Pb ($A=202-214$) isotopic chains and their nuclear symmetry energies. Comparing with the spherical case, we note that the linear correlation observed in the Kr ($A=82-96$) and Sm ($A=140-156$) isotopes is not smooth enough due to their different equilibrium shapes, as well as to the transition regions between them. As known, the latter are difficult to be interpreted as they exhibit a complicated interplay of competing degrees of freedom. For all classes of the considered nuclei except for the Pb isotopes an inflection point transition at specific shell closure, in particular at double-magic ^{78}Ni and ^{132}Sn nuclei and semi-magic ^{86}Kr and ^{144}Sm ones, appears for these correlations. The increase of the symmetry energy with the increase of A for a given isotopic chain until the double-magic

nuclei followed by its decrease confirms the physical interpretation given in Ref. [64], where this fact is shown to be a result from the moving of the extra neutrons to the surface thus increasing the surface tension but reducing the symmetry energy. In general, the neutron-rich skin of a heavy nucleus emerges from a dynamic competition between the surface tension and the difference between the symmetry energy at the saturation density and at a lower surface density [64].

We have analyzed in detail the existence of kinks on the example of the Ni and Sn isotopic chains and the lack of such a kink for the Pb isotopic chain. From the studies in Refs. [30, 31] and the present analysis the kinks displayed by the Ni and Sn can be understood as consequences of particular differences in the structure of these nuclei and the resulting densities and weight functions.

Concluding, we would like to note that the used microscopic theoretical methods are capable to predict the nuclear skin in exotic nuclei, as well as important quantities in finite nuclei and their relation to surface properties of these nuclei. The capability of the present methods can be further demonstrated by taking into consideration Skyrme-type and relativistic nuclear energy-density functionals. More definite conclusions on the emergence of nuclear skin can be drawn on the basis of studies of proton and neutron form factors and the related densities. Theoretical predictions for these quantities were given, e.g., in our work [50] that serve as a ground for upcoming experiments using colliding electrons with exotic nuclei in storage rings (see, e.g., Ref. [65]).

ACKNOWLEDGMENTS

E.M.G. and P.S. acknowledge support from MINECO (Spain) under Contracts No. FIS2011–23565 and No. FPA2010–17142.

REFERENCES

1. L. Ray *et al.*, Phys. Rev. C **19**, 1855 (1979).
2. G. W. Hoffmann *et al.*, Phys. Rev. Lett. **47**, 1436 (1981).
3. A. Trzcinska *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 082501 (2001).
4. T. W. Donnelly *et al.*, Nucl. Phys. **A503**, 589 (1989).
5. C. J. Horowitz *et al.*, Phys. Rev. C **47**, 826 (1993).
6. D. Vretenar, P. Finelli, A. Ventura, G. A. Lalazissis, and P. Ring, Phys. Rev. C **61**, 064307 (2000).
7. A. Krasznahorkay *et al.*, Nucl. Phys. **A567**, 521 (1994).
8. A. Krasznahorkay *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3216 (1999).
9. A. Krasznahorkay *et al.*, Nucl. Phys. **A731**, 224 (2004).
10. J. Libert, B. Roussiere, and J. Sauvage, Nucl. Phys. **A786**, 47 (2007).
11. G. A. Lalazissis, S. Raman, and P. Ring, At. Data Nucl. Data Tables **71**, 1 (1999).
12. Z. Ren, W. Mittig, B. Chen, and Z. Ma, Phys. Rev. C **52**, R20 (1995).
13. N. Fukunishi, T. Otsuka, and I. Tanihata, Phys. Rev. C **48**, 1648 (1993).
14. R. H. Helm, Phys. Rev. **104**, 1466 (1956).
15. J. Friedrich and N. Voegler, Nucl. Phys. **A373**, 192 (1982); J. Friedrich, N. Voegler, and P.G. Reinhard, Nucl. Phys. **A459**, 10 (1986); D. W. L. Sprung, N. Yamanishi, and D. C. Zheng, Nucl. Phys. **A550**, 89 (1992).
16. S. Mizutori, J. Dobaczewski, G. A. Lalazissis, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, Phys. Rev. C **61**, 044326 (2000).
17. B. Alex Brown, Phys. Rev. Lett. **85**, 5296 (2000).
18. S. Typel and B. Alex Brown, Phys. Rev. C **64**, 027302 (2001).
19. J. L. Wood, K. Heyde, W. Nazarewicz, M. Huyse, and P. Van Duppen, Phys. Rep. **215**, 101 (1992); K. Heyde and J. L. Wood, Rev. Mod. Phys. **83**, 1467 (2011).
20. W. D. Myers and W. J. Swiatecki, Nucl. Phys. A **81**, 1 (1966).
21. P. Möller *et al.*, At. Data Nucl. Data Tables **59**, 185 (1995).
22. K. Pomorski and J. Dudek, Phys. Rev. C **67**, 044316 (2003).
23. A. Carbone, G. Colò, A. Bracco, Li-Gang Cao, P. F. Bortignon, F. Camera, and O. Wieland, Phys. Rev. C **81**, 041301(R) (2010).
24. D. Vretenar, T. Nikšić, and P. Ring, Phys. Rev. C **68**, 024310 (2003).
25. Lie-Wen Chen, Che Ming Ko, and Bao-An Li, Phys. Rev. C **72**, 064309 (2005).
26. S. Yoshida and H. Sagawa, Phys. Rev. C **73**, 044320 (2006).
27. C.-H. Lee, T. T. S. Kuo, G. Q. Li, and G. E. Brown, Phys. Rev. C **57**, 3488 (1998).
28. B. K. Agrawal, Phys. Rev. C **81**, 034323 (2010).
29. P. Sarriguren, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, and A. N. Antonov, Phys. Rev. C **76**, 044322 (2007).
30. M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra, Phys. Rev. C **84**, 034316 (2011).
31. M. K. Gaidarov, A. N. Antonov, P. Sarriguren, and E. Moya de Guerra, Phys. Rev. C **85**, 064319 (2012).
32. D. Vautherin, Phys. Rev. C **7**, 296 (1973).
33. E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J. A. Caballero, M. Casas, and D. W. L. Sprung, Nucl. Phys. **A529**, 68 (1991).
34. E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer, Nucl. Phys. **A635**, 231 (1998).
35. N. Van Giai and H. Sagawa, Phys. Lett. **B106**, 379 (1981).
36. M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai, and P. Quentin, Nucl. Phys. **A238**, 29 (1975).
37. L. G. Cao, U. Lombardo, C. W. Shen, and N. Van Giai, Phys. Rev. C **73**, 014313 (2006).
38. F. Le Blanc *et al.*, Eur. Phys. J. A **15**, 49 (2002).
39. F. Le Blanc *et al.*, Phys. Rev. C **72**, 034305 (2005).

40. M. Anselment, K. Bekk, A. Hanser, H. Hoeffgen, G. Meisel, S. Goring, H. Rebel, and G. Schatz, *Phys. Rev. C* **34**, 1052 (1986).
41. C. Piller, C. Gugler, R. Jacot-Guillarmod, L. A. Schaller, L. Schellenberg, H. Schneuwly, G. Fricke, T. Hennemann, and J. Herberz, *Phys. Rev. C* **42**, 182 (1990).
42. B. Nerlo-Pomorska and B. Mach, *At. Data Nucl. Data Tables* **60**, 287 (1995).
43. G. Fricke *et al.*, *At. Data Nucl. Data Tables* **60**, 177 (1995).
44. M. Keim, E. Arnold, W. Borchers, U. Georg, A. Klein, R. Neugart, L. Vermeeren, R. E. Silverans, and P. Lievens, *Nucl. Phys.* **A586**, 219 (1995).
45. K. A. Brueckner, J. R. Buchler, S. Jorna, and R. J. Lombard, *Phys. Rev.* **171**, 1188 (1968).
46. K. A. Brueckner, J. R. Buchler, R. C. Clark, and R. J. Lombard, *Phys. Rev.* **181**, 1543 (1969).
47. A. N. Antonov, V. A. Nikolaev, and I. Zh. Petkov, *Bulg. J. Phys.* **6**, 151 (1979); *Z. Phys. A* **297**, 257 (1980); *ibid* **304**, 239 (1982); *Nuovo Cimento A* **86**, 23 (1985); A. N. Antonov *et al.*, *ibid* **102**, 1701 (1989); A. N. Antonov, D. N. Kadrev, and P. E. Hodgson, *Phys. Rev. C* **50**, 164 (1994).
48. A. N. Antonov, P. E. Hodgson, and I. Zh. Petkov, *Nucleon Momentum and Density Distributions in Nuclei* (Clarendon Press, Oxford, 1988).
49. A. N. Antonov, P. E. Hodgson, and I. Zh. Petkov, *Nucleon Correlations in Nuclei* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1993).
50. A. N. Antonov, D. N. Kadrev, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, J. M. Udias, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya, and G. Z. Krumova, *Phys. Rev. C* **72**, 044307 (2005).
51. <http://hallaweb.jlab.org/parity/prex>.
52. S. Abrahamyan *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 112502 (2012).
53. A. Tamii *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 062502 (2011).
54. O. Moreno, E. Moya de Guerra, P. Sarriguren, and J. M. Udias, *J. Phys. G* **37**, 064019 (2010).
55. C. J. Horowitz *et al.*, *Phys. Rev. C* **85**, 032501(R) (2012).
56. X. Roca-Maza, M. Centelles, X. Viñas, and M. Warda, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 252501 (2011).
57. J. Piekarewicz, B. K. Agrawal, G. Colò, W. Nazarewicz, N. Paar, P.-G. Reinhard, X. Roca-Maza, and D. Vretenar, *Phys. Rev. C* **85**, 041302(R) (2012).
58. A. E. L. Dieperink, Y. Dewulf, D. Van Neck, M. Waroquier, and V. Rodin, *Phys. Rev. C* **68**, 064307 (2003).
59. A. E. L. Dieperink and P. Van Isacker, *Eur. Phys. J. A* **32**, 11 (2007).
60. Lie-Wen Chen, *Phys. Rev. C* **83**, 044308 (2011).
61. J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **108**, 311 (1957).
62. M. B. Tsang *et al.*, *Phys. Rev. C* **86**, 015803 (2012).
63. M. Centelles, X. Roca-Maza, X. Viñas, and M. Warda, *Phys. Rev. C* **82**, 054314 (2010).
64. C. J. Horowitz, E. F. Brown, Y. Kim, W. G. Lynch, R. Michaels, A. Ono, J. Piekarewicz, M. B. Tsang, and H. H. Wolter, arXiv:1401.5839 [nucl-th].
65. A. N. Antonov *et al.*, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.* **A637**, 60 (2011).

PACS: 52.25 Xz, 52.35 Lv.

ENERGETIC CHARACTERISTICS OF THE SURFACE ELECTROMAGNETIC WAVE AT PLASMA-PLASMA INTERFACE IN MAGNETIC FIELD

S.V. Ivko, I.B. Denysenko, N.A. Azarenkov

V.N. Karazin Kharkiv National University

61022 Kharkiv, Ukraine

e-mail: sergey.ivko@vandex.ru

Received January 28, 2014

Energetic characteristics of a surface wave at a plane plasma-plasma interface in an external magnetic field are studied. The dependencies of energy flow density and energy density on wave vector for different magnitudes of external magnetic field are analyzed. The sign of the Poynting vector in each plasma region is investigated. It is shown that the total energy flux of the surface wave is directed along the wave vector. The velocity of energy propagation is found. The equivalence between energy velocity and group velocity of the wave is demonstrated. The results obtained in the paper may be useful for analysis of transmission of electromagnetic waves through two-layer plasma structures in a magnetic field.

KEY WORDS: surface waves, Voigt geometry, Poynting vector, energy velocity, energy density

ЕНЕРГЕТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОВЕРХНЕВОЇ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОЇ ХВИЛІ НА МЕЖІ ПОДІЛУ ПЛАЗМА-ПЛАЗМА В МАГНІТНОМУ ПОЛІ

С.В. Івко, І.Б. Денисенко, М.О. Азаренков

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

61022, Харків, Україна

Вивчаються енергетичні характеристики поверхневої хвилі на плоскій межі плазма-плазма в зовнішньому магнітному полі. Аналізуються залежності густини потоку енергії та густини енергії від хвильового вектора для різних значень зовнішнього магнітного поля. Досліджується знак вектора Пойнтинга в кожній плазмовій області. Показується, що повний потік енергії поверхневої хвилі спрямований вздовж хвильового вектора. Знайдено швидкість поширення енергії. Продемонстровано рівність між енергетичною та груповою швидкістю хвилі. Результати, що були отримані в статті, можуть бути використані для аналізу проходження електромагнітної хвилі крізь двошарову плазмову структуру в магнітному полі.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: поверхневі хвилі, геометрія Фойгта, вектор Пойнтинга, енергетична швидкість, густина енергії

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА ГРАНИЦЕ ПЛАЗМА-ПЛАЗМА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

С.В. Ивко, И.Б. Денисенко, Н.А. Азаренков

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

61022, Харьков, Украина

Изучаются энергетические характеристики поверхностной волны на плоской границе плазма-плазма во внешнем магнитном поле. Анализируются зависимости плотности потока энергии и плотности энергии от волнового вектора для разных значений внешнего магнитного поля. Исследуется знак вектора Пойнтинга в каждой плазменной области. Показывается, что полный поток энергии поверхностной волны направлен вдоль волнового вектора. Найдена скорость распространения энергии. Продемонстрировано равенство между энергетической и групповой скоростью волны. Результаты, полученные в статье, могут быть использованы для анализа прохождения электромагнитной волны через двухслойную плазменную структуру в магнитном поле.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: поверхностные волны, геометрия Фойгта, вектор Пойнтинга, энергетическая скорость, плотность энергии

Propagation of electromagnetic waves in plasma has been extensively studied in various contexts for many years [1–3]. Researchers are still interested in the interaction of the electromagnetic radiation with overdense plasma. Transmission and absorption of electromagnetic waves that propagate through layered plasma structures, in particular, are studied due to practical applications. The supersonic aircrafts are surrounded by the layer of dense plasma, created by the heat from the compression of the atmosphere. The plasma layer is not transparent to radio waves that causes radio communications blackout. Different solutions [4,5] are proposed to this problem. Effective absorption of electromagnetic energy is important in plasma generation and heating. Enhanced absorption was observed in plasmas with steep electron density profiles. The increased absorption was explained by surface wave excitation [6,7]. Another way to increase absorption of the incident wave is to place subwavelength diffraction grating in front of plasma [8].

The effect of the transmission assisted by the surface waves occurs also in plasma-like media such as metals in optical range. It was shown both experimentally and theoretically, that three-layer structure composed of metal sandwiched between two layers of dielectric is absolutely transparent for incident *p*-polarized electromagnetic wave with certain wave vector and frequency [9]. Lately it was noticed that similar effect can be achieved by adding only one layer of dielectric [10]. One more way to achieve transparency for metallic film is to perforate it with a periodic array of subwavelength-sized holes [11]. Perforation is needed to transform incident propagating wave into non-propagating that

couples with surface mode at vacuum-metal interface. Resonant nature of a transparency in that type of structures can be used to build various kinds of tunable filters and spatial and spectral multiplexors [12,13].

The conditions of total transparency for two- and three-layer structures were studied in [14]. For two-layer structure it was found that the condition for total transparency coincides with dispersion relation for surface waves at the interface separating layers. The method of finding resonant conditions for multilayer structures with arbitrary number of layers was proposed in [15]. The role of dissipation effects in transmission through the structure composed of two layers of warm plasma was studied in [16].

Propagation of energy in case of total transmission was also considered. It was demonstrated that finite energy flux in direction perpendicular to the interface is possible if width of the layers is finite and there is a finite phase shift between the amplitudes of the growing and decaying part of the evanescent wave [14,16]. In [17] tunneling time and velocity of electromagnetic wave propagating through the barrier was studied. It was compared two velocities of wave propagation: energy velocity and group delay velocity that are equal only in case of total transmission.

In our work [18] we studied the influence of external magnetic field on transparency of *p*-polarized electromagnetic wave through two-layer plasma structure. We found condition for absolute transparency and showed that it coincides with dispersion relation for surface waves only if layers are sufficiently thick. Later [19] we investigated the influence of inhomogeneity of one of the layers on wave transmission.

In this paper we study energetic properties of the electromagnetic wave propagating in a two-layer structure in external magnetic field. We consider infinitely thick layers because resonance condition in this case has simple form. The normal component of the time-averaged energy flux turns to zero but we still can obtain information about the tangential component that gives us approximation for the case of layers of finite thickness. We derive and analyze expressions for group velocity, time-averaged Poynting vector and energy density. The special focus is given to the direction of energy propagation.

MAIN EQUATIONS

Consider an electromagnetic surface wave (SW) propagating at a plane interface between two semi-infinite plasma regions. It is assumed that plasma in each region is uniform, cold, collisionless and consists of electrons and ions. The wave frequency ω is assumed to be larger than the ion plasma frequency ω_{pi} , therefore, the effect of ions on the wave may be neglected. The less dense plasma with electron plasma frequency ω_{p1} occupies the region $x < 0$, while the more dense plasma with electron plasma frequency $\omega_{p2} (> \omega_{p1})$ is located at $x > 0$. The plasma system is immersed in an external magnetic field \mathbf{H}_0 directed along *z*-axis parallel to the plasma-plasma interface.

We assume the surface wave propagates in *y*-direction along the interface perpendicularly to the magnetic field. The wave is assumed to be *p*-polarized, and it is characterized by the wave vector \vec{k}_y directed along *y*-axis. The SW amplitude decays from the boundary $x = 0$. The electromagnetic field of the surface wave has the following components

$$\mathbf{E} = (E_x(x), E_y(x), 0) \exp(ik_y y - i\omega t),$$

$$\mathbf{H} = (0, 0, H_z(x)) \exp(ik_y y - i\omega t).$$

The amplitudes E_x, E_y, H_z can be found from the following expressions [3]

$$E_x(x) = -\frac{1}{k_0(\varepsilon^2 - g^2)} \left(k_y \varepsilon H_z + g \frac{dH_z}{dx} \right), \tag{1}$$

$$E_y(x) = -\frac{i}{k_0(\varepsilon^2 - g^2)} \left(k_y g H_z + \varepsilon \frac{dH_z}{dx} \right), \tag{2}$$

$$\frac{d^2 H_z}{dx^2} + \kappa^2 H_z = 0, \tag{3}$$

where $\kappa = \sqrt{k_y^2 - \varepsilon_V k_0^2}$ is the decay constant and $k_0 = \omega/c$. We introduce the Voigt dielectric permittivity $\varepsilon_V = \varepsilon - g^2/\varepsilon$, where ε and g are the components of the dielectric tensor ε_{ij} for cold magnetoactive plasma neglecting ion motion and particle collisions:

$$\varepsilon \equiv \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_c^2},$$

$$g \equiv -i\varepsilon_{12} = i\varepsilon_{21} = \frac{\omega_c \omega_p^2}{\omega(\omega^2 - \omega_c^2)},$$

where $\omega_c > 0$ is the electron cyclotron frequency. It is assumed that the component of tensor ε_1 for the region $x < 0$ is positive, while the component ε_2 for the region $x > 0$ is negative. Here, indexes 1 and 2 correspond to the less and more dense plasma regions, respectively.

The flux of energy carried by the electromagnetic wave is described by the Poynting vector

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E}\mathbf{H}].$$

The Poynting vector of a *p*-polarized surface wave has two components: S_x and S_y . The time-averaged flux in *x*-

direction is zero $\langle S_x \rangle = 0$. Thus, there is only one non-zero time-averaged component of the energy flux density

$$\langle S_y \rangle = -\frac{c}{8\pi} \operatorname{Re}[E_x H_z^*].$$

Using the expression for S_y and the expressions for wave field components (1) – (3), one gets the time-averaged energy flux density in the first and second plasma regions, correspondingly

$$\langle S_{y1} \rangle = \frac{c}{8\pi k_0} \left(\frac{k_y \varepsilon_1 + \kappa_1 g_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2} \right) |H_{z0}|^2 \exp(2\kappa_1 x), \quad (4)$$

$$\langle S_{y2} \rangle = \frac{c}{8\pi k_0} \left(\frac{k_y \varepsilon_2 - \kappa_2 g_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2} \right) |H_{z0}|^2 \exp(-2\kappa_2 x), \quad (5)$$

where $|H_{z0}|$ is the amplitude of magnetic field of the surface wave at the interface. The energy flux density per unit area of the interface can be obtained by integrating Eqs.(4) - (5) along x -axis:

$$S_{y1} = \int_{-\infty}^0 \langle S_{y1} \rangle dx = \frac{S_0}{\kappa_1} \left(\frac{k_y \varepsilon_1 + \kappa_1 g_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2} \right), \quad (6)$$

$$S_{y2} = \int_0^{+\infty} \langle S_{y2} \rangle dx = \frac{S_0}{\kappa_2} \left(\frac{k_y \varepsilon_2 - \kappa_2 g_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2} \right), \quad (7)$$

where we introduce the unit of energy flux density $S_0 = c|H_{z0}|^2/16\pi k_0$. The total energy flux density carried by the surface wave is a sum of energy fluxes in each media:

$$S = S_{y1} + S_{y2} = S_0 \left(\frac{g_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2} - \frac{g_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2} + k_y \left(\frac{1}{\kappa_1 \varepsilon_{V1}} + \frac{1}{\kappa_2 \varepsilon_{V2}} \right) \right). \quad (8)$$

We can simplify this equation by making use of the SW dispersion equation. The dispersion equation derived by matching tangential electric and magnetic fields of the wave at the interface is:

$$\frac{k_y g_1 + \varepsilon_1 \kappa_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2} - \frac{k_y g_2 - \varepsilon_2 \kappa_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2} = 0. \quad (9)$$

Equation (9) can be rewritten in the following form

$$\frac{g_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2} - \frac{g_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2} = -\frac{1}{k_y} \left(\frac{\kappa_1}{\varepsilon_{V1}} + \frac{\kappa_2}{\varepsilon_{V2}} \right). \quad (10)$$

Combining Eq.(10) with Eq.(8), after some algebraic manipulations one gets the expression for SW time-averaged energy flux density per unit area

$$S = S_0 \frac{k_0^2}{k_y} \left(\frac{1}{\kappa_1} + \frac{1}{\kappa_2} \right). \quad (11)$$

Since $\kappa_1 > 0$ and $\kappa_2 > 0$, the sign of total energy flux density S is determined by the sign of wave vector k_y . Thus, the wave energy propagates in the same direction as the wave phase.

The energy flux density (11) can be expressed through the derivative of the dispersion equation with respect to wave vector k_y .

Using Eqs. (6) and (7), the total energy flux density per unit area can be presented in the different form:

$$S = \frac{|E_{y0}|^2}{16\pi} \omega \left(\frac{1}{\kappa_1} \frac{\hat{E}_{x1}}{\hat{E}_{y1}^2} + \frac{1}{\kappa_2} \frac{\hat{E}_{x2}}{\hat{E}_{y2}^2} \right), \quad (12)$$

where $|E_{y0}| = |E_y(0)|$ is the tangential component of the wave electric field at the interface.

$$\hat{E}_{x1} = \frac{k_y \varepsilon_1 + \kappa_1 g_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2}, \quad \hat{E}_{x2} = \frac{k_y \varepsilon_2 - \kappa_2 g_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2}, \quad \hat{E}_{y1} = \frac{k_y g_1 + \kappa_1 \varepsilon_1}{\varepsilon_1^2 - g_1^2}, \quad \hat{E}_{y2} = \frac{k_y g_2 - \kappa_2 \varepsilon_2}{\varepsilon_2^2 - g_2^2}. \quad (13)$$

Note that

$$\hat{E}_i = \frac{k_0 |E_i(0)|}{|H_{z0}|}, \quad (14)$$

where $E_i(0)$ is the i -th component of electric field at the interface $x = 0$.

Now, the dispersion equation (9) can be presented in the form

$$D = \frac{1}{\hat{E}_{y1}} - \frac{1}{\hat{E}_{y2}} = 0. \quad (15)$$

Taking derivative from D on k_y , one obtains

$$\frac{\partial D}{\partial k_y} = -\frac{1}{\hat{E}_{y1}^2 (\varepsilon_1^2 - g_1^2)} \left(g_1 + \varepsilon_1 \frac{k_y}{\kappa_1} \right) - \frac{1}{\hat{E}_{y2}^2 (\varepsilon_2^2 - g_2^2)} \left(g_2 - \varepsilon_2 \frac{k_y}{\kappa_2} \right) = -\left(\frac{1}{\kappa_1} \frac{\hat{E}_{x1}}{\hat{E}_{y1}^2} + \frac{1}{\kappa_2} \frac{\hat{E}_{x2}}{\hat{E}_{y2}^2} \right).$$

That is exactly up to a sign the expression in parentheses in Eq. (12). Finally, one can write

$$S = -\frac{|E_{y0}|^2}{16\pi} \omega \frac{\partial D}{\partial k_y}. \quad (16)$$

The time-averaged energy density in media with time dispersion can be found from the formula [20]

$$w = \frac{1}{16\pi} \left(\frac{\partial}{\partial \omega} (\omega \epsilon_{ij}) E_i E_j^* + \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega \mu_{ij}) H_i H_j^* \right). \quad (17)$$

Taking into account the form of the tensor of dielectric permittivity and the wave field components, it follows from Eq. (17) that for the waves considered here

$$w = \frac{1}{16\pi} \left(\frac{\partial \omega \epsilon}{\partial \omega} (|E_x|^2 + |E_y|^2) + 2i \frac{\partial \omega g}{\partial \omega} E_x E_y^* + |H_z|^2 \right),$$

where

$$\frac{\partial \omega \epsilon}{\partial \omega} = 1 + \frac{\omega_p^2 (\omega^2 + \omega_c^2)}{(\omega^2 - \omega_c^2)^2},$$

$$\frac{\partial \omega g}{\partial \omega} = -\frac{2\omega \omega_c \omega_p^2}{(\omega^2 - \omega_c^2)^2}.$$

Using Eq. (14), the expressions for time-averaged energy densities per unit area for the first and second plasma areas can be presented in the following form

$$W_1 = \frac{W_0}{2\kappa_1 k_0} \left(k_0^2 + \frac{\partial \omega \epsilon_1}{\partial \omega} (\hat{E}_{x1}^2 + \hat{E}_{y1}^2) - 2 \frac{\partial \omega g_1}{\partial \omega} \hat{E}_{x1} \hat{E}_{y1} \right), \quad (18)$$

$$W_2 = \frac{W_0}{2\kappa_2 k_0} \left(k_0^2 + \frac{\partial \omega \epsilon_2}{\partial \omega} (\hat{E}_{x2}^2 + \hat{E}_{y2}^2) - 2 \frac{\partial \omega g_2}{\partial \omega} \hat{E}_{x2} \hat{E}_{y2} \right), \quad (19)$$

respectively. Here, $W_0 = |H_{z0}|^2 / 16\pi k_0$.

The total energy density of a surface wave ($W = W_1 + W_2$) can be expressed through the frequency derivative of dispersion relation. Unfortunately, the expression for frequency derivative of D in the presence of an external magnetic field is very complicated. Therefore, we consider here only the case of large values of the wave vector $|k_y| \gg k_0 \sqrt{\epsilon_V}$, $|k_y| \gg k_0$. For large k_y and $k_y > 0$, $\kappa_{1,2} \approx k_y$ and expressions (13) can be simplified:

$$\hat{E}_{x1} = \hat{E}_{y1} = \frac{|k_y|}{\epsilon_1 - g_1}, \quad \hat{E}_{x2} = -\hat{E}_{y2} = \frac{|k_y|}{\epsilon_2 + g_2}.$$

Substituting the expressions for normalized field components into Eqs. (18) and (19), one obtains

$$W_1 = \frac{|H_{z0}|^2}{32\pi \kappa_1 k_0^2} \left(k_0^2 + 2\hat{E}_{y1}^2 \left(\frac{\partial \omega \epsilon_1}{\partial \omega} - \frac{\partial \omega g_1}{\partial \omega} \right) \right), \quad (20)$$

$$W_2 = \frac{|H_{z0}|^2}{32\pi \kappa_2 k_0^2} \left(k_0^2 + 2\hat{E}_{y2}^2 \left(\frac{\partial \omega \epsilon_2}{\partial \omega} + \frac{\partial \omega g_2}{\partial \omega} \right) \right). \quad (21)$$

Since $|k_y| \gg k_0$ and $\kappa_{1,2} \approx k_y$, it follows from Eqs. (20) and (21) that

$$W_1 = \frac{|E_{y0}|^2}{16\pi} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\omega \frac{\epsilon_1 - g_1}{|k_y|} \right);$$

$$W_2 = \frac{|E_{y0}|^2}{16\pi} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\omega \frac{\epsilon_2 + g_2}{|k_y|} \right).$$

In this case, dispersion relation (15) can be presented in the following form

$$D = \frac{\epsilon_1 - g_1}{|k_y|} + \frac{\epsilon_2 + g_2}{|k_y|} = 0.$$

From the expressions for D , W_1 and W_2 , it follows that

$$W = W_1 + W_2 = \frac{|E_{y0}|^2}{16\pi} \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega D). \quad (22)$$

Since $\partial_\omega (\omega D) = \omega \partial_\omega D$, dividing (16) by (22), one obtains the expression for velocity of SW energy propagation

$$v_{en} = \frac{S}{W} = -\frac{\frac{\partial D}{\partial k_y}}{\frac{\partial D}{\partial \omega}} = \frac{\partial \omega}{\partial k_y} = v_{gr}. \quad (23)$$

Thus, the SW energy propagates with the group velocity v_{gr} . For arbitrary values of k_y , this result can be obtained numerically if $\mathbf{H}_0 \neq 0$ and analytically when the external magnetic field is absent ($\mathbf{H}_0 = 0$).

ANALYSIS

Now, study the dependence of SW energetic characteristics (the energy flux density, the energy density and the energy propagation velocity) on the wave vector k_y and the external magnetic field. We specify frequency ranges where the surface waves may exist. In the presence of magnetic field, the surface waves propagating in positive direction, i.e. with $k_y > 0$, and the waves propagating in negative direction ($k_y < 0$) have different dispersion. Thus, we have to consider these two cases separately. We narrow down our study to the surface waves with frequencies larger than electron cyclotron frequency ($\omega > \omega_c$), that gives $g_1 > 0$ and $g_2 > 0$. Moreover, it is assumed that $\epsilon_1 > 0$ and $\epsilon_2 < 0$.

Waves propagating in positive direction

Let us start with the surface waves propagating in positive direction. In our previous work [18], we found that the lower frequency limit for the waves is determined by equation $\kappa_1 = 0$ if $\omega_{V1}^+ < \omega_{V2}^-$, and $\kappa_2 = 0$ if $\omega_{V1}^+ > \omega_{V2}^-$. Here, $\omega_{V1}^+ = \frac{1}{2}(\sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_{p1}^2} + \omega_c)$, $\omega_{V2}^- = \frac{1}{2}(\sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_{p2}^2} - \omega_c)$ are the frequencies at which $\epsilon_{V1} = 0$ and $\epsilon_{V2} = 0$ correspondingly. First, consider the case when $\omega_{V1}^+ < \omega_{V2}^-$, that imposes the following condition on the magnitudes of external magnetic field and plasma densities:

$$\omega_c < \frac{\omega_{p2}^2 - \omega_{p1}^2}{\sqrt{2(\omega_{p2}^2 + \omega_{p1}^2)}}$$

In this case, the upper frequency limit ω_{inf} is determined by the following equation [18]

$$g_1 - \epsilon_1 = g_2 + \epsilon_2$$

The frequency corresponding to the low frequency limit ω_0 satisfies the following condition $\omega_{V1}^+ \leq \omega_0$. By comparing the boundaries of the SW existence domain $[\omega_0, \omega_{inf}]$ with ω_{V1}^+ and ω_{V2}^- , we obtained that $\omega_{V1}^+ \leq \omega_0 < \omega_{inf} < \omega_{V2}^-$. In the SW existence domain, $\epsilon_1 > 0$ because $\omega_{H1} < \omega_{V1}^+$ [see Fig.1(a)], thus, the both terms in the numerator of Eq.(6) are positive. And since $|\epsilon_1| > |g_1|$ [see Fig. 1 (b)], the denominator is also positive. As a result, the energy flux in the first plasma layer is directed along $k_y (S_1 > 0)$, while the energy flux in the second layer is directed in opposite direction ($S_2 < 0$), because $\epsilon_2 < 0$ and $|\epsilon_1| > |g_1|$ (see Fig.1). Meantime, the total energy flux is directed along k_y (Eq. (11)) and, therefore, $|S_1| > |S_2|$.

If the wave frequency is close to $\omega_{V1}^+ (\kappa_1 \rightarrow 0)$, the energy flux density and energy density in the low density plasma region are essentially larger than those in the dense plasma region (see Eqs. (11), (20) and (21)). In this case,

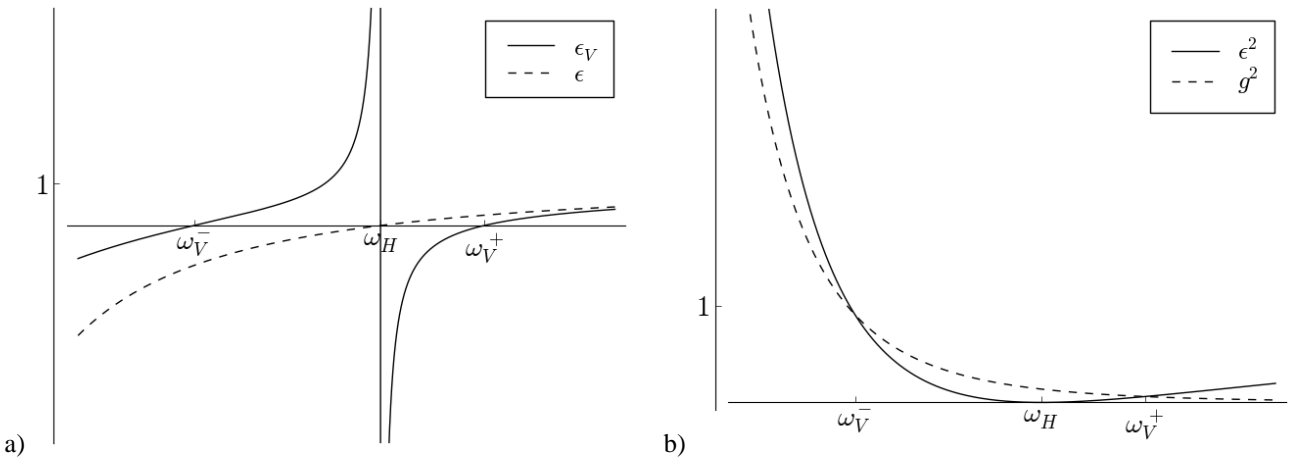


Fig.1. (a) Typical dependences of ϵ and ϵ_V on the wave frequency. (b) Typical dependences of ϵ^2 and g^2 on the wave frequency.

$$\hat{E}_{x1} = \frac{k_y \epsilon_1}{\epsilon_1^2 - g_1^2}, \quad \hat{E}_{y1} = \frac{k_y g_1}{\epsilon_1^2 - g_1^2},$$

and from Eqs. (12) and (18) one obtains

$$S \approx S_1 \approx S_0 \frac{k_y}{\epsilon_{V1} \kappa_1}; \tag{24}$$

$$W \approx W_1 \approx \frac{W_0}{2k_0 \kappa_1} \left(k_0^2 + \frac{k_y^2}{(\epsilon_1^2 - g_1^2)^2} \left(\frac{\partial \omega \epsilon_1}{\partial \omega} (\epsilon_1^2 + g_1^2) - 2 \frac{\partial \omega g_1}{\partial \omega} \epsilon_1 g_1 \right) \right). \tag{25}$$

At the lower frequency boundary, $S \rightarrow \infty$ and $W \rightarrow \infty$ [see Eqs. (24) and (25) and Fig.2], but the energy propagation velocity

$$v_{en} = \frac{S_1}{W_1} = \frac{2c}{\sqrt{\epsilon_{V1}}} \left(2 + \frac{\omega}{\epsilon_{V1}} \left(\frac{\partial \epsilon_1}{\partial \omega} + \frac{g_1^2}{\epsilon_1^2} \frac{\partial \epsilon_1}{\partial \omega} - \frac{2g_1}{\epsilon_1} \frac{\partial g_1}{\partial \omega} \right) \right)^{-1} \tag{26}$$

is finite [see Fig. 2(c)].

Taking derivative of ϵ_{V1} with respect to ω

$$\frac{\partial \epsilon_{V1}}{\partial \omega} = \frac{\partial \epsilon_1}{\partial \omega} + \frac{g_1^2}{\epsilon_1^2} \frac{\partial \epsilon_1}{\partial \omega} - \frac{2g_1}{\epsilon_1} \frac{\partial g_1}{\partial \omega},$$

we can write Eq. (26) in the following form

$$v_{en} = c \left(\sqrt{\epsilon_{V1}} + \frac{\omega}{2\sqrt{\epsilon_{V1}}} \frac{\partial \epsilon_{V1}}{\partial \omega} \right)^{-1}. \tag{27}$$

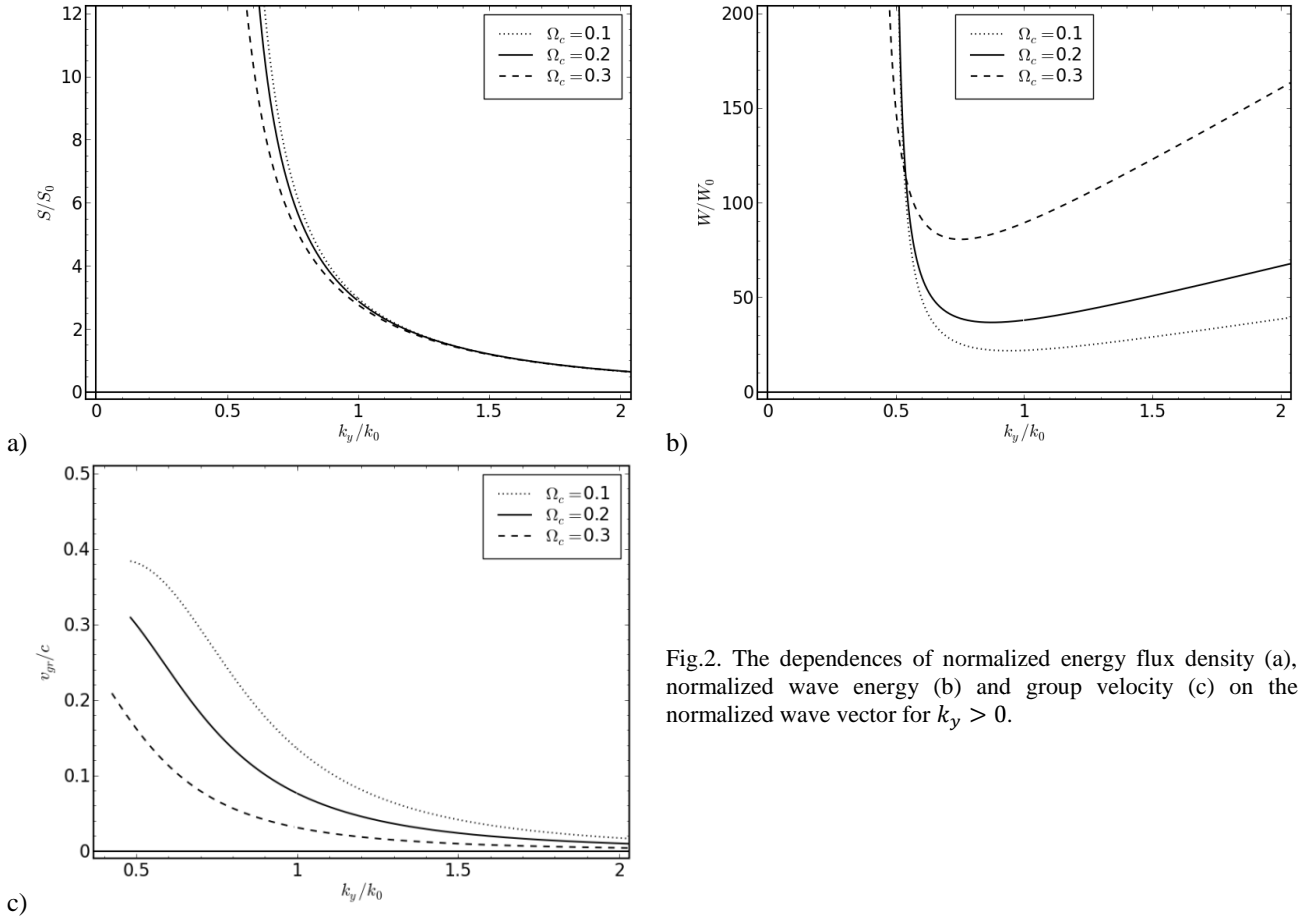


Fig.2. The dependences of normalized energy flux density (a), normalized wave energy (b) and group velocity (c) on the normalized wave vector for $k_y > 0$.

Taking into account that $v_{en} = v_{gr}$, one could get Eq. (27) by differentiating the dispersion equation, having in this limiting case the form

$$D = k_y - \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_{V1}} = 0.$$

Using this expression for D , one obtains the derivatives:

$$\frac{\partial D}{\partial k_y} = 1, \quad \frac{\partial D}{\partial \omega} = -\frac{1}{c} \left(\sqrt{\varepsilon_{V1}} + \frac{\omega}{2\sqrt{\varepsilon_{V1}}} \frac{\partial \varepsilon_{V1}}{\partial \omega} \right).$$

Then, from Eq. (23) and the expressions for derivatives of D , one obtains Eq. (27).

At the upper boundary of the frequency domain that is determined by equation

$$g_1 - \varepsilon_1 = g_2 + \varepsilon_2,$$

the wave vector is large ($k_y \gg k_0$), and, therefore, $\kappa_1 \approx \kappa_2 \approx |k_y|$. Thus, the energy flow densities in the first and second plasma regions are

$$S_1 \approx \frac{S_0}{\varepsilon_1 - g_1}, \quad S_2 \approx \frac{S_0}{\varepsilon_2 + g_2}, \quad \text{and } S_1 = -S_2.$$

Hence, the total energy flow density and energy propagation velocity are vanishing at the upper boundary (see Figs. 2 (a) and 2 (c)). At the boundary, the energy densities in both plasma regions are equal and are going to infinity proportionally to k_y (it follows from the expressions for W_1 and W_2 presented after Eq. (21)):

$$W_1 = \frac{W_0 k_y}{k_0 (\varepsilon_1 - g_1)^2} \frac{\partial \omega (\varepsilon_1 - g_1)}{\partial \omega}, \tag{12}$$

$$W_2 = \frac{W_0 k_y}{k_0 (\varepsilon_2 + g_2)^2} \frac{\partial \omega (\varepsilon_2 + g_2)}{\partial \omega}. \tag{13}$$

In Fig.2, energetic characteristics of the wave for different values of magnetic field are shown. One can see that with the increase of magnetic field the energy flux density decreases, while the energy density increases. As a result, the velocity of energy propagation decreases with growth of external magnetic field.

Waves propagating in negative direction

Consider surface waves propagating in negative direction. The frequency domain for these waves is bounded by the hybrid frequencies: $\omega_{H1} < \omega < \omega_{H2}$. We determine the direction of energy flow in each plasma region. Let us start from the energy flow in the first region S_1 . We divide aforementioned interval in two parts: $\omega_{H1} < \omega < \omega_{V1}^+$ and

$\omega > \omega_{V1}^+$. For the first part $\varepsilon_1^2 < g_1^2$, thus the denominator of Eq.(6) is negative, and the terms in the numerator have opposite signs, because $\varepsilon_1 > 0$ and $k_y < 0$. Therefore, to determine the sign of the expression we need to compare these terms by magnitude. From inequalities $\varepsilon_1^2 < g_1^2$ and $\varepsilon_1 > 0$, it follows that the Voigt dielectric permittivity is negative: $\varepsilon_{V1} = (\varepsilon_1^2 - g_1^2)/\varepsilon_1 < 0$, and thus $\kappa_1 = \sqrt{k_y^2 - \varepsilon_{V1}k_0^2} > |k_y|$. Taking into account that $|\varepsilon_1| < |g_1|$, one comes to the conclusion that $|k_y\varepsilon_1| < |\kappa_1g_1|$, i.e. the numerator of Eq.(6) is positive and the expression as whole is negative. For the frequencies ω larger than ω_{V1}^+ , the following inequalities hold true $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_1^2 > g_1^2$, $\varepsilon_{V1} > 0$, meaning that $\kappa_1 < |k_y|$ and $|k_y\varepsilon_1| > |\kappa_1g_1|$, thus the numerator of Eq. (6) is positive but the denominator is negative. As a result, the sign of Eq. (6) is also negative in the frequency range considered. Therefore, for $k_y < 0$ the energy flow in the first plasma region is directed along the wave vector ($S_1 < 0$).

Determine direction of the Poynting vector in the second plasma region. Since $\omega_c < \omega < \omega_{H2}$, the dielectric permittivity ε_2 is negative and $g_2 > 0$, and for $k_y < 0$ we have $k_y\varepsilon_2 > 0$, meaning that the terms in the numerator of Eq. (7) have different signs. Depending on the magnitude of wave vector k_y , the difference $k_y\varepsilon_2 - \kappa_2g_2$ can be positive or negative. The difference is zero if

$$k_y = k_{S0} = -\frac{g_2}{\sqrt{-\varepsilon_2}}k_0.$$

The difference $k_y\varepsilon_2 - \kappa_2g_2$ is negative for $|k_y| < |k_{S0}|$, and it is positive if $|k_y| > |k_{S0}|$. Substituting $k_y = k_{S0}$ into dispersion equation, we find the corresponding zero frequency

$$\omega_{S0}^2 = \frac{1}{2} \left(\omega_{H1}^2 + \sqrt{\omega_{H1}^4 + 4\omega_c^2(\omega_{p2}^2 - \omega_{p1}^2)} \right) > \omega_{H1}^2.$$

Note that the total energy flow density is always directed along the wave vector (see Eq.(11)). Near the lower frequency limit ($\omega = \omega_{H1}$), where $\varepsilon_1 \rightarrow 0$ and consequently $\kappa_1 \rightarrow \infty$, the expression for total energy flow density may be simplified (see Eq.(11)):

$$S = \frac{S_0k_0^2}{k_y\kappa_2}.$$

As a result, at $\omega = \omega_{H1}$ the total energy flow density is finite [see the region of small wave vectors in Fig. 3 (a)]. Meanwhile, the total energy density goes to infinity (see Fig. 3(b)). This conclusion follows from Eq. (18) if one takes $\kappa_1 \rightarrow \infty$:

$$W \approx W_1 \approx \frac{W_0\kappa_1}{2k_0} \left(\frac{\varepsilon_1^2 + g_1^2}{(\varepsilon_1^2 - g_1^2)^2} \frac{\partial\omega\varepsilon_1}{\partial\omega} + \frac{2\varepsilon_1g_1}{(\varepsilon_1^2 - g_1^2)^2} \frac{\partial\omega g_1}{\partial\omega} \right).$$

Taking into account that at low frequencies $\kappa_1 \approx k_0g_1/\sqrt{\varepsilon_1}$ (because $\varepsilon_1 \rightarrow 0$), one concludes that

$$W \approx \frac{W_0}{2g_1\sqrt{\varepsilon_1}} \frac{\partial\omega\varepsilon_1}{\partial\omega}.$$

Since the total energy density is finite and $W \rightarrow \infty$, one obtains that the energy propagation velocity goes to zero at the low frequency limit [Fig. 3(c)].

At the upper frequency limit determined by equation

$$g_1 + \varepsilon_1 = g_2 - \varepsilon_2,$$

the energy flows in the first and the second plasma regions are equal on absolute magnitude but have different directions:

$$S_1 \approx -\frac{S_0}{\varepsilon_1 + g_1}, \quad S_2 \approx \frac{S_0}{g_2 - \varepsilon_2}.$$

Thus, the total energy flux goes to zero for $k_y^2 \gg k_0^2$ (see Fig. 3(a)). If $k_y \rightarrow \infty$, the total energy density goes to infinity:

$$W_1 = \frac{W_0k_y}{k_0(\varepsilon_1 + g_1)^2} \frac{\partial\omega(\varepsilon_1 + g_1)}{\partial\omega}, \quad W_2 = \frac{W_0k_y}{k_0(\varepsilon_2 - g_2)^2} \frac{\partial\omega(\varepsilon_2 - g_2)}{\partial\omega}.$$

Note that the expressions for W_1 and W_2 are similar to Eqs. (28) and (29), describing the energy densities when the waves propagate in positive direction.

With the growth of magnetic field the energy flux density decreases by magnitude and the energy also decreases (see Fig.3). For higher values of magnetic field the maximum of group velocity decreases and shifts to the larger magnitudes of the wave vector.

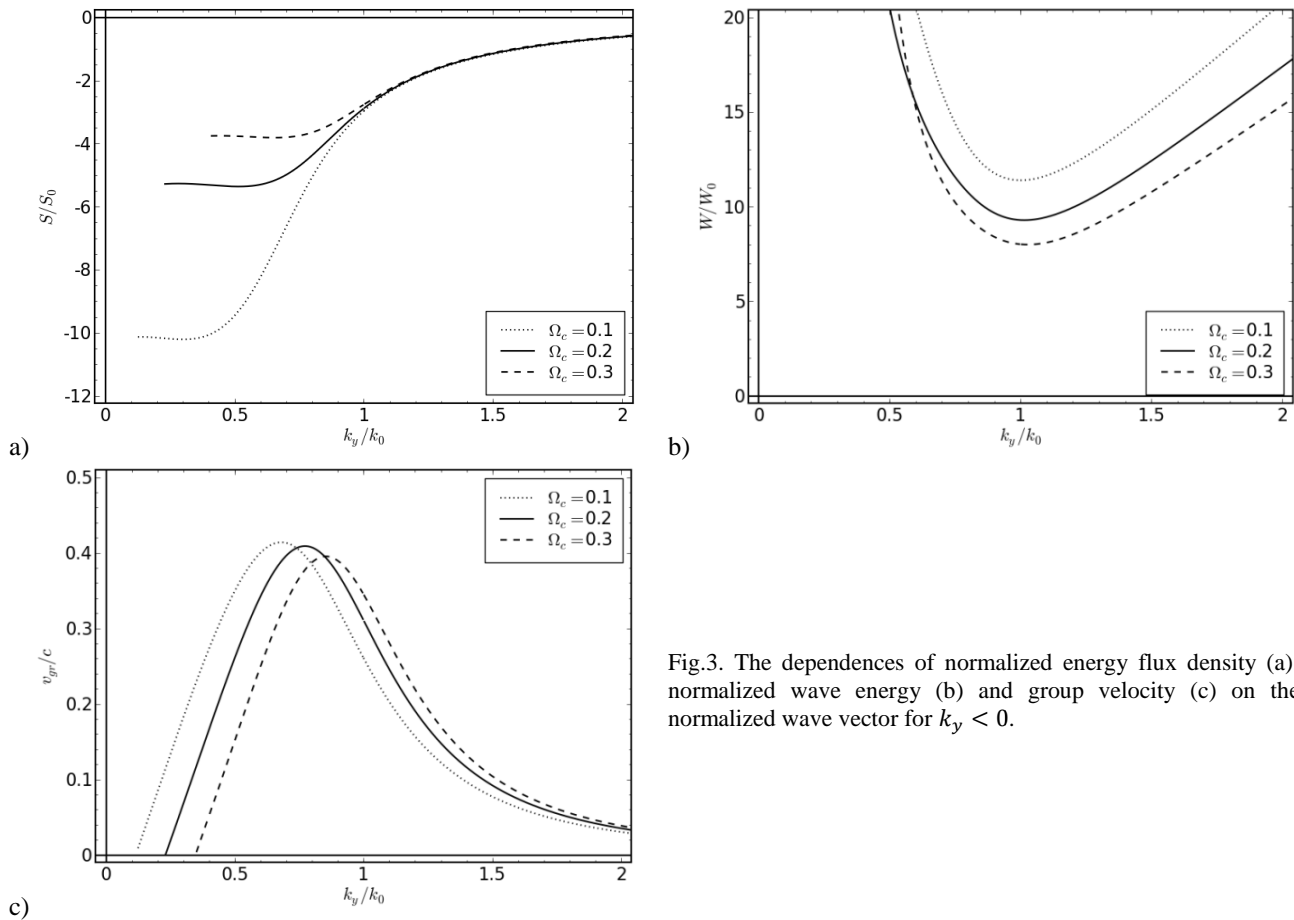


Fig.3. The dependences of normalized energy flux density (a), normalized wave energy (b) and group velocity (c) on the normalized wave vector for $k_y < 0$.

CONCLUSIONS

We have studied the energetic characteristics of the surface waves propagating along the plane plasma-plasma interface immersed in an external magnetic field. The expressions for time-averaged energy flow density and time averaged energy density of the waves in each plasma region have been obtained. We have analyzed the dependency of these characteristics on the wave vector magnitude and direction for different values of magnetic field.

The direction of Poynting vector has been investigated. For the waves with positive k_y , the energy fluxes in the first and the second plasma regions are always opposite in direction. Meanwhile, for the waves with negative wave number, the energy flux in the second plasma region may be directed along the flux in the first region, as well as in opposite direction. The wave vector and corresponding wave frequency for the case when the flux in the second region is absent have been found. Thus, for a certain range of wave vectors, the fluxes in both plasma regions are in same direction, what is impossible in the absence of an external magnetic field. Meantime, the total time-averaged energy flux of the waves is always directed along the wave vector.

The expression for the velocity of wave energy propagation has been obtained. We have showed that the velocity of SW energy propagation is equal to the group velocity of the wave. We have studied the dependency of group velocity on the wave vector and magnitude of external magnetic field. It has been found that the SW energy flux and energy velocity are vanishing when the wave vector is large.

At the lower frequency limit, the energy propagation velocity depends on direction of wave vector. If the wave vector is directed in negative direction, the group velocity goes to zero, while for positive k_y it reaches a finite value. With an increase of the external magnetic field the maximum of the group velocity decreases.

REFERENCES

1. Ginzburg, V.L. Propagation of Electromagnetic Waves in Plasma / V.L. Ginzburg. Gordon & Breach Science Publishers Ltd, 1961. – 846 p.
2. Stix, T.H. The theory of plasma waves / T.H. Stix. McGraw-Hill, 1962. – 306 p.
3. Kondratenko, A.N. Surface and bulk waves in a bounded plasma / A.N. Kondratenko. Moscow Energoizdat, 1985. – 208 p.
4. Stenzel, R.L. A new method for removing the blackout problem on reentry vehicles / R.L. Stenzel, J.M. Urrutia // Journal of Applied Physics. – 2013. – Vol. 113, № 10. – P. 103303.
5. Sternberg, N. Resonant Transmission through Dense Plasmas via Amplification of Evanescent Mode / N. Sternberg, A.I. Smolyakov // PIER Online. – 2009. – Vol. 5, № 8. – P. 781–785.

6. Kindel, J. Surface-Wave Absorption / J. Kindel, K. Lee, E. Lindman // *Physical Review Letters*. – 1975. – Vol. 34, № 3. – P. 134–138.
7. Aliev, Y. Total absorption of electromagnetic radiation in a dense inhomogeneous plasma / Y. Aliev et al. // *Physical Review A*. – 1977. – Vol. 15, № 5. – P. 2120–2122.
8. Bliokh, Y. Total Absorption of an Electromagnetic Wave by an Overdense Plasma / Y. Bliokh, J. Felsteiner, Y. Slutsker // *Physical Review Letters*. – 2005. – Vol. 95, № 16.
9. Dragila, R. High Transparency of Classically Opaque Metallic Films / R. Dragila, B. Luther-Davies, S. Vukovic // *Physical Review Letters*. – 1985. – Vol. 55, № 10. – P. 1117–1120.
10. Ramazashvili, R.R. Total transmission of electromagnetic waves through slabs of plasmas and plasma-like media upon the excitation of surface waves / R.R. Ramazashvili // *JETP Letters*. – 1986. – Vol. 43, № 5. – P. 298–301.
11. Ebbesen, T.W. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays / T.W. Ebbesen et al. // *Nature*. – 1998. – Vol. 391, № 6668. – P. 667–669.
12. Sambles, R. Photonics: More than transparent / R. Sambles // *Nature*. – 1998. – Vol. 391, № 6668. – P. 641–642.
13. Lezec, H.J. Beaming Light from a Subwavelength Aperture / H.J. Lezec // *Science*. – 2002. – Vol. 297, № 5582. – P. 820–822.
14. Smolyakov, A.I. Resonant modes and resonant transmission in multi-layer structures / A.I. Smolyakov et al. // *Progress In Electromagnetics Research*. – 2010. – Vol. 107, – P. 293–314.
15. Sternberg, N. Resonant Transmission of Electromagnetic Waves in Multilayer Dense-Plasma Structures / N. Sternberg, A.I. Smolyakov // *IEEE Transactions on Plasma Science*. – 2009. – Vol. 37, № 7. – P. 1251–1260.
16. Fourkal, E. Evanescent wave interference and the total transparency of a warm high-density plasma slab / E. Fourkal et al. // *Physics of Plasmas*. – 2006. – Vol. 13, № 9. – P. 092113.
17. Frias, W. Non-local energy transport in tunneling and plasmonic structures / W. Frias, A. Smolyakov, A. Hirose // *Optics Express*. – 2011. – Vol. 19, № 16. – P. 15281.
18. Ivko, S. Resonant transparency of a two-layer plasma structure in a magnetic field / S. Ivko, A. Smolyakov, I. Denysenko, N.A. Azarenkov // *Physical Review E*. – 2011. – Vol. 84, № 1. – P. 016407.
19. Denysenko, I.B. Transmission of electromagnetic waves through a two-layer plasma structure with spatially nonuniform electron density / I.B. Denysenko, S. Ivko, A. Smolyakov, N.A. Azarenkov // *Physical Review E*. – 2012. – Vol. 86, № 5. – P. 056402.
20. Landau L.D. *Electrodynamics of continuous media* / L.D. Landau, E.M. Lifshits, L.P. Pitaevskii. – Oxford: Butterworth-Heinemann, 1995. – 460 p.

PACS: 52.35.-g, 52.65.Rr, 52.35.Mw, 52.35.Ra

COMPARATIVE KINETICS OF IONS FOR DIFFERENT MODES OF PARAMETRIC INSTABILITY OF INTENSE LANGMUIR WAVES IN PLASMA

A.V. Kirichok, V.M. Kuklin, A.V. Pryjmak

V.N. Karazin Kharkov National University

4 Svobody Sq., Kharkov 61022, Ukraine

E-mail: kuklinvm1@rambler.ru

Received November, 11, 2013

Nonlinear regimes of one-dimensional parametric instabilities of long-wave plasma waves are considered for the cases when the average plasma field energy density is less (Zakharov's model) or greater (Silin's model) than the plasma thermal energy. The evolution of ion energy distribution is studied. After saturation of the instability, the ion kinetic energy density normalized to the initial field energy density is found to be of the order of the ratio of linear growth rate to the plasma frequency, for the case when the initial field energy far exceeds the plasma thermal energy. In this case, the ion energy distribution is different from the Maxwellian. In the opposite case of hot plasma, the ions acquire a part of initial field energy, which is approximately equal to the half of ratio of initial Langmuir field energy to the plasma thermal energy. At this, the ion kinetic energy distribution is close to the Maxwellian, and it is reasonably to speak about ion temperature. The crossing of ion trajectories in the surrounding of density cavities is a reason of instability quenching in both cases.

KEYWORDS: parametric instability of plasma waves, plasma, Zakharov's model, Silin's model, ion heating

ПОРІВНЯЛЬНА КІНЕТИКА ІОНІВ У РІЗНИХ РЕЖИМАХ ПАРАМЕТРИЧНОЇ НЕСТІЙКОСТІ ІНТЕНСИВНИХ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ХВИЛЬ У ПЛАЗМІ

О.В. Кірічок, В.М. Куклін, О.В. Приймак

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

м. Свободи, 4, Харків 61022, Україна

Аналізується розвиток 1D параметричних нестійкостей довгохвильових ленгмюровських хвиль у випадках, коли середня енергія поля менше (модель Захарова) і більше (модель Силіна) за теплову енергію плазми. Обговорюється характер спектру іонів за енергіями. Показано, що енергія іонів при насиченні нестійкостей виявляється порядку відношення лінійного інкремента до частоти у випадку, коли початкова енергія поля помітно перевищує теплову енергію плазми. Розподіл іонів за енергіями відрізняється від максвеллівського. В умовах гарячої плазми іонам передається частка енергії, рівна половині відношення початкової енергії поля до теплової енергії плазми. При цьому, так як розподіл іонів близький до нормального, можна говорити про температуру іонів. Перетин траєкторій іонів поблизу каверн щільності є причиною зриву нестійкості в обох випадках.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: параметрична нестійкість ленгмюровських хвиль, плазма, модель Захарова, модель Силіна, нагрів іонів

СРАВНИТЕЛЬНАЯ КИНЕТИКА ИОНОВ В РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМАХ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ИНТЕНСИВНЫХ ЛЕНГМЮРОВСКИХ ВОЛН В ПЛАЗМЕ

А.В. Киричок, В.М. Куклин, А.В. Приймак

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

Пл. Свободы, 4, Харьков 61022, Украина

Анализируется развитие 1D параметрических неустойчивостей длинноволновых ленгмюровских волн в случаях, когда средняя энергия поля меньше (модель Захарова) и больше (модель Силина) тепловой энергии плазмы. Обсуждается характер спектра ионов по энергиям. Показано, что энергия ионов при насыщении неустойчивостей оказывается порядка отношения линейного инкремента к частоте в случае, когда начальная энергия поля заметно превышает тепловую энергию плазмы. Распределение ионов по энергиям отличается от максвелловского. В условиях горячей плазмы ионам передается доля энергии, равная половине отношения начальной энергии поля к тепловой энергии плазмы. При этом, так как распределение ионов близко к нормальному, можно говорить о температуре ионов. Пересечение траекторий ионов вблизи каверн плотности является причиной срыва неустойчивости в обоих случаях.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: параметрическая неустойчивость ленгмюровских волн, плазма, модель Захарова, модель Силина, нагрев ионов

The interest in parametric instability of intensive Langmuir waves, which can be easily excited in the plasma by various sources [1-9], was stipulated, in particular, by the new possibilities in heating of electrons and ions in plasma. The correct methods for description of parametric instability of long-wave plasma waves were developed in the pioneering works of V.P. Silin [10] and V.E. Zakharov [11]. The theoretical concepts of [10] were confirmed by the early numerical experiments on the one-dimensional modelling of parametric decay of plasma oscillations [12] (see also [13, 14] and review [15]). However, the greatest interest has been expressed by experimenters in the mechanism of dissipation of wave energy discovered by V.E. Zakharov. The analytical studies, laboratory-based experiments and numerical simulations performed at an early stage of studying these phenomena have confirmed [16-18] the fact that in some cases during the instability development a significant part of the pump field energy transfers into the energy of short-wave Langmuir oscillations attended with bursts of fast particles [16-27].

In this paper, we compare the models of Silin and Zakharov by the example of one-dimensional description. The choice of one-dimensional approach, as was noted by J. Dawson [28], «...often keeps the main features of the processes, but simplifies their description and leads to a fuller understanding of what the important phenomena are». Of particular interest is the ion heating, so we use in this work the super-particle (or finite-sized particle) description for ions because the account of inertial effects can be significant just at the nonlinear stage of the process [29].

It was observed in [29, 30] that simulation with using of the so-called hybrid model (incorporating one of the Zakharov equations for the high-frequency waves and using particles description for simulation of ion dynamics) demonstrates that fluctuations of ion density are rather significant and accelerate the development of parametric instability. The non-resonant interaction between super-particles-ions and high-frequency plasma oscillations, along with the trapping of ions into the potential wells, formed by these oscillations, leads to instability of the density cavities resulting from the modulation instability.

In paper [30], the hybrid model was compared with Zakharov's hydrodynamic model. Due to higher level of ion density fluctuation, the number of cavities in the hybrid model appears to be significantly greater than in the Zaharov model and their depth is less. Integral characteristics of both models are essentially identical. Note that both the hydrodynamic description within framework of the Zaharov model [30] and description based on the kinetic equations [31], in which there is no non-resonant interactions such as "particle- finite amplitude wave", don't consider the trapping of particles by the wave. As a sequence, the resulting cavities remain stable until the moment when the high frequency plasma field is "burned out" due to the Landau damping – the process that can be better described with using the method of finite-sized particles, as was reasonably pointed out in [30].

Below, we discuss the integral characteristics of the modulation instability developing in cold and hot non-isothermal plasma within framework of hybrid models.

THE MODELS OF PARAMETRIC INSTABILITY

The Silin hybrid model

When the intensity of external electric field is much greater than the specific thermal energy of plasma electrons $W = |E_0|^2 / 4\pi \gg n_0 T_e$, it is reasonable to explore the approach presented by V.P. Silin [32].

Let consider a one-dimensional plasma system, where an intense plasma wave with the wavelength λ_0 and frequency ω_0 is excited by an external source. This intense wave will be referred to as the pumping wave. Since the parametric instability results in the growth of oscillations with rather small wavelength $\lambda \ll \lambda_0$, the pumping wave can be considered as spatially uniform within the region of interaction:

$$E = -\frac{i}{2} (|E_0| \exp(i\omega_0 t + i\phi) - |E_0| \exp(-i\omega_0 t - i\phi)), \quad (1)$$

where $|E_0|$ and ϕ are the slowly varying wave amplitude and phase correspondingly, ω_0 is external wave frequency, n_0 and T_e are the density and temperature of plasma electrons. Charged particles of plasma oscillate under the action of the electric field and their velocities can be written as $u_{0\alpha} = -e_\alpha |E_0| / m_\alpha \cdot \omega_0 \cos \phi = -\omega_0 a \cdot \cos \phi$, where $a = e_\alpha |E_0| / m_\alpha$ is the oscillation amplitude.

The equations, governing the nonlinear dynamics of the parametric instability of intensive plasma wave, were derived in [33]. The equations for high-frequency plasma field spectrum modes $E = \sum_n E_n(t) \cdot \exp(ink_0 x)$ (plasma electrons are considered as fluid and described by hydrodynamic equations) have a form

$$\frac{\partial E_n}{\partial t} - i \frac{\omega_{pe}^2 - \omega_0^2}{2\omega_0} E_n - \frac{4\pi\omega_{pe} v_{i,n}}{k_0 n} J_1(a_n) \cdot \exp(i\phi) - i \frac{\omega_0}{2en_0} \sum_m v_{i,n-m} \cdot [E_{-m}^* J_2(a_{n-m}) e^{2i\phi} + E_m \cdot J_0(a_{n-m})] = 0. \quad (2)$$

Here $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi e^2 n_0 / m_e}$ is the background electron plasma frequency, e and m_e are the mass and the magnitude of the charge of an electron, M is the mass of an ion, $E_n = |E_n| \cdot \exp(i\psi_n)$ is a slowly varying complex amplitude of the electric field of electron plasma oscillations, which wave number is $k_n = nk_0$, $k_0 = 2\pi/L$, where L is a characteristic dimension of the plasma system, $v_i = \sum_n v_{i,n}(t) \cdot \exp(ink_0 x)$ is the ion charge density, $a_n = a \cdot n$, n, m are integers which are not equal to zero and ± 1 .

The motion equations for ion super-particles can be written as follows

$$\frac{d^2 x_s}{dt^2} = \frac{e}{M} \sum_n \bar{E}_n \cdot \exp(ink_0 x_s), \quad (3)$$

and the ion density can be determined from

$$n_{i,n} = v_{i,n} / e = n_0 \cdot \frac{k_0}{2\pi} \int_{-\pi/k_0}^{\pi/k_0} \exp[-ink_0 \cdot x_s(x_{s0}, t)] \cdot dx_{s0}. \quad (4)$$

The slowly varying electric field strength \bar{E}_n , acting on the ions, is equal

$$\begin{aligned} \bar{E}_n = & -\frac{4\pi i v_{i,n}}{k_0 n} \left[1 - J_0^2(a_n) + \frac{2}{3} J_2^2(a_n) \right] + \frac{1}{2} J_1(a_n) [E_n \cdot e^{-i\phi} - E_{-n}^* \cdot e^{i\phi}] - \\ & -\frac{ik_0}{16\pi e n_0} J_0(a_n) \sum_m E_{n-m} E_{-m}^* - \frac{ik_0 J_2(a_n)}{16\pi e n_0} \sum_m (n-m) [E_{n-m} E_m \cdot e^{-2i\phi} + E_{m-n}^* E_{-m}^* \cdot e^{2i\phi}]. \end{aligned} \quad (5)$$

The equation for uniform component of the electric field $E_0 = |E_0| \cdot \exp(i\phi)$ can be written as

$$\frac{\partial E_0}{\partial t} = -\frac{\omega_0}{2en_0} \sum_m v_{i,-m} \cdot [E_{-m}^* J_2(a_m) \cdot e^{2i\phi} + E_m J_0(a_m)]. \quad (6)$$

Note, that the values with subscripts of different signs are independent. In Eqs.(2)-(6), we used the formula [34]

$$\exp(ia \cdot \sin \Phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(a) \cdot \exp(im\Phi), \quad (7)$$

where $J_m(x)$ is the Bessel function.

The normalized frequency shift $\Delta = (\omega_{pe}^2 - \omega_0^2) / 2\delta\omega_{pe}$ reaches the value of $(m_e/2M)^{1/3} J_1^{2/3}(a_n)$ for a mode with the maximal growth rate of parametric instability δ [32]

$$\delta/\omega_{pe} = \frac{i}{\sqrt[3]{2}} \left(\frac{m_e}{M} \right)^{1/3} J_1^{2/3}(a_n). \quad (8)$$

The Zakharov hybrid model

As shown in [33], Eqs. (2)-(6) are in agree with equations, obtained in [35] after following substitutions: $(\omega_{pe}^2 - \omega_0^2) / 2\omega_0 \rightarrow (\omega_{pe}^2 - \omega_0^2 + k^2_0 n^2 v_{Te}^2) / 2\omega_0$ and $E_0 \rightarrow -iE_0$, $E_0^* \rightarrow iE_0^*$ under condition $a_n \ll 1$, when $J_1(a_n) \approx a_n / 2$, $J_0(a_n) \approx 1$, $J_2(a_n) \approx a_n^2 / 8$

$$\frac{\partial E_n}{\partial t} - i \frac{\omega_{pe}^2 - \omega_0^2 + k^2_0 n^2 v_{Te}^2}{2\omega_0} E_n - i \frac{\omega_0}{2n_0} \cdot \left[n_{i,n} E_0 + \sum_{m \neq 0} n_{i,n-m} E_m \right] = 0. \quad (9)$$

The slowly varying electric field amplitude in this case takes the form

$$\bar{E}_n = -\frac{ik_0 n e}{4m\omega_{pe}^2} \left(E_n E_0^* + E_0 E_{-n}^* + \sum_{m \neq 0, n} E_{n-m} E_{-m}^* \right), \quad (10)$$

that enables description of ions using the super-particle method with use of Eqs.(3)-(4). The pump wave amplitude E_0 is governed by equation

$$\frac{\partial E_0}{\partial t} - i \frac{\omega_0}{2n_0} \cdot \sum_m n_{i,-m} E_m = 0. \quad (11)$$

The growth rate of parametric instability in this case is [35]

$$\delta / \omega_{pe} = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{|E_0|^2}{4\pi n_0 T_e} \frac{m_e}{M}} = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{W}{n_0 T_e} \frac{m_e}{M}}. \quad (12)$$

The growth rates (8) and (12) are defined as usually from the dynamics of small field perturbations $E(t) = E(0) \exp(\delta \cdot t)$ at the initial (linear) stage of the parametric instability.

NUMERICAL SIMULATION. PROBLEM FORMULATION

The purpose of this paper is to clarify the characteristics of the dynamics of modulation instability both for the cases of non-isothermal hot and cold plasma by using of the hybrid models.

Below, we have used the following initial conditions and parameters unless otherwise specified in the text. The number of super-particles, simulating the dynamics of ions is $0 < s \leq S = 20000$, the number of spectrum modes is $-N < n < N$, $N = S / 100 = 200$, $a_0(0) = ek_0 E_0(0) / m_e \omega_{pe}^2 = 0.06$, $d\xi_s / d\tau |_{\tau=0} = v_s |_{\tau=0} = 0$, $\xi_s = k_0 x_s$, $\tau = \delta \cdot t$. Note that the linear growth rates for the Silin and Zakharov models are essentially different (see Eq. (8) and (12)). So the time scales for these two models are different too. The initial amplitude of HF field is determined from $e_n |_{\tau=0} = e_{n0} = (0.5 + g) \cdot 10^{-4}$, where $g \in [0; 1]$ is a random value, the initial phases of spectral modes $\psi_n |_{\tau=0}$ are also randomly distributed in the interval $0 \div 2\pi$, $\Delta = 1$, $m_e / M = 10^{-3}$. The ions are supposed to be uniformly distributed over the interval $-1/2 < \xi < 1/2$.

The program, which implements a mathematical model of the problem under consideration, was developed with the use of JCUDA technology. JCUDA technology provides interface between CUDA (Compute Unified Device

Architecture) and Java application. CUDA is a parallel computing platform and programming model created by NVIDIA. CUDA enables scientists to utilize the extreme computational power available on modern GPUs.

NUMERICAL SIMULATION. RESULTS

As shown in Fig. 1, the pump wave amplitude decreases with development of the parametric instability. Denote the time, when the total kinetic energy of ions reaches a maximum, as τ_{max} . Fig. 2 demonstrates the spectrum of HF plasma oscillations at the moment τ_{max} calculated for both models. Correspondingly, Fig. 3 presents the spatial spectrum of ion density at this moment.

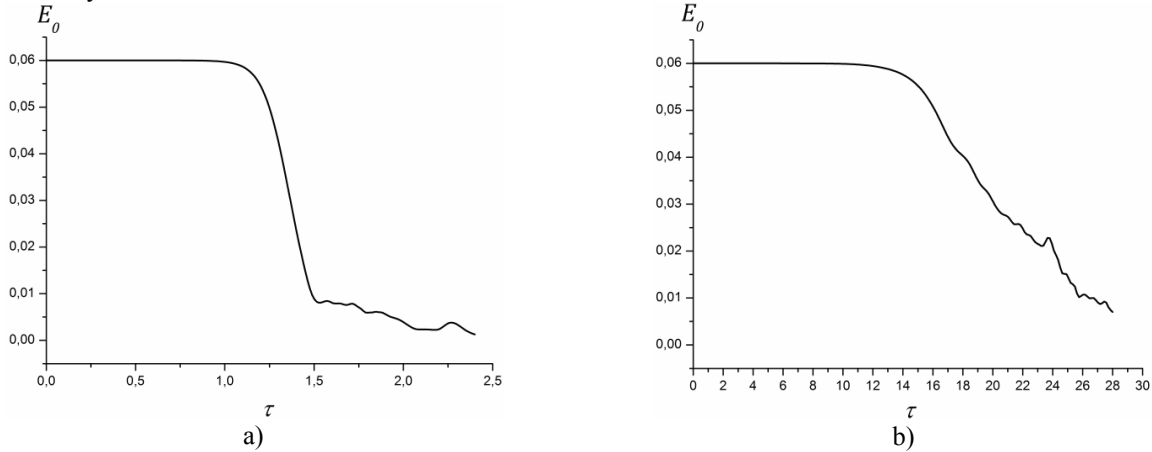


Fig.1. Evolution of pump wave amplitude
a) Zakharov model, b) Silin model

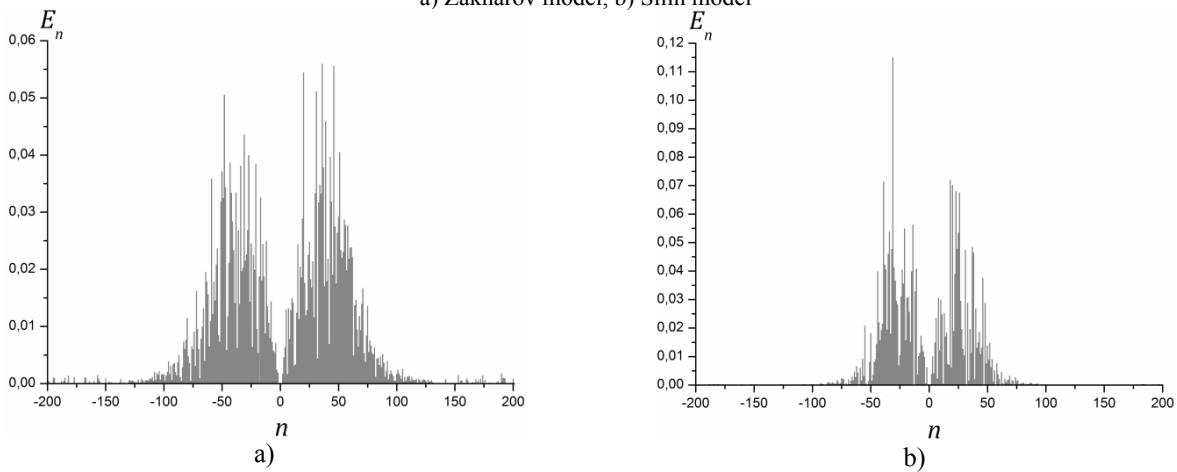


Fig. 2. The spectrum of HF plasma oscillations at the moment τ_{max}
a) Zakharov model, b) Silin model

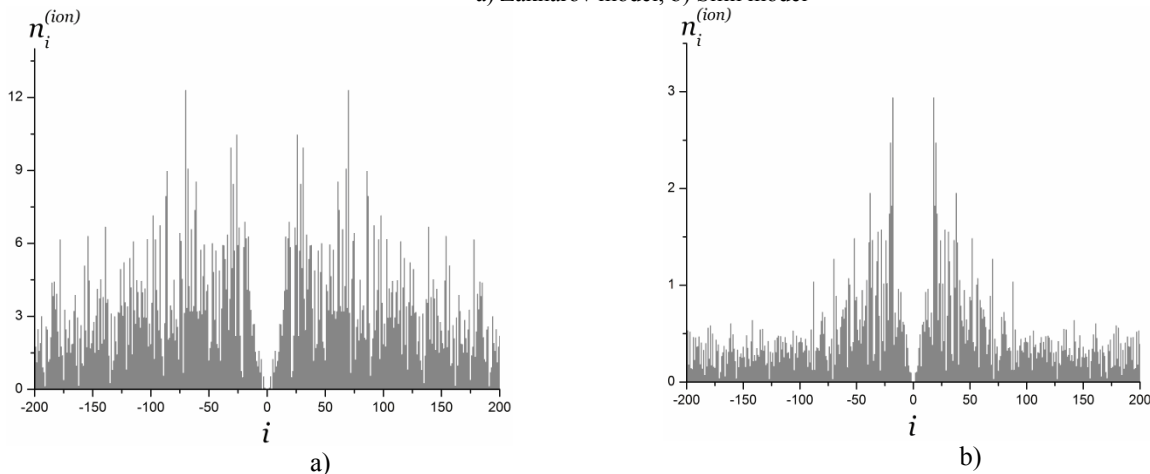


Fig. 3. The spatial spectrum of ion density at the moment τ_{max}
a) Zakharov model, b) Silin model

The total kinetic energy of the ions, located on the length of the pump wave, can be expressed as the sum of squared dimensionless velocities $I = \sum_s (d\xi_s/d\tau)^2$ (evolution dynamics of this value is shown in Fig. 4) and the number of super-particles S as

$$\frac{2\pi}{k_0} \left[\frac{1}{2} n_0 M \langle (dx_s/dt)^2 \rangle \right] = \frac{4\pi^2 \delta^2 M n_0}{2k_0^2 S} \frac{2\pi}{k_0} I, \quad (13)$$

where $\langle (dx_s/dt)^2 \rangle$ is the ensemble average. The ratio of the ion kinetic energy to the initial energy of intense long-wavelength Langmuir wave can be written as

$$\frac{E_{kin}}{W_0} = \frac{2\pi}{k_0} \left(\frac{1}{2} n_0 M \langle (dx_s/dt)^2 \rangle \right) / \left(\frac{2\pi |E_0|^2}{k_0 4\pi} \right) = 2\pi^2 \frac{I}{a_0^2 S} \cdot \frac{M}{m} \cdot \frac{\delta^2}{\omega_{pe}^2}, \quad (14)$$

where E_{kin} is the density of the ion kinetic energy, $W_0 = |E_0|^2 / 4\pi$ is the initial energy density of long-wavelength Langmuir waves.

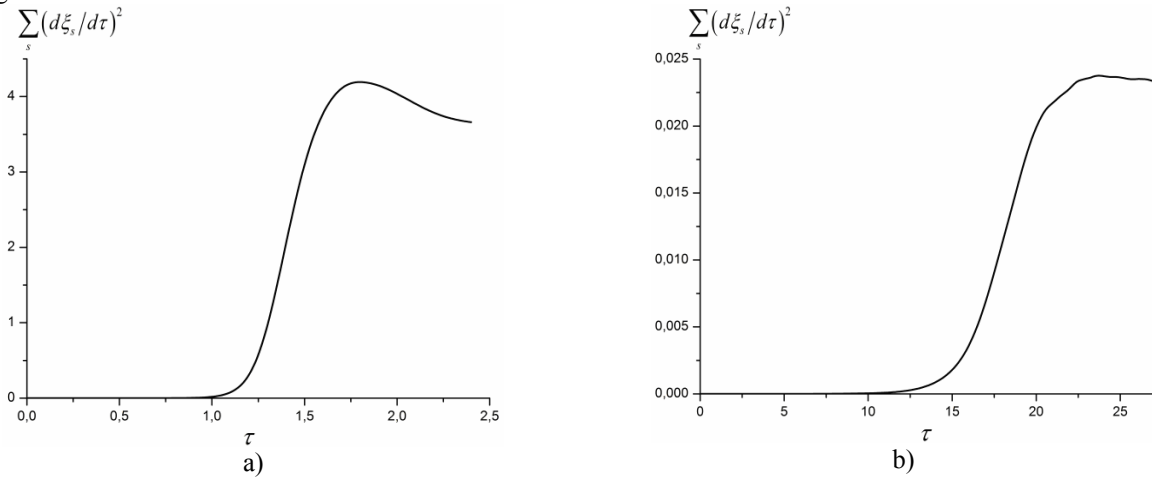


Fig.4. Evolution of the quadratic sum $\sum_s (d\xi_s/dt)^2$

a) Zakharov model, b) Silin model

The ratio of time scales for these two models is of the order of $(m_e / M)^{1/6} (W / n_0 T_e)^{1/2}$. Considering this, it was found that the kinetic energy of ions to be of the same order in both models. The ratio of ion kinetic energy to the initial energy of long-wave oscillations occurs equal to $E_{kin} / W_0 \sim \delta / \omega_{pe}$ for Silin's model and $E_{kin} / W_0 = 0.5 \cdot W_0 / n_0 T_e$ for Zakharov's model. This means that in the Silin model, the ions derive a portion of field energy of the order of δ / ω_{pe} (Fig. 4b). This effect was predicted in [19] and confirmed in [29]. A portion of transferred energy in Zakharov's model is of the order of $W_0 / n_0 T_e$ (Fig. 4a).

A normal relation between half-width of the Maxwellian velocity distribution function and thermal velocity is $\bar{v} = 1.18v_T$. It can be shown that the root-mean-square value of ion velocity at the moment when the instability is saturated is equal $\sqrt{\langle v_s^2 \rangle} = \sqrt{I_s / S}$ (in relative units) (see Fig. 5). If this value is of the order of $0.85 \cdot \bar{v}$, i.e. $\sqrt{I_s / S} \approx 0.85 \cdot \bar{v}$, then we can suppose that ion velocity distribution function is close to the Maxwellian and one can say about ion temperature. If $\sqrt{I_s / S} > 0.85 \cdot \bar{v}$, then the distribution function has a non-Maxwellian "tail" of fast particles. It is easy to verify that the ion velocity distribution function in hot plasma (the Zakharov model) is close to the Maxwellian and ion temperature is well defined and can be estimated as $T_i \sim W_0^2 / n_0^2 T_e$. For the case of cold plasma the ion velocity distribution function contains a significant part of fast particles as was observed in experiments [36]. Actually, the ratio of ion kinetic energy to the initial energy of the plasma wave field (14) is

$$\frac{E_{kin}}{W_0} \approx 0.27 \cdot I \cdot \left(\frac{M}{m} \right) \cdot \delta^2 / \omega_{pe}^2. \quad (15)$$

For the case of hot electrons (the Zakharov model), where $m_e / M = 2000^{-1}$, $\delta / \omega_{pe} = 3.5 \cdot 10^{-3}$, $I \approx 4.584$ one can obtain $E_{kin} / W_0 \approx 3 \cdot 10^{-2}$. For the case of cold plasma (the Silin model), where $m_e / M = 2000^{-1}$, $\delta / \omega_{pe} = 0.034$, $I \approx 0.08$, this ratio is equal $E_{kin} / W_0 \approx 5 \cdot 10^{-2}$.

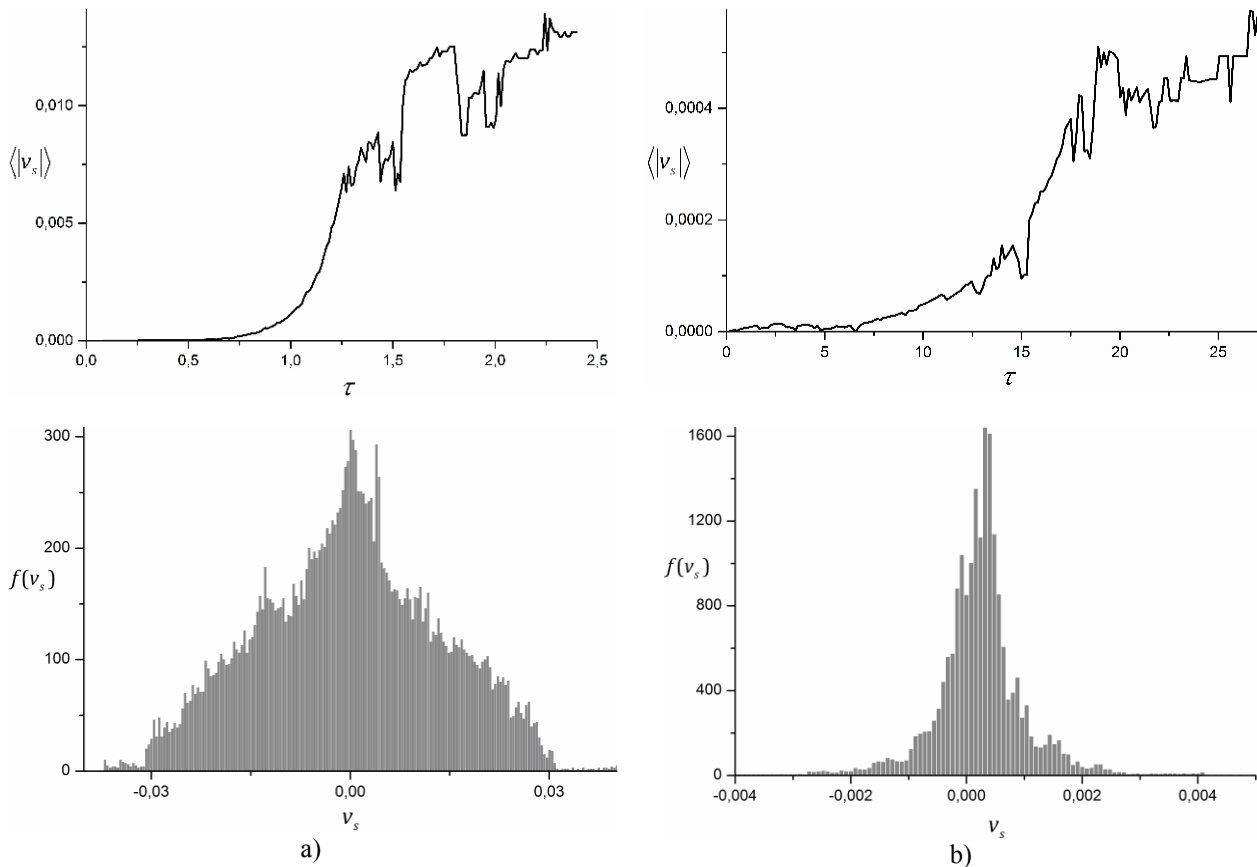


Fig. 5. The evolution of normalized mean-square velocity of ions (top) and ion velocity distribution function (bottom) at the moment τ_{\max}
a) Zakharov model, b) Silin model

We can adjust parameters of the normal distribution in such a way as to minimize the number of particles outside of this distribution. The ratio of total kinetic energy of these “non-Maxwellian” particles to the total kinetic energy of ions is of the order of 0.14 for the case of hot plasma (the Zakharov model) and of the order of 0.58 for the case of hot plasma (the Silin model). Thus, the ion kinetic energy distribution for the hot plasma is close to Maxwellian and the total kinetic energy of fast ions is comparable with the total kinetic energy of the normally distributed ions. The origin of fast particles is stipulated not only by the destruction of cavities due to absorption of short wave RF field (nucleation), but also by the earlier process of exclusion of ions from cavities by RF field.

CONCLUSIONS

The hybrid models describe the nonlinear stage of the parametric instability in plasma more accurately than the models based on hydro dynamic or kinetic description due to considering the effects of ions trapping and trajectories crossing resulting from large inertia of the heavy particles.

The instability in the Zakharov model develops faster than in the Silin model, since all unstable modes of the spectrum have approximately the same growth rate (see Eq. (12)). In the Silin model, the maximum growth rate displaces to the short wavelength domain with the development of the instability.

In hot plasma a fraction of the field energy, which is transferred to the ions, is proportional to the ratio of the field energy density to the plasma thermal energy density W_0/n_0T_e . In cold plasma, a fraction of the field energy, which is transferred to the ions, is of the order of δ/ω_{pe} , or that the same, is proportional to $(m_e/M)^{1/3}$.

The kinetic energy distribution of ions for the Zakharov model is close to the Maxwellian, and we can estimate the ion temperature $T_i \sim W_0^2/n_0^2T_e$. The kinetic energy distribution of ions for the Silin model is significantly different from Maxwellian and contains a large fraction of fast particles.

Let us note in conclusion, that the dynamics of parametric instability for Silin’s and Zakharov’s models are similar in appearance first of all due to the similarity of the input equations. Note also, that the number of particles $S = 20000$, used for one-dimensional simulation, corresponds to the number of particles near $10^{12} - 10^{13}$ for three-dimensional case, that is in agree with the condition of most of the experiments.

The authors thank Prof. Karas’ V.I. for helpful comments.

REFERENCES

1. Silin V.P., Ruhadze A.A. The electromagnetic properties of plasma and plasma like media. – M.: Atomizdat, 1961. – 244p.
2. Basov N.G., Krohin O.N. Plasma heating condition by optical generator radiation // JETP. – 1964. - Vol.46, No.1. - P.171-175.
3. Dawson J.M. On the production of plasma by giant pulse lasers // Phys. Fluids. – 1964. - Vol.7, No.7. - P.981-987.
4. Paschinin P.P., Prokhorov A.M. Dense high-temperature plasma production by laser heating of the special gas target // JETP. – 1971. –Vol.60, No. 5. – P.1630-1636.
5. Buts V.A., Lebedev A.N., Kurilko V.I. “The Theory of Coherent Radiation by Intense Electron Beams”. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 2006, 322p.
6. Fainberg Ja.B. Plasma electronic // Ukr. Phys J. – 1978. – Vol. 23, No.11. – P.1885-1901; The some of Plasma Electronics Problems // Fizika Plasmy. – 1985. – Vol.11, No. 11. – P.1398-1410.
7. Kuzelev M.V., Ruhadze A.A. Dense electron beam electrodynamic in Plasma. – M.: Nauka, 1990. – 336p.
8. Shapiro V.D., Schevchenko V.I. Wave-particle interaction in nonequilibrium media // Izv. Vusov. Radiophys. – 1976. – Vol.19, No.5-6. – P.787-791.
9. Kondratenko A.N., Kuklin V.M. / Plasma electronic principles. – M.: Energoatomizdat, 1988. – 320p.
10. Silin V.P. Parametric resonance in plasma // JETP. – 1965. – Vol. 48, No.6. – P.1679-1691.
11. Zakharov V.E. Weak-turbulence spectrum in a plasma without a magnetic field // Sov. Phys. JETP. –1967. – Vol. 24(2), P.455-459 . The Instability of Waves in Nonlinear Dispersive Media // Sov. Phys. JETP. - 1967. –Vol. 24. – P.740. Collapse of Langmuir Waves // Sov. Phys. JETP. - 1972. – Vol. 35(5). –P.908-914.
12. Kruer, W.L., Kaw P.K., Dawson J. M., Oberman C. Anomalous high-frequency resistivity and heating of a plasma // Phys. Rev. Lett. – 1970. – Vol.24, No.18. - P.987-990.
13. Aliev Ju.M., Silin V.P. Oscillations theory of plasma, which situated in HF electromagnetic field // JETP. – 1965. – Vol.48, No.3. – P.901-912.
14. Gorbunov L.M., Silin V.P. On the plasma instability in strong HF field // JETP. – 1965. – Vol.49, No.6. – P.1973-1981.
15. Silin V.P. Anomalous nonlinear dissipation HF radio-waves in plasma // Uspech. Fiz. Nauk. – 1972. –Vol.108, No. 4. – P.625-654.
16. Kruer W.L. Heating of under dense plasma by intense lasers // Phys. Fluids. – 1973. – Vol.16, No.9. – P.1548-1550.
17. Ivanov A.A., Nikulin M.G. Nonlinear interaction large amplitude Langmuir waves in collisionless plasma // JETP. – 1973. – Vol.65, No.1. – P.168-174.
18. Kim H.C., Stenzel R.L., Wong A.Y. Development of "Cavitons" and Trapping of RF Field. II // Phys. Rev. Lett. –1974. – Vol. 33. –P. 886.
19. Andreev N.E., Silin V.P., Stenchikov G.L. On saturation of plasma parametrical instability in strong electric field // Sov. Plasma Physics. – 1977. - Vol.3, No.5. - P.1088-1096.
20. Kovrignych L.M. The modulation instability and nonlinear waves in cold plasma // Fizika Plasmy. –1977. – Vol.3, No.5. – P.1097-1105.
21. Buchelnikova N.S., Matochkin E.P. Instability and damping 1D Langmuir waves. Reprint № 79-115.AN USSR, Inst. Nuclear Phys. – 1979. – 20P.
22. Antipov S.V. et al. Quasi-soliton oscillations, allocated in density ‘hollow’ of magnetized plasma // Pis'ma JETP. – 1976. – Vol. 23, No.11. – P.613-616.
23. Sagdeev R.Z., Shapiro V.D., Schevchenko V.I. Strong Wave dissipation in inhomogeneous plasma and ultra strong plasma turbulence // Fizika plasmy. – 1980. – Vol.6, No.3. – P.377-386.
24. Wong A.Y., Cheung P.Y. Three-Dimensional Self-Collapse of Langmuir Waves // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 52. – P.1222-1228.
25. Cheung P.Y., Wong A.Y. Nonlinear evolution of electron electron-beam-plasma interaction // Phys. Fluids. –1985. – Vol. 28, No5. – P.1538-1548.
26. Karfidov D.M., Rubenchik A.M. et al. The excitation of strong Langmuir turbulence in plasma by electron beam // JETP. – 1990. – Vol.98, No.5(11). – P. 1592-1599.
27. Zakharov V.E. et al. 3D Langmuir collapse kinetics // JETP. – 1989. – Vol.96, No.2. – P.591-603.
28. Dawson J.M. Some Investigations of Plasma Instabilities in One-Dimensional Plasmas. – Princeton, N.J.: Princeton University, Plasma Physics Laboratory. – 1962. – P.45.
29. Chernousenko V.V., Kuklin V.M., Panchenko I.P. The structure in nonequilibrium media. In book: The integrability and kinetic equations for solitons / AN USSR, ITPh. K.: Nauk. Dumka, 1990. - 472p.
30. Clark K.L., Payne G.L., Nicholson D.R. A hybrid Zakharov particle simulation of ionospheric heating // Phys. Fluids B. - 1992. –Vol. 4, No.3. – P.708-718.
31. Henri P., Califano F., Briand C., Mangeney A. Low energy Langmuir cavitons: asymptotic limit of weak turbulence. arXiv:1301.3090v2 [physics.plasm-ph] 15 Jan 2013.
32. Silin V.P. Parametric Influences of high-energy Radiation on Plasma. – Moscow: Nauka, 1973.
33. Kuklin V.M. Similarity of 1D Parametric Instability description of Langmuir waves // The Journal of Kharkiv National University, physical series: Nuclei, Particles, Fields. – 2013. – No.1041. - Iss.2(58). - P.20-32.
34. Dwight H.B. Tables of integrals and other mathematical data. (4 ed). –NY.: The Macmillan com., 1961. - 230p.
35. Kuznetsov E.A. On averaged description of Langmuir waves in plasma // Sov. Plasma Physics. – 1976. – Vol.2, No.2. – P.327-333.
36. Batanov G.M., et al. The large amplitude Langmuir waves and particle acceleration in plasma microwave discharge // Sov. Plasma Physics. – 1986. – Vol.12, No.5. – P.552-565.

PACS: 81.20.Ym

ELECTROTRANSPORT AS A WAY OF METALS DEEP PURIFICATION**G.P. Kovtun**

*National Science Center «Kharkov Institute of Physics and Technology»
1, Academicheskaya str., Kharkov, 61108, Ukraine
V.N. Karazin Kharkov National University, Department of Physics and Technology
31 Kurchatov av., Kharkov, 61108, Ukraine
E-mail: gkovtun@kipt.kharkov.ua
Received January 14, 2014*

The basic mechanisms of impurity ions migration in the liquid and solid metals under the influence of direct electric current have been stated. The estimations for the ultimate distribution of impurity elements in metals at application of direct current have been presented. It has been shown that the separation of interstitial impurities (oxygen, nitrogen, hydrogen and carbon) is achieved most effectively in solid metals during electrotransport. Particular attention was focused on the process of refining metals by zone recrystallization under electrostatic field. It was established experimentally that the impurity flow arising owing to electrotransport prevails over the flow due to the effect of zone recrystallization, and effective distribution coefficients of impurity elements may decrease, increase, or change sign, depending on the direction of the field. A new method for deep refining of refractory metals by zone melting under electric field was proposed. Prospects to use electrotransport for the refinement of metals have been discussed.

KEYWORDS: electrotransport, basic laws, refining of metals, zone melting under electric field

ЕЛЕКТРОПЕРЕНОС ЯК СПОСІБ РАФІНУВАННЯ МЕТАЛІВ**Г.П. Ковтун**

*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»
вул. Академічна 1, 61108 Харків, Україна
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, фізико-технічний факультет
пр. Курчатова, 31, Харків, 61108, Україна*

Викладено основні механізми міграції домішкових іонів в твердих і рідких металах під впливом постійного електричного струму. Наведено оцінки для граничного розподілу домішкових елементів у металах при пропусканні постійного електричного струму. Показано, що в твердих металах у процесі електропереносу найбільш ефективно досягається розділення домішок проникнення (кисню, азоту, водню і вуглецю). Особливу увагу приділено процесу рафінування металів зонною перекристалізацією в постійному електричному полі. Експериментально встановлено, що домішковий потік, що виникає внаслідок електропереносу, переважає над потоком за рахунок ефекту зонної перекристалізації, а ефективні коефіцієнти розподілу домішкових елементів можуть зменшуватися, збільшуватися або міняти знак в залежності від напрямку поля. Запропоновано новий спосіб глибокого рафінування тугоплавких металів зонної плавкою в електричному полі. Обговорено перспективи використання електропереносу для рафінування металів.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: електроперенос, основні закономірності, рафінування металів, зонна плавка в електричному полі

ЭЛЕКТРОПЕРЕНОС КАК СПОСОБ ГЛУБОКОГО РАФИНИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ**Г.П. Ковтун**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая 1, 61108 Харьков, Украина
Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, физико-технический факультет
пр. Курчатова, 31, Харьков, 61108, Украина*

Изложены основные механизмы миграции примесных ионов в твердых и жидких металлах под влиянием постоянного электрического тока. Приведены оценки для предельного распределения примесных элементов в металлах при пропускании постоянного электрического тока. Показано, что в твердых металлах в процессе электропереноса наиболее эффективно достигается разделение примесей внедрения (кислорода, азота, водорода и углерода). Особое внимание уделено процессу рафинирования металлов зонной перекристаллизацией в постоянном электрическом поле. Экспериментально установлено, что примесный поток, возникающий вследствие электропереноса, преобладает над потоком за счет эффекта зонной перекристаллизации и эффективные коэффициенты распределения примесных элементов в зависимости от направления поля могут уменьшаться, увеличиваться или менять знак. Предложен новый способ глубокого рафинирования тугоплавких металлов зонной плавкой в электрическом поле. Обсуждены перспективы использования электропереноса для рафинирования металлов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: электроперенос, основные закономерности, рафинирование металлов, зонная плавка в электрическом поле

An electrotransport takes a certain place among various methods of deep refining metals. By the concept of electrotransport (electrodifusion, electrical migration) it is meant the range of phenomena associated with the direction of movement of the solution components in solid or liquid metals under the action of direct electric current (DC). When electric field applying, ones of the solution components are moved toward the anode, the others - to the cathode. Power efficiency of the electrotransport is low and to achieve significant degree of metals purification it is required large

current densities and significant times. The electrotransport is used mainly for high purity metal production in small amounts and especially in the cases where other purification methods are not effective. However, as a method of metals deep cleaning, the electrotransport has its advantages: the method is relatively simple in the equipment design, you can use small amounts of source metal for the refining process, and, very importantly, the method makes it possible to achieve very deep cleaning of metal. Electrotransport is most prevalent method mainly to remove impurities of oxygen, nitrogen, hydrogen, carbon from almost all the rare earth metals (Y, La, Ce, Tb, Lu, Nd, etc.) and from a large refractory group (W, Mo, Ta, Nb, V, Hf, Zr, etc.) in a solid state. Removal of these impurities by other methods is difficult. Recent studies have shown that the degree of separation of impurity elements during zone recrystallization of metals increases significantly if it is carried out under an electric field and it opens up new opportunities for deep purification of metals. In spite of the advances on deep cleaning of many metals involving electric field, it should be noted that as a method of refining metals the electrotransport has been developed still insufficiently in the scientific and technological terms.

The aim of this paper is describing the main achievements in the field of deep cleaning of metals using electrotransport and the determination of its opportunities for future use.

THE MAIN LAWS OF REFINING METALS BY ELECTROTRANSPORT

Theoretical postulates of refining metals under electric field effect were considered in a number of books and articles, both in the solid and liquid phases [1-12].

Application of direct electric current to metal sample leads to moving both the matrix ions and impurity ones in a certain direction. The description of the ions motion is based on the proportionality of ion drift velocity v to the external force F acting on the ion:

$$v = UF, \quad (1)$$

where U is the ion mobility. External force F , acting on an ion, is the sum of the force F_z exerted by the electric field and the force F_n due to the scattering of conduction electrons by the ion («electronic wind»), i.e. $F = F_z + F_n$. The force acting on the ion by the electric field is expressed as:

$$F_z = zE, \quad (2)$$

where z is the ion charge; E is the electric field strength.

The strength of «electron wind» F_n is calculated based on quantum representations, according to which the interaction of ions with the conduction electrons is considered as elastic scattering of electrons by the ion [1]:

$$F_n = |e|nI\sigma E, \quad (3)$$

where e is the electron charge; n is the concentration of conduction ion; I is the mean free pass of electron; σ is the cross-section for scattering of electrons.

The total force acting on the impurity ion in a metal:

$$F = (z - |e|nI\sigma) = z_{eff}E, \quad (4)$$

where $z_{eff} = z - |e|nI\sigma$ is the effective ion charge.

Besides the «electronic wind», the existence of «hole wind» is possible also in the presence of mixed electron-hole conductivity. And then

$$z_{eff} = z - |e|n_-I_- \sigma_- + |e|n_+I_+ \sigma_+, \quad (5)$$

where the indices (-) and (+) refer to electrons and holes, respectively.

Depending on the sign of z_{eff} , the resultant force can be directed to the cathode ($z_{eff} > 0$), to the anode ($z_{eff} < 0$) or to be equal to zero ($z_{eff} = 0$).

The magnitude of effective charge z_{eff} can be determined from the expression [8]:

$$z_{eff} = \frac{U}{D} \cdot \frac{kT}{e}. \quad (6)$$

Here D is the ion self-diffusion coefficient, T is the temperature, k is the Boltzmann constant.

The value of the impurity ion mobility is dependent on the properties of system and the temperature. In general, the relative mobility of ions is determined by the expression [7]: $\Delta U = (v_1 - v_2)/E$, where v_1 and v_2 are the movement speeds of the impurity ions and a main component, respectively. In the case of dilute solutions the speed of solvent movement v_2 is actually equal to zero, and the expression for the impurity ion mobility becomes:

$$U = \frac{v_1}{E}. \quad (7)$$

Quantitative characterization of the refining process during electrotransport follows from the relationship between the rate of motion of the impurity under the electric field and its reverse motion because of diffusion due to the

appearance of a concentration gradient. The equations of material flow generated by the electric field are used to describe this process. In the case of electrotransport in the rod the flow equation has the form [7]:

$$I = -D \frac{dC}{dx} + UCE, \quad (8)$$

where C is the impurity concentration at a distance x from beginning of the sample.

When electric field applying for sufficiently long time, the first term of flow characterizing diffusion and a second one caused by the presence of electric field balance each other out, giving a zero stream and hence maximally achievable degree of purification (Fig. 1). If t_0 - start time corresponding to the initial concentration C_0 , and the duration of electrotransport $t_1 < t_2 < t_\infty$, then the considerable refinement is observed in the left part of the rod. Maximum purification is achieved at the electrotransport duration, when there comes an equilibrium state according to the equation (8).

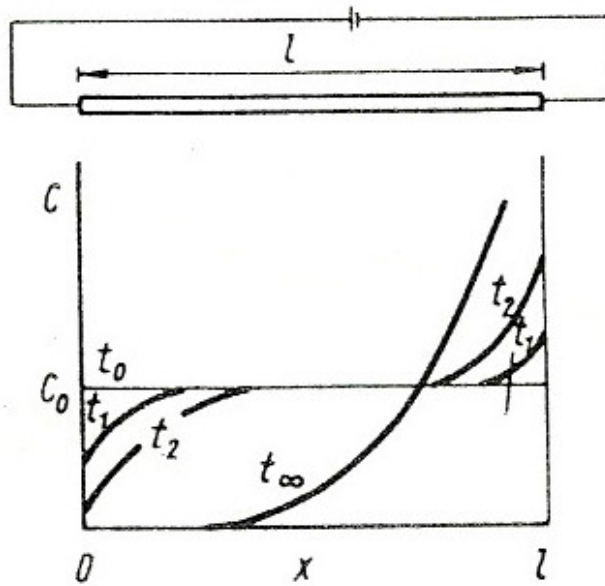


Fig.1. Impurity distribution along the sample length under applied DC current for various time periods, t .

The degree of purification is estimated by the ratio C_t/C_0 from the expression

$$C_t/C_0 = \frac{2}{C_0 L} \int_0^{L/2} C(x, t) dx. \quad (9)$$

In this expression C_t is the average concentration in that half of the sample, where the less impurity remains after the time t ; C_0 is the initial concentration; $C(x, t)$ - the impurity concentration depending on the distance at the time t ; L is the rod length. The joint solutions of the equations (8) and (9) allow obtaining approximate expressions for calculating the distribution of impurities concentrations along the length of the rod, depending on the electrotransport parameters.

Assuming U , E , and D do not depend on the concentration and position in the rod, Verhoeven [7] proposed an expression for the average impurity concentration in the pure part of the rod in dependence on time:

$$\frac{C_{m(t)}}{C_0} = 2 \left[\frac{1 - e^{-s/2}}{1 - e^{-s}} - \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-s/4} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) e^{-\lambda_n t} \right], \quad (10)$$

where $C_n = \frac{32n\pi s [1 - (-1)^n e^{s/2}]}{(s^2 + 4n^2\pi^2)^2}$; $\lambda_n = (n^2\pi^2 + \frac{s^2}{4}) \frac{D}{L^2}$; $s = -\frac{U}{D} EL$; $C_{m(t)}$ is the average concentration of

impurity in the purified part of the rod; C_0 is the initial concentration of impurity; L is the length of the rod; E is the electric field; U is the mobility of impurity ion; D is the diffusion coefficient of impurity ion.

Although the above equation does not allow determining explicitly how different variables affect the cleaning process, it is used to calculate the minimum impurity concentrations achieved by the electrotransport. In particular, the Table 1 shows the calculated values of the relative changes in the concentrations of carbon C_m/C_0 for some metals, made for the first half of rod with length of 10 cm by the field $E = 0.2$ V/cm and different time of electrotransport [7].

It can be seen from Table 1 that the full separation of metals from the carbon impurity at $U/D > 12$ occurs after 5 days. Since the degree of refinement is directly proportional to the ratio U/D then it has to increase with decreasing temperature. However, as the temperature decreases, the diffusion coefficient decreases and therefore increases the time required to achieve the deep purification.

Table 1.

The average relative concentration of carbon C_m/C_0 (C_m - the average concentration of carbon for the first half of rod, C_0 - the initial concentration of carbon) in metals after electrotransport, calculated at different times [7]

System	T, °C	U/D, B ⁻¹	C _m /C ₀		
			1 day	5 days	∞
Th-C	1675	19	4.5·10 ⁻³	1.1·10 ⁻⁸	1.1·10 ⁻⁸
Fe-C	1400	44	4.2·10 ⁻⁴	1.5·10 ⁻¹⁹	1.5·10 ⁻¹⁹
Ni-C	1400	12	7.3·10 ⁻¹	6.5·10 ⁻²	1.2·10 ⁻⁵
Ta-C	2600	52	4.9·10 ⁻²³	4.9·10 ⁻²³	3.9·10 ⁻²³
W-C	2800	5.7	7.5·10 ⁻¹	1.4·10 ⁻¹	6.7·10 ⁻³

The equation (10) was also used to evaluate the efficiency of vanadium purification of interstitial impurities [10]. Impurity concentration was calculated in a clean part at a distance of 2 cm from the end of the sample having total length of 20 cm. With electrotransport temperature of 1650°C, the process duration of 200 h, and the electric field of 0.27 V/cm, the content of oxygen impurity in the vanadium can be reduced by 3·10³ times, N - by 2·10⁶ times and carbon - by 1·10⁷ times.

A more simple expression was proposed in [11] giving the value of the impurity concentration at the point x along the rod in time $t \rightarrow \infty$:

$$\ln \frac{C(x, \infty)}{C_0} = \ln \frac{UEL}{D} - \frac{UEx}{D} \quad (11)$$

In this equation, C_0 and $C(x, \infty)$ - the initial and maximum allowable concentration of impurities at an arbitrary point x of cleaning rod with length of L; E is the electric field; U is the electric mobility; D is the diffusion coefficient of impurity. In the steady state at infinite time of refining the ratio of impurity concentration at the ends of the sample is equal to e^s , where the dimensionless parameter $s=UEL/D$. Thus, the degree of purification can be enhanced by the using of longer sample, increasing of electric field, and optimizing the relationship U/D. In practice, the actual values of relative changes of impurity elements at cathode and anode are much smaller than calculated ones. This discrepancy may be due to several reasons: pollution from the electrodes or the environment during electrotransport, nonuniform temperature distribution along the sample, decreasing the mobility of impurities resulting from their capture by vacancies, etc.

THE REFINEMENT OF METALS IN THE SOLID PHASE BY ELECTROTRANSPORT

For the purposes of refinement, the metals samples are used in the form of rods, wires, strips, which are connected through the holders to the current feedthroughs built in the walls of the working chamber (Fig. 2).

Direct electric current, applied to the sample, heats it to the desired temperature and performs a redistribution of the impurities, as shown in Fig. 1. Depending on the metal vapor pressure, the refining process is carried out in a high vacuum or in an environment of high-purity inert gas.

The electrotransport in solid phase has been used most widely for deep refinement of rare earth metals (REM). Practically all of REM (Y, Sc, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Lu) were subjected to refining by this method [11-21]. Apparently, this was due to the need of producing high-purity metals samples to determine their true properties, in particular, the different nuclear constants. Electrotransport method allowed them to produce small quantities of samples of high-purity metals sufficient for research.

The samples in the form of rods by length of 8-20 cm and diameter of 4-6 mm were commonly used to REM. A certain problem is the sample holders which can contaminate the sample being refined. Different approaches are used to solve this problem. One of them is the removal of sample contaminated areas and continuation of the refining process. The second approach is the use of specimen holders of high-purity refractory metals. For example, the authors Of [18] concluded that it would be better for the REM to use a holder made of tantalum at the cathode and one made of zirconium – at the anode.

Achievement of maximal degree of purification at lower time requires carrying out the electrotransport process at

high temperatures close to the melting point. However, this approach is not always possible for many REM due to their high volatility. For example, for La, Ce, Pr having a low vapor pressure of ($\sim 10^{-9}$ - 10^{-4} Pa) at the melting point, the electrotransport can be carried out in vacuum for several hundreds of hours to achieve theoretical redistribution of impurities. Refinement of Nd, Gd, Tb, Lu, Y, having a higher vapor pressure of ($\sim 10^{-3}$ – 10 Pa) at the melting point, by the electrotransport is possible only at low temperatures in a vacuum. Refinement of Sc, Er, Ho, Dy, Yb, Sm, Tm, relating to the volatile REM (vapor pressure ≥ 100 Pa at the melting temperature) is possible only under an inert gas.

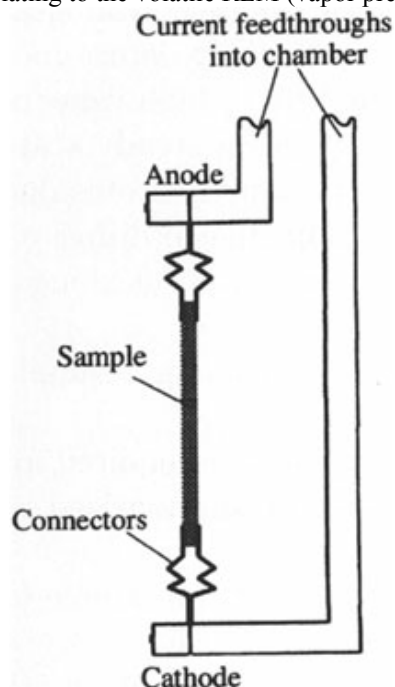


Fig. 2. Schematic diagram of refining metals by the electrotransport in solid phase.

Refining process of REM by the electrotransport method proceeds very long and refinement objects have a high chemical activity. Therefore, it is necessary that the working environment in the chamber was ultrapure, regardless of whether a high vacuum is created in chamber or working environment forms by predetermined pressure of inert gas. In any case, the vacuum system should provide a residual pressure of 10^{-8} Pa and below and the inert gas should maintain high level of purity during the refining process. Elimination of REM contamination can be minimized by pre-high-temperature heating of the working chamber and refining samples under ultrahigh vacuum.

When refining REM by the electrotransport, the emphasis was made mainly on the removal of impurities of oxygen, nitrogen, hydrogen, carbon, i.e. those impurities, separation of which from these metals by other methods is difficult because of the large negative values of formation free energies of oxides, nitrides, carbides, and hydrides. Typically, all the interstitial impurities in REM have a high mobility, effective charge $Z_{\text{eff}} < 0$ and migrate to the anode part of the sample. High mobility is typical for many of substitution impurities in REM. Therefore, electrotransport can be an effective way to separate the REM not only from O, N, C, H, but also from such impurities as Fe, Ni, Al, Ag, Cu, etc. There is a certain correlation between the rate of migration of substitutional impurities and their atomic size. It should be noted that electrotransport method is effective only for the dissolved impurities. Therefore impurities, which do not form solid solutions, must be removed by other methods before the formation of solid solutions.

Some reactive refractory metals (Ta, Nb, Mo, V, Zr, Hf) [22-28] and several others [29-31] also were subjected to refining by electrotransport. The degree of separation of the impurity elements mainly depends on the current density and the time. As an example, Fig. 3 shows the change in the R_{res} (ratio of resistivity at room and helium temperatures) along the length of vanadium samples, depending on the time of electrotransport [23]. Studies have shown that the DC flow in vanadium with density of $5 \cdot 10^3$ A/cm² forces the interstitial impurities to migrate to the cathode side, i.e. effective charges of these impurities are positive. It follows from calculated estimates that at 1650°C for 200 hours at a current density of $\sim 5 \cdot 10^3$ A/cm² the reduction of oxygen, nitrogen and carbon, respectively, by $3 \cdot 10^3$, $2 \cdot 10^6$ and $1 \cdot 10^7$ times is expected as a result of refinement by electrotransport. It was shown experimentally that the value R_{res} of vanadium increases from 50 to 1600 [23] as a result of the refinement by the electrotransport.

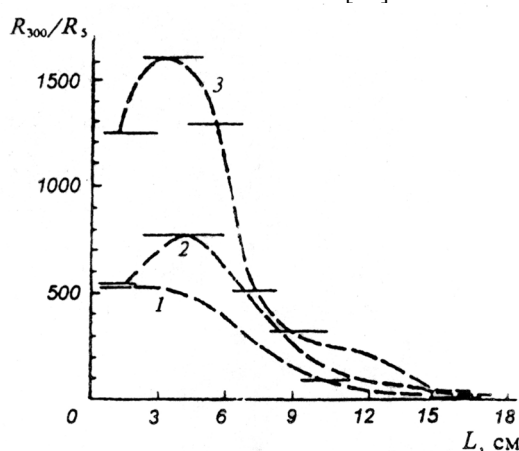


Fig. 3. The change in R_{res} of vanadium along the length L of a sample after electrotransport at $T = 1650^\circ\text{C}$; $j = 2500$ A/cm²; 1 – 100 h, 2 – 200 h, 3 – 400 h.

Researches on refining of vanadium with use of electrotransport were carried out in [22]. The anodic part of the sample had $R_{\text{res}} = 1000 \div 1100$ at a current density of 2150 A/cm² after 220 hours. Prepurified vanadium rod was welded to the anode part of the sample to eliminate the migration of impurities from the cold part. In this case, the anode part of the sample had values $R_{\text{res}} = 1800-2000$, and in isolated case the value was equaled about ~ 2850 . At that the high-purity part of material was one third of the entire length of the sample. A similar scheme has been used for refining zirconium [27]. After exposure during more than 1000 hours at $\sim 1600^\circ\text{C}$ the middle part of the zirconium rod had $R_{\text{res}} = 650$, which is the maximum value for zirconium [27]. At that, all the interstitial impurities (O, N, C, H) in a β -Zr shifted to the anode under the influence of electric field. At the same time the sign of Z_{eff} for interstitial impurities in Nb varies with temperature, $Z_{\text{eff}} > 0$ for interstitial impurities in Mo [25, 26]. For substitutional impurities it is noted a relationship between the sign of Z_{eff} and atomic number of dissolved metal. Table 2 shows the values of R_{res} for a number of metals subjected to refining by the

electrotransport method in solid phase. Basing on the values R_{res} , the purity of metals shown in Table 2 have a higher degree of purity compared to that, achieved by other methods of refining.

Table 2.

High-purity refractory metals and rare earth metals subjected to refining by ET in solid phase, and the known values of R_{res} [11-28]

Metal	Sc	Y	La	Ce	Pr	Nd	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Yb	Lu	V	Zr	Hf	Cr	Th
R_{res}	520	1200	260; 400		250; 400	120	300		340; 405	400	124	90	46		150	1880; 2850	650	15	700	1000

Despite the possibility of deep purification of metals, the electrotransport in the solid phase has disadvantages also. Pollutions of refining metals from the side of electrodes and surrounding atmosphere are observed. The high current densities (up to 10^4 A/cm²) and long times are needed, and the amount producing high-purity metal is small.

REFINING METALS IN LIQUID PHASE BY THE ELECTROTRANSPORT

Electrotransport of impurity ions in liquid metals is mainly governed by the same laws as in solid ones. Current theory of electrotransport in liquid metals considered in the monographs Belashchenko [2,3], Mikhailov [5] and others [7-9]. When current flowing through the liquid metal, the different types of convective mixing (heat, concentration, electrokinetic and magnetohydrodynamic convection) have a strong influence on mass transfer. Convective effects prevent the formation of high impurities gradients in a metal; therefore the problem of their as much as possible complete suppression is set always during refining.

During calculations the presence of convective effects is taken into account by replacement of the molecular diffusion coefficient D_0 by an effective diffusion coefficient $D = D_0 + D_c$, where D_c is the convective diffusion coefficient. It is impossible to get rid of convective phenomena completely, but their effect can be significantly reduced if the electrotransport of liquid metals is implemented in tubes with sufficiently small cross section ($d < 3$ mm).

Theoretical estimates of the limits of liquid metals refinement by electrotransport were attributed usually to specific devices.

The estimates of theoretical limits of liquid metals refinement in the devices that are most favorable for metal purification by the electrotransport method have been made. In particular, such a device may consist of a tube closed at one end and filled with liquid metal, and the other end is inside a container filled with a large quantity of molten metal. In this case, the impurity concentration in the metal at the end of the tube contacting with the reservoir remains essentially constant. The calculated relative changes in the concentration of impurities C_i/C_0 (C_0 , C_i - initial and final contents of the impurity element) at the first two centimeters of ten-centimeter-long tube under an electric field of $E = 0.1$ V/cm depending on the time of electrotransport are shown in Table 3 [5].

Table 3.

The relative concentration of impurities (C_i/C_0) under electrotransport

System: metal – impurity element	U/D, B ⁻¹	C_i/C_0 at the first two centimeters of the tube			
		1 day	5 days	10 days	∞
Cd-Ni, Co, Ag, Au	23	$9.4 \cdot 10^{-4}$	$2.2 \cdot 10^{-9}$	$2.2 \cdot 10^{-9}$	$2.2 \cdot 10^{-9}$
In-Ni, Co, Te, Ag	14	0.036	$6.9 \cdot 10^{-6}$	$6.9 \cdot 10^{-6}$	$6.9 \cdot 10^{-6}$
Sn-Ni, Co, Ag, Au	12	0.068	$6.4 \cdot 10^{-5}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$
Pb-Co, Te, Ag, Au	1.9	0.53	0.14	0.053	0.037

It is seen from Table 3 that all dissolved metals at $U/D > 12$ should be well removed after 5 days of electrotransport. However, it is valid under the conditions that there is no convective motion of the melt and no interaction of the refined metal with tube material. In real conditions, the use of long capillary cells proved to be highly effective for deep cleaning of small amounts of a number of liquid metals (e.g., gallium, cadmium, zinc). This process was studied most fully as applied to gallium [4]. The purest gallium ($R_{res} = 100000$) was currently produced just by the method of electrotransport.

The main limitation for the widespread application of electrotransport for refinement of liquid metals is the low productivity (~0.5 g/day for a single cell). You can improve performance if soak the porous medium or a group of capillaries by the liquid metal and apply a large current to a system. Description of the devices for deep cleaning liquid metals by electrotransport is given in [4,32,33].

COMBINATION OF ZONE MELTING WITH ELECTROTRANSPORT (ZMET)

Electrotransport phenomenon in liquid metals can be used to improve the efficiency of zone purification. Unlike conventional zone recrystallization of metals, during ZMET the direct electric current of certain strength is applied to refining sample. Migration of impurity ions under an electric field occurs in the liquid zone, although not excluded that appreciable electrotransport of impurities can be observed in the rest (solid) part of the sample at high current densities and long duration of process.

It is assumed in the theory of zone recrystallization [34] that there is the diffusion layer of thickness δ , enriched (or depleted) by impurities in a liquid at the boundary to the solid phase (liq - sol). If you apply a direct electric current to

the interface, then the effect of electrotransport within the fixed boundary layer contributes to the overall flow of impurities.

Character of changes in effective distribution coefficient under the influence of electric field was considered by Pfann and Wagner [35]. In the absence of electric field the effective distribution coefficient is described by the expression [34]

$$K = \frac{1}{1 + \left(\frac{1}{K_0} - 1 \right) \exp\left(-\frac{v\sigma}{D} \right)}, \quad (12)$$

where K_0 is the equilibrium distribution coefficient; D is the impurity diffusion coefficient in a liquid phase; δ is the thickness of diffusion layer in a fluid at the interface; v is the speed of crystallization front. If DC which creates movement of ions dissolved at the interface and applies to the interface (liq - sol), the equation (12) takes the form

$$K = \frac{1 - v'/v}{1 + \left[\frac{1}{K_0} (1 + v'/v) - 1 \right] \exp\left[-\frac{v\sigma}{D} (1 + v'/v) \right]}. \quad (13)$$

In this equation, notation K_0 , D , δ , v are the same as in equation (12); $v' = \Delta UE$ is the speed of impurity ions motion; E is the electric field; ΔU is the difference between mobility of ions and impurity ions of the refined metal.

As can be seen from equation (13), the effective distribution coefficient is determined mainly by two flows of impurities: one flow leads to ousting of impurities by advancing crystallization front (which is proportional to v , difference $1 - K_0$ and concentration), the other flow is caused by electrotransport (which is proportional to v' and concentration). It may coincide with the first flow or have an opposite direction depending on the direction of the electric field. If $v' > 0$ (flow of impurity ions is directed from the liquid to the boundary), the electric field increases K , if $v' < 0$, the electric field decreases the K . It concerns both to the case $K_0 < 1$, and the case $K_0 > 1$.

Under the influence of an electric field, the effective distribution coefficient K can be changed, that in principle allows obtaining the following results:

- 1) K factor close to unity, can be changed so that it would be significantly different from unity, and thereby the efficiency of the zone melting can be increased;
- 2) impurity elements coefficients of different «sign» ($K > 1$) and ($K < 1$) can be modified so that they will be either greater or less than unity, and this allows to concentrate impurity elements in one end of the ingot;
- 3) the coefficient K can be made close to unity and eliminate segregation of impurities along the ingot.

It should be noted that the derivation of equation (13) does not include a number of other effects at the interface of liq-sol that may affect the magnitude of K , in particular a Peltier effect which is the release (or absorption) of additional heat at the boundary liq-sol. Since electric current applies to the liq-sol and sol-liq boundaries in the liquid zone, the value of Peltier heat is doubled, and an additional temperature gradient, caused by the heating of one phase boundary and cooling of another, is arisen in the liquid phase. Due to this, an additional impurity flow, caused by diffusion under a thermal gradient field, arises in liquid zone and increases or decreases "zone effect" of purification degree in depending on the direction of the electric field [6].

The mechanism of metal purification by ZMET method was studied insufficiently, although the positive influence of the electric field was noted by many researchers. Improvement of purification by ZMET method compared with the conventional floating-zone melting may result from combined action of various factors: electrotransport in stationary diffusion layer; electrotransport in the solid phase; improving conditions of zone refining by reducing the thickness of the diffusion layer as a result of thermal and magnetohydrodynamic convection; Peltier effect leading to change in K for impurities especially at low current densities.

Apparently, one of the first studies on the use of ZPEP was the work on refining tungsten [36]. Results of tungsten purification by ZMET are shown in Fig. 4.

As seen from Fig. 4, application of an electric field improves the refining of tungsten in comparison with zone melting without field. Moreover, a positive purification effect increases with increasing electric field intensity. ZMET was used for refining beryllium [37], molybdenum [38], ruthenium, rhenium [23,39,40] Os [41], niobium [42], yttrium, cerium, lanthanum, [43], and other metals [44-46].

Performed researches made it possible to reveal a number of features of refining by zone melting method combined with electrotransport. First, redistribution of impurities caused by electrotransport prevails over impurity flow due to the effect of zone recrystallization. A similar effect is observed for almost all metals when cleaning them by ZMET. For many refractory metals (W, Mo, Re, Ru, Os), most impurity elements have $Z_{\text{eff}} < 0$ and migrate towards the anode. In most cases, a maximum purification effect is achieved when the electric field is opposite to the direction of floating zone movement. As an example, Fig. 5 shows the results of refining rhenium by ZMET.

It is seen from the Fig. 5 that the maximum redistribution of impurities along the length of the ingot is achieved, when the electric field is opposite to the movement direction of the floating zone (curve 1). When the directions of electric field coincide with zone movement, the redistribution of impurity elements along the ingot has the opposite

character (curve 3). Table 4 shows the comparative measurement results of ruthenium R_{res} after zone melting without electric field, and under electric fields of different directions relative to the zone movement. It can be seen (Table 4) that the highest degree of purification achieved in that case where zone melting is performed under an electric field whose direction is opposite to the movement zone.

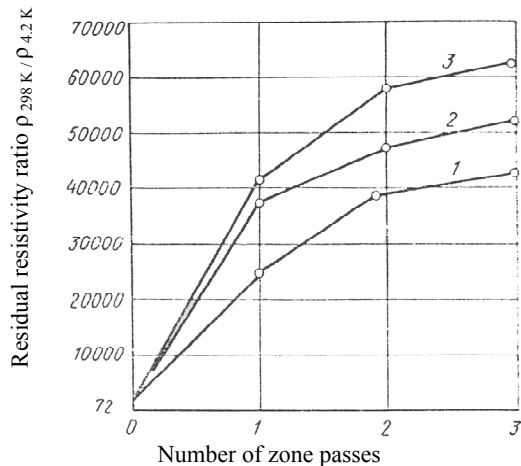


Fig. 4. Changing in R_{res} of tungsten depending on the number of zone's runs through the sample during ZMET [36]. 1 - $E = 0$; 2 - $E = 0.125$ V/cm, 3 - $E = 0.260$ V/cm; zone moving speed is 2.5 mm/min; the directions of field and zone movement are opposite.

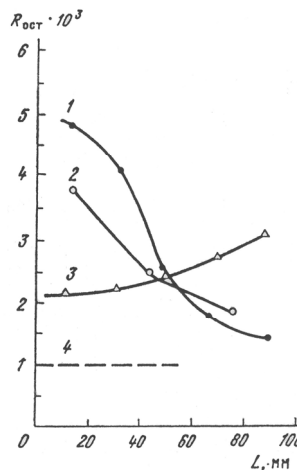


Fig. 5. R_{res} change along the length L of rhenium single crystals after 10 runs of the zone without an electric field and under an electric field of different direction [40].

1 - ZMET, field is opposite to zone movement; 2 - floating zone melting without a field; 3 - ZMET, field coincides with the direction of zone motion; 4 - melting in vacuum.

Table 4.

Effect of the electric field on the degree of Ru purification ($E = 0.15$ V/cm; $I = 1200$ A/cm²; $V = 3$ mm/min)

Kind of process	R_{ocm}		
	Starting part of sample	Middle	End part of sample
Zone melting (10 runs)	1300	1000	900
Zone melting + field $E \uparrow \uparrow V$	1080	1100	1260
Zone melting + field $E \uparrow \downarrow V$	2000	1600	650

Os refining by zone melting in combination with electrotransport eliminates nonmonotonic distribution of impurity elements, which observed in osmium sample during refining by zone melting in the absence of the field (Fig.6).

Apparently, this is primarily due to the change in carbon effective distribution coefficient K which for zone melting without a field has $K > 1$, and for zone melting in combination with electrotransport it acquires value $K < 1$.

For refractory metals most of substitutional impurities have $Z_{eff} < 0$ and migrate towards the anode. However, interstitial impurities (O, N, H, C) can have both positive and negative values of the effective charges and their influence on the process of metals purification in some cases can be decisive. For example, when refining molybdenum by ZMET, then Z_{eff} for carbon and hydrogen has negative values, and for the oxygen and hydrogen – positive ones. According to estimates, the admixture of tungsten in molybdenum also has $Z_{eff} > 0$. As a result, the distribution of impurity elements in molybdenum may vary substantially in dependence on the direction of the field (Fig. 7).

The complicated character of changes in magnitude of R_{res} is observed also in niobium during ZMET [42]. According to the authors of [42] for oxygen and carbon at the melting point of niobium the values of effective charges are near zero, and for nitrogen $Z_{eff} = +1.7$. As a result, the average areas of niobium crystals are the most pure ($R_{res} \sim 2600$), if the directions of electric field and zone movement coincide. The authors also noted that under the influence of electric field the structural perfection of niobium single crystals is improved, too.

Thus, at the refining of metals by ZMET, the character of impurity distribution along the ingot will depend on both direction of the electric field and qualitative and quantitative content of impurities in the source metal.

Investigations of refining Mo, Re, Ru, Os and other metals by means of zone melting and zone melting in combination with electrotransport allowed developing a new way of deep refining of refractory metals, in which the increase of the metals purity is achieved by intensification of evaporation, band separation and electrotransport. Refining process was carried out in two stages. In the first stage, a zone melting in combination with electrotransport was performed at the highest possible current densities and high speeds of liquid zone movement. As a result of

intensive mixing of liquid zone, the effective removal of volatile impurities was achieved due to their evaporation. In the second stage, the refining was carried out for parameters which have been by 5-10 times lower than initial values. In this case, the mechanism of impurities separation along the ingot length is realized most fully due to optimizing the values of K .

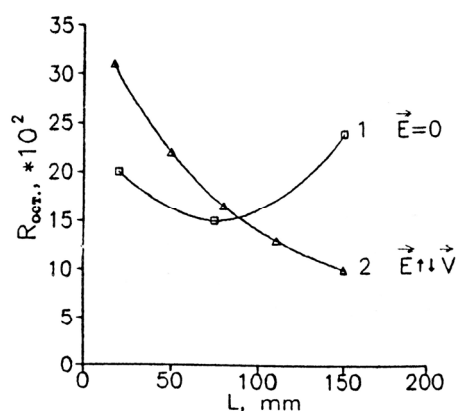


Fig. 6. The change in R_{res} along the length L of osmium specimens
1 - after zone melting, 2 - zone melting in combination with electrotransport [41].

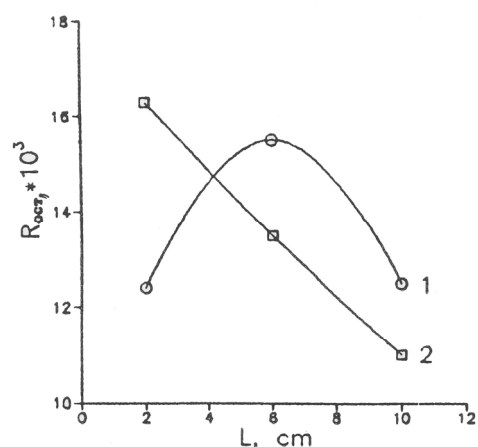


Fig. 7. Change in R_{res} along the length L of molybdenum single crystals after 6 runs of floating zone during ZMET [38];
1 - the field coincides with the direction of zone movement; 2 - the field is opposite to zone movement; zone movement speed is 4.5 mm/min; the field strength is 0.15 V/cm.

As a result, in a series of refining of refractory metals in the most favorable scenario there is a combination of complex of physical refining methods: evaporation, zone separation of impurities, electrotransport. The proposed method not only improves the purity of metals, but also reduce the refining time by 1.5-2 times. Application of this refinement scheme allowed to get high-purity and structurally perfect single crystals W, Mo, Re, Ru, Os, having the magnitude $R_{res} \geq 70000, 30000, 60000, 4500$ and 3000 respectively.

CONCLUSION

Effect of electric field on the migration of impurity ions is known a comparatively long time, but the use of this method for refining metals is not widespread compared with other refining methods. This is mainly due to the long duration of the refining process and its low productivity. Promising way is the use of electric field during zone recrystallization of metals. Such combination allows you to increase the degree of metals refining, reduce the refining time and, if necessary, to eliminate the heterogeneity of impurity elements in the ingot. To further understand the mechanisms of the electric field effect it is important to determine the correlation between the physicochemical properties of refined metal as well as impurity element and the main electrotransport parameters: migration rate of impurity ion and the direction of its movement. Performing similar research will help to determine the character of the redistribution of impurity elements in the metal under the influence of electric field and increase the efficiency of electrotransport for refining metals.

REFERENCES

1. Fiks V.B. Ionnaya provodimost' v metallakh i poluprovodnikakh. - M.: Nauka, 1969. - 215s.
2. Belashchenko D.K. Yavleniye perenosa v zhydkikh metallakh i poluprovodnikakh. - M.: Atomizdat, 1973. - 400s.
3. Belashchenko D.K. Issledivaniye rasplavov metodom elektroperenosa. - M.: Atomizdat, 1977. - 88s.
4. Mikhajlov V.A., Bogdanova D.D. Elektroperenos v zhydkikh metallakh. - Novosibirsk: Nauka, 1978. - 224s.
5. Belyayev A.I. Fiziko-khimicheskiye osnovy ochistki metallov i poluprovodnikovyykh materialov. - Metallurgiya, 1973, 224s.
6. Tikhinsky G.Ph., Kovtun G.P., Azhazha V.M. Polucheniye sverkhchistyykh redkikh metallov. - M.: Metallurgiya, 1986. - 160s.
7. Verhoeven J.D. Electrotransport as a Means of Purifying Metals // J. Metals. - 1966. - Vol. 18, No.1. - P. 26-31.
8. Lakshman T.S. Electrotransport in metals and alloys // Trans Indian. Inst. Met. - 1975. - Vol. 28. - P. 345-364.
9. Electrotransport and its applications / Ed. V.A. Mikhailov. - Novosibirsk: Nauka, 1982. - P. 144 (in Russian).
10. Heumann T., Dreyer K. Zur Frage der Reinigung fester Metalle mittels Elektrotransport // Z. Metallkunde. - 1977. - Bd. 68, H. 11. - S.729-733.
11. Carlson O.N., Schmidt E.A., Peterson D.T. Purification rare-earth metals be electrotransport // Less-Common Metals. - 1975. - Vol. 39, No.2. - P. 277-286.
12. Fort D. Purification of rare earth metals // Purification Process and Characterization of Ultra High Purity Metals. Series: Springer Series in Materials Processing (Eds.: Waseda, Yoshio, Isshiri, Minora). - 2002. - XIV. - P.145-177.
13. Schmidt F.A., Carlson O.N. Electrotransport of carbon, nitrogen and oxygen in scandium // J. Less-Common Met. - 1976. - Vol. 50, No. 2. - P. 237-244.
14. Carlson O.N., Schmidt F.A. Electrotransport of solutes in rare earth metals // J. Less-Common Met. - 1977. - Vol. 54, No. 1. - P.73-84.

15. Jordan R.G., Jones D.W. The purification of rare earth metals. Solid state electrotransport processing of terbium // *J. Less-Common Met.* – 1975. – Vol. 42, No. 1. – P. 101-110.
16. Muirhead C.M., Jones D.W. The purification of rare earth metals. Solid state electrotransport processing of praseodymium // *J. Less-Common Met.* – 1976. – Vol. 50, No. 1. – P. 73-83.
17. Volkov V.T., Nikiforova T.V., Ionov A.M., Pustovit A.N., Sikharulidse G.G. Preparation of purity yttrium single by electrotransport. // *J. Less-Common Met.* - 1981. - Vol. 79, No. 2. - P. 199-205.
18. Nikiforova T.V., Volkov V.T. The effect of purity and the materials used for adapters on the purification yttrium by solid state electrotransport // *J. Less-Common Met.* – 1986. – Vol. 115, No. 1. – P. 91-95.
19. Ionov A.M., Volkov V.T., Nikiforova T.V. Behaviour of interstitial impurities on the surface of yttrium during solid state electrotransport: Auger studies // *Journal of Alloys and Compounds.* – 1995, No. 223. – P. 91-96.
20. Fort D., Pechrsky V.k., Gschneidner K.A. Solid state electrotransport purification of dysprosium // *Journal of Alloys and Compounds.* – 1995, No. 226. – P. 190-196.
21. Isshiki M. Purification of rare earth metals // *Vacuum.* – 1996. – Vol. 47, No. 6-8. – P. 885-887.
22. Carlson O.N., Schmidt F.A., Alexander D.G. Electrotransport Purification and Some Characterization Studies of Vanadium Metal // *Metall. Trans.* – 1972. – Vol. 3, No. 5. – P. 1249-1254.
23. Azhazha V.M., Kovtun G.Ph., Tihinsky G.Ph. Polucheniye i metallofizika osobo chistyykh metallov // *Metallofizika i novejskiye tehnologii.* – 2000. – Vol. 22. – S. 21-35.
24. Schmidt F.A., Carlson O.N. Electrotransport of carbon in niobium and tantalum // *J. Less-Common Met.* – 1972. – Vol. 26. – P.247-253.
25. Fromm E., Kirchheim R., Mathuni J. Change of electrotransport-direction with increasing temperature in the niobium-oxygen system // *J. Less-Common Met.* – 1975. – Vol. 43, No. 1. – P. 211-215.
26. Schmidt F.A., Carlson O.N. Electrotransport of carbon in molybdenum and uranium // *Metallurgical Transaction.* – 1976. – Vol.7, No.1. – P. 127-132.
27. Zee R.H., Carpenter G.J.C., Schmidt F.A. Purification of zirconium by electrotransport processing // *Scripta Metallurgica.* – 1984. – Vol. 18, No. 5. – P. 489-493.
28. Kekesi T., Isshiki M. Principles of Metal Purification and Purity Evaluation // In book “Purification Process and Characterization of Ultra High Purity Metals”. Series: Springer Series in Materials Processing (Eds.: Waseda, Yoshio, Isshiki, Minora). – 2002. – XIV. – P. 39-69.
29. Carlson O.N., Weins W.N., Schmidt F.A. Diffusion and electrotransport of metallic solutes in thorium metal // *Trans. of American Nuclear Society.* – 1977. – Vol. 27. – P. 286-287.
30. Okafor I.C. Diffusion and electrotransport of some transition element in β -thorium // *Acta Metallurgica.* – 1987. – Vol. 35, No.3. – P. 759-764.
31. Kuroda K., Matsuyama K., Kato K., Fujisawa T., Yamauchi C. Influence of precipitation of graphite and precipitated cementite solid state electrotransport of carbon in γ -iron // *J. Japan Institute of Metals.* – 1996. – Vol. 60, No.5. – P. 446-451.
32. Lopatina E.A., Belashchenko D.K., Krutovsky E.P., Gushchina E.I. Elektroprenos pripesey redkikh metallov v zhydkom galii // *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Metally.* – 1977. – No.2. – S. 112-117.
33. Mikhailov V.A., Shchukin L.I., Drakin S.I. et al. Konvektivnoye peremeshyvaniye pri elektroprenose v rasplavlennykh provolochnykh obraztsakh indiya i galliya, uderzhivayemykh oksudnoy plynkoy // *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Metally.* – 1985. – No. 4. – S. 42-45.
34. Pfann V. Zonnaya plavka. – M.: Mir, 1970. – 361s.
35. Pfann V.G., Wagner R.S. In the book *Zone melting* ed. Vigdorovich V.N. – M.: Metallurgiya, 1966. – P. 95-109 (in Russian).
36. Hay D.R., Scala E. Zone-Rifining Tungsten in the Presence of a Superimposed Direct Current // *Trans. Met. Sos. AIME.* – 1965. – Vol. 233, No.6. – P. 1153-1155.
37. Grinyuk V.N., Papirov I.I., Tikhinsky G.Ph., Dyakov I.G. // *Izvestiya AN SSSR, Metally.* – 1967. – No. 4. – S. 77-84.
38. Kovtun G.P., Elensky V.A., Shcherban' A.P., Tomskaya L.A., Voronina L.N., Kramskaya T.A. Rafinirovaniye molibdena zonnou plavkoi v elektricheskom pole // *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. "Obshchaya i yadernaya fizika".* – 1984. – Vyp. 1 (26). – S. 55-57.
39. Azhazha V.M., Kovtun G.P., Elensky V.A., Volkenshtein N.V., Startsev V.E., Cherepanov V.I. Temperaturnaya zavisimost' elektrosoprotivleniya monokristallov ruteniya vysokoi chistoty, poluchennykh zonnou plavkoi v elektricheskom pole // *FMM.* – 1976. – T. 41. – Vyp. 4. – S. 888-890.
40. Zelensky V.Ph., Tikhinsky G.Ph., Azhazha V.M. Polucheniye ocobochistyykh redkikh i redkozemel'nykh metallov i nekotorye ikh svoistva // *Vysokochistye veshchestva.* – 1994. – No. 3. – S. 66-75.
41. Kovtun G.P., Elensky V.A., Tomskaya L.A., Karlina Z.G., Saenko E.M. Poluchenie monokristallov osmiya i nekotorye ikh svoistva // *Vysokochistye i monokrystallicheskie materialy.* – M.: Nauka. – 1987. – S. 61-67.
42. Malang E.U., Oglesby C. S., Siegrist T., Bucher E. Purification and single growth of niobium by combined zone refining and electrotransport // *Physica B.* – 1995. – No. 204. – P. 363-366.
43. Azhazha V.M., Vyugov P.N., Lavrinenko S.D., Pavlov V.S., Pylipenko N.N., Tikhinsky G.Ph. Rafinirovaniye redkozemel'nykh metallov fizicheskimi metodami // *Vysokochistye veshchestva.* – 1993. – No. 2. – S. 5-12.
44. Murphy J.E., Wong M.M. Purification of yttrium by zone refining and filed freezing // *J. Less-Common Met.* – 1975. – Vol. 40, No. 1. – P. 65-77.
45. King C.A., Brown S.V. The combination of electrotransport and zone refining techniques for the growth and purification of metallic crystals // *Review of Scientific Instruments.* – 1992. – Vol. 63, No. 5. – P. 3185-3187.
46. Dost S., Liu Y.C., Haas J., Roszmann J., Grenier S., Audet N. Effect of applied electric current on impurity transport in zone refining // *Crystal Growth.* – 2007. – No. 307. – P. 211-218.

PACS: 71.55.-i, 71.55.Gs, 72.20.-i, 72.20.Jv

EFFECT OF IRRADIATION ON PROPERTIES OF CdTe DETECTORS**A.I. Kondrik***National Science Center «Kharkov Institute of Physics and Technology»**1, Academicheskaya str., Kharkov, 61108, Ukraine**E-mail: kondrik@kipt.kharkov.ua**Received February 7, 2014*

A comparative analysis of published experimental data about the concentration, capture cross section and type of traps in CdTe: Cl has been carried out. Based on the performed analysis an identification of registered levels on acceptor and donor type was realized. The numerical simulations have been performed to study the effect of radiation defects arising under the influence of hard X-ray irradiation on the electrical and detector properties of cadmium telluride. The role of radiation-induced and background defects has been determined for the processes of degradation of the spectroscopic characteristics of CdTe:Cl detectors operated under conditions of ionizing radiation.

KEYWORDS: detectors, radiation-induced defects, simulation, CdTe**ВПЛИВ ОПРОМІНЕННЯ НА ВЛАСТИВОСТІ CdTe ДЕТЕКТОРІВ****О.І. Кондрік***Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»**вул. Академічна 1, 61108 Харків, Україна*

Проведено порівняльний аналіз опублікованих експериментальних даних про концентрацію, переріз захвату і тип пасток в CdTe:Cl. На основі аналізу здійснена ідентифікація зареєстрованих рівнів по акцепторному та донорам типу. Методом чисельного моделювання виконано дослідження впливу радіаційних дефектів, які виникли під дією жорсткого рентгенівського опромінення, на електрофізичні та детекторні властивості телуриду кадмію. Визначена роль радіаційних і фонових дефектів у процесах деградації спектроскопічних характеристик CdTe:Cl, що експлуатуються в умовах іонізуючих випромінювань.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: детектори, радіаційні дефекти, моделювання, CdTe**ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА CdTe ДЕТЕКТОРОВ****А.И. Кондрік***Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»**ул. Академическая 1, 61108 Харьков, Украина*

Проведен сравнительный анализ опубликованных экспериментальных данных о концентрации, сечении захвата и типе ловушек в CdTe:Cl. На основе анализа осуществлена идентификация зарегистрированных уровней по акцепторному и донорному типу. Методом численного моделирования выполнено исследование влияния радиационных дефектов, возникших под воздействием жесткого рентгеновского облучения, на электрофизические и детекторные свойства теллурида кадмия. Определена роль радиационных и фоновых дефектов в процессах деградации спектроскопических характеристик CdTe:Cl, эксплуатируемых в условиях ионизирующих излучений.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: детекторы, радиационные дефекты, моделирование, CdTe

The primary requirements to the materials of the detector used in spectroscopy of high energy ionizing radiation are the high resistivity and low concentration of free carriers traps. Detectors of gamma and X-ray radiation based on CdTe and $Cd_{1-x}Zn_xTe$ usually work in hostile radiation environment. Thus arisen electrically active radiation defects make an appreciable impact on the conditions of compensation which determines the resistivity and processes of carrier capture by deep levels. Under the influence of radiation exposure the energy resolution deteriorates also, and peaks positions shift in spectra, the leakage current increases, and such important parameter as charge collection efficiency degrades. Irradiation of CdTe with X-ray flux of high intensity, used to enhance the detector performance in imaging application, can cause a significant polarization of the semiconductor and failure of the device structure [1, 2]. To control performance of detectors it is necessary to get accurate quantitative data on deep levels in CdZnTe. In a number of works the parameters of levels defined by the producing conditions of detector materials as well as radiation defects arising under the influence of radiations during operation were investigated, and the effect of these levels on the transport properties of CdTe and CdZnTe was studied also [2–11].

Due to high specific resistance of material the determination of deep levels concentration in it traditionally encounters great difficulties, and, as it was shown from the analyses of published papers, a discrepancy in measurements can be two or three orders of magnitude. Besides, there are some differences in measurements of positions of the energy levels in the band gap. It is impossible to guarantee also that in a material all levels defining parameters of the detector are correctly identified. There is a free-answer question about the specific causes of degradation of registering properties of detector under the influence of ionizing radiation. In this regard it is expedient to apply additional methods of computer simulation to investigate the dependence of required electrophysical properties and detector characteristics of CdTe on the parameters of the levels measured experimentally in materials which were exposed to irradiation.

The aim of this work was through modeling method to establish a correlation between the characteristics of the

CdTe: Cl detector and defects which experimentally registered in unirradiated material as well as in one irradiated with X-ray. The correlation was carried out for real operation condition of the detector.

MODEL AND INITIAL DATA

The models and a computer program described in [12] were used for quantitative simulation of electrophysical and detector properties of CdTe and CdZnTe. The basis for the program are the well-tested models of compensation, electron scattering in relaxation time approximation, statistics and Shockley-Read, Hecht equation, that compute values of resistivity, electron mobility, lifetime of nonequilibrium charge carriers and charge collection efficiency for initial and irradiated detector material.

The concentrations of electrically active deep and shallow levels in CdTe:Cl before and after its X-ray irradiation with the dose of 260 kGy have been measured in [2]. The sample CdTe:Cl was grown by traveling heater method, and its resistivity was $2 \cdot 10^9$ ohm·cm. To obtain reliable data about the concentration of deep centers in such high-resistivity material, it was carried out a comparison of the results of two mutually complementary techniques: photo induced current transient spectroscopy [13] and space charge limited current analyses [3]. This material and results of its properties measurements were taken in this paper as a pattern to study the influence of X-ray irradiation on the detector characteristics of CdTe:Cl.

Problem of the identification of defects and related deep and shallow levels in CdTe and CdZnTe was discussed in several papers [9,12,14–19]. It was considered proven that the energy interval from the valence band top E_V of the concrete level is the same in CdTe as in CdZnTe. Difficulties arose not only during correct determination of the concentration but also at identifying recorded levels, and sometimes even the acceptor or donor type of defect was unknown. The capture of electrons or holes by the same level in different materials depends on the degree of filling or ionization that is determined by the position of Fermi level. In turn, the Fermi level depends on the temperature, the ratio between the concentrations of technology defects and the doping level, and for CdZnTe it depends on the molar fraction of the zinc. On the other hand the strict control of composition in the technology of high-resistivity cadmium telluride production is very difficult.

By comparing the results of the experiments described in [2, 14 –18], the work has been carried out to determine the composition and characteristics of levels in CdTe:Cl, both for the unirradiated material and irradiated with X-ray. The analysis was performed with use of approach expounded in [19] and the result presented in the Table. The levels are assumed to be shallow acceptor (A) or shallow donors (D), if under considered conditions they are completely ionized in contrast to the deep acceptor (DA) or deep donor (DD), which are ionized partially. The levels A00, A0, A and A1 are shallow acceptors and relate to the so-called A-centers [20, 21]. Cl dopant forms a level of shallow donor, located below the bottom of the conduction band at 0.014 eV. The belonging of other levels still remains a subject for debate. A1 and Z are the radiation-induced levels of defects, and they appear only after irradiation.

Table.

Defect level parameters measured in CdTe:Cl

Level*	Energy, measured from the valence E_V or conduction band E_C , eV	Concentration of levels, cm^{-3}		Capture cross-section, cm^{-2}	Type of level** and its charge state
		Initial	Irradiated with the dose of 260 kGy		
A00	$E_V + 0.06$	$2.6 \cdot 10^{12}$	$2.6 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-16}$	A^-
A0	$E_V + 0.12$	$2.8 \cdot 10^{12}$	$2.8 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{-16}$	A^-
A	$E_V + 0.15$	$3 \cdot 10^{12}$	$3 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-16}$	A^-
A1	$E_V + 0.16$	0	$1 \cdot 10^{12}$	$4 \cdot 10^{-17}$	A^-
X	$E_V + 0.36$	$3.5 \cdot 10^{11}$	$1 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{-15}$	DA^{2-}
Z	$E_V + 0.47$	0	$3 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-14}$	DA^+
J	$E_V + 0.53$	$4.5 \cdot 10^{11}$	$2.5 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-15}$	DA^-
H	$E_V + 0.76$	$2.4 \cdot 10^{12}$	$6 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{-15}$	DA^-
H1	$E_C - 0.79$	$3 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{13}$	$1.5 \cdot 10^{-15}$	DD^+
I	$E_C - 1.0$	10^{14}	$1.6 \cdot 10^{14}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$	DD^+
Cl	$E_C - 0.014$	$1.2 \cdot 10^{13}$	$1.2 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{-16}$	D^+

* Levels notation was adopted in [2] and other papers

** A – acceptor, DA – deep acceptor, D – shallow donor, DD – deep donor.

RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 1 (curve 1) shows a dependence of calculated resistivity ρ of non-irradiated CdTe:Cl on the concentration of chlorine dopant. The composition of this sample is presented in the table as the initial one. The material keeps p-type conductivity up to a concentration of chlorine Nd (Cl) = $3,3 \cdot 10^{13} cm^{-3}$. At the point of maximum resistivity the hole concentration p_0 exceeds the concentration of free electrons n_0 approximately by order of magnitude: $p_0/n_0 \approx 17$. Specific resistance $\rho = 2 \cdot 10^9$ ohm·cm, measured in [2], corresponds to the chlorine concentration Nd(Cl) = $1,38 \cdot 10^{13} cm^{-3}$

and relation $p_0/n_0 = 440$, that is a good characteristic for the detector material. Curve 2, Fig. 1 shows the dependence of ρ on the concentration of chlorine in the material irradiated with a dose of 260 kGy. Curves 1 and 2 are calculated with taking into account the concentrations and parameters of levels presented in the table. Curve 3 corresponds to irradiated material which lost detecting properties with the concentration of radiation-induced defect of $N(Z)=3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ (in detail see below). Calculating lifetime of nonequilibrium charge carriers in the sample revealed a value of $\sim 10^{-6}$ sec. The calculated electron mobility equaled to $1100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. These values are in good agreement with well known magnitudes.

Fig. 2 shows the charge collection efficiency, η for charge carriers drifting at different distances d_0 from the anode in non-irradiated CdTe:Cl detector with electrode gap of 5 mm. The vertical dashed line indicates the concentration of Cl in the investigated material. The figure shows that the investigated material is characterized by not a very high efficient collection of charges, but for the greater η the ratio p_0/n_0 decreases and the electron component of dark current properly increases and a signal/background ratio significantly decreases, as the electron mobility $\mu_n = 1100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ is much higher than hole mobility $\mu_p = 70 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

It was shown experimentally that after the X-ray irradiation with dose of 260 kGy the γ -radiation detector significantly loses its registering properties [2]. A complete degradation of the spectroscopic characteristics occurs after the appearance of radiation-induced defect Z [22]. Nevertheless, simulation with measured parameters of irradiated sample shows that the charge collection efficiency is reduced by no more than 10-15% for carriers drifting from all points of the interelectrode gap (Fig. 3). The reason for this could be an inaccuracy in determining the concentration of levels or their incomplete registration in high-resistivity CdTe. Since the loss of the ability to register radiation is associated with Z level, it was interesting to simulate the effect of this level on η .

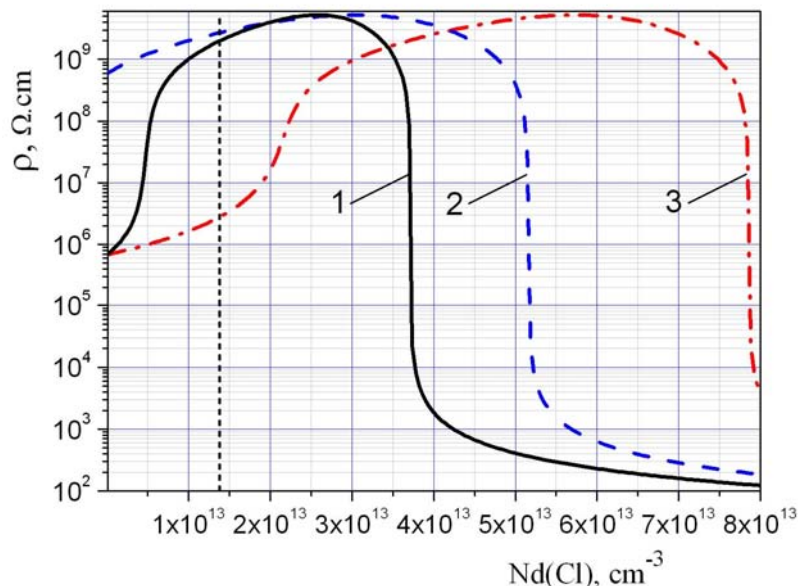


Fig. 1. The dependence of the resistivity of CdTe:Cl on concentration of chlorine dopant.

The vertical dashed line indicates the concentration of Cl dopant in the material; 1 – unirradiated material; 2 – after irradiation with the dose of 260 kGy; 3 – irradiated material which lost detecting properties with the concentration of radiation-induced defect of $N(Z)=3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 3 shows the result of calculating the charges collection efficiency depending on the content of radiation-induced defect Z in irradiated detector with the concentrations of other defects listed in table. Comparing Fig. 2 and Fig. 3, we see that the levels with the measured parameters after exposure lead to a loss of detection efficiency not more than 10 - 15%, whereas total loss of spectroscopic properties occur with the content of defect Z \cdot about $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, i.e. approximately an order of magnitude larger than concentrations measured experimentally. There is a question about the reason for the observed degradation of detecting characteristics. To answer this question it was carried out a calculation of η dependence on the concentration of the chlorine dopant with content of radiation defect Z, equal to $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, when the degradation occurs according to the evaluation. The result of this calculation is shown in Fig. 4. We see that in the investigated sample the collection efficiency of charges decreased at least an order of magnitude. If in modeling program one substitute the defects Z with radiation defects A1 having the same concentration, the dependences in Fig. 4 will change insignificantly. Based on this, as well as on the comparison of Fig. 2-4 it can be concluded that degradation of detector characteristics occurs mainly due to a shift of η dependence on the concentration of chlorine shallow donor. The simulation showed that the specified shift is proportional to a difference between the concentrations of shallow donors and acceptors.

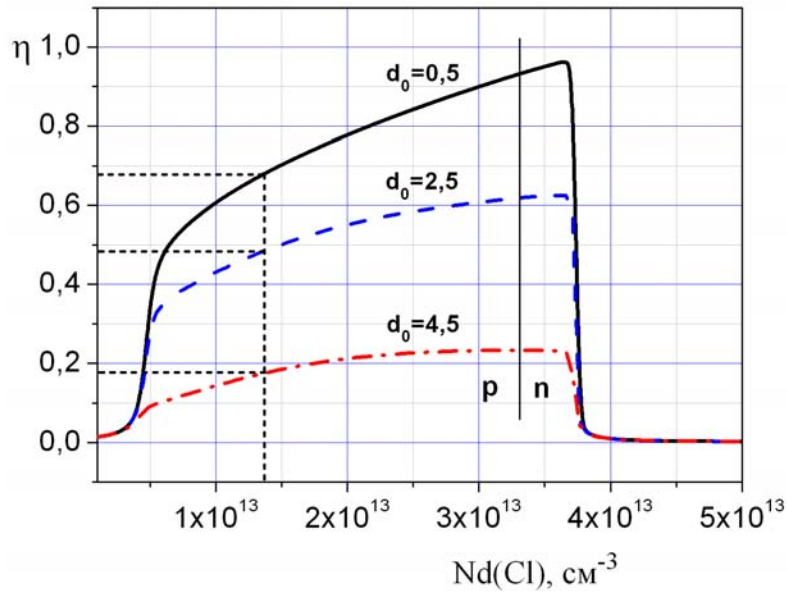


Fig. 2. Charge collection efficiency for carriers drifting from the different distances d_0 from the anode, depending on the concentration of chlorine in the unirradiated detector CdTe:Cl. The vertical dashed line shows the investigated sample.

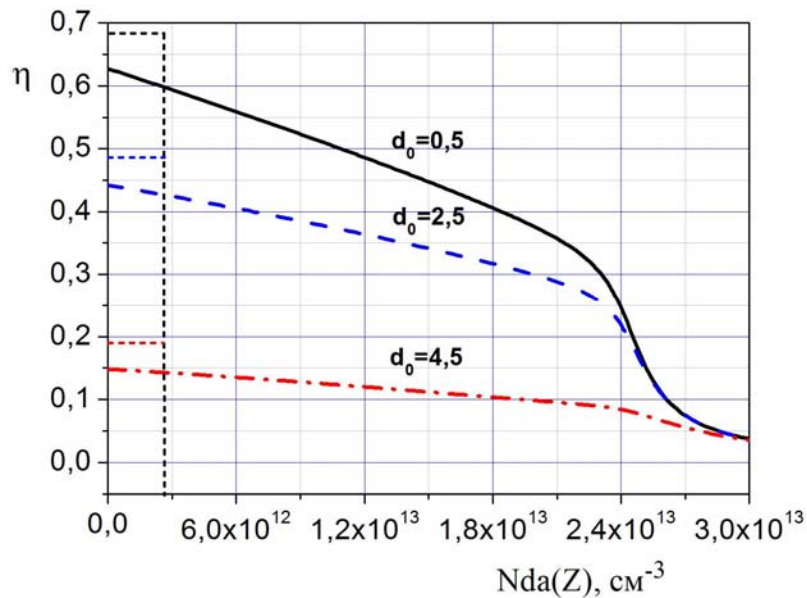


Fig. 3. Charge collection efficiency in irradiated CdTe:Cl detector, depending on the concentration of radiation defects Z for charges drifting from different distances d_0 from the anode.

The horizontal dashed lines represent η of unirradiated detector, and the vertical line marks the measured concentration of Z.

Returning to Fig. 1 and comparing the curves 1 and 2, we see that for measured parameters of the irradiated material the resistivity even increased compared with ρ of non-irradiated CdTe:Cl. Curve 3 in Fig. 1 was calculated for the concentration of defect Z, equal to $3 \cdot 10^{13} cm^{-3}$, i.e., for the case where according to the calculations there is a complete loss of the detector performance. It can be seen that the reduction of resistivity ρ by about three orders of magnitude takes place, besides the significant decrease of η , which leads to further deterioration in the registering characteristics of the detector. For this case, the calculated value of the lifetime of nonequilibrium charge carriers in the irradiated sample under investigation decreased for electrons approximately by two orders of magnitude ($\tau_e \approx 2 \cdot 10^{-8}$ sec) and for holes — three orders of magnitude ($\tau_p \sim 10^{-9}$ sec). In this case the value of electron mobility after irradiation hardly changed. Fermi level for the irradiated material is situated at the value of $E_V + 0.55$ eV, which is close to the position of level Z, as well as of level J, the concentration of which increased significantly after irradiation (Fig. 5). Thus, the capture of free charge carriers at deep levels of radiation-induced Z and J, as well as a significant decrease in resistivity go a long way in the deterioration or significant degradation of the registering properties in the irradiated CdTe:Cl detector due to lowering of Fermi level.

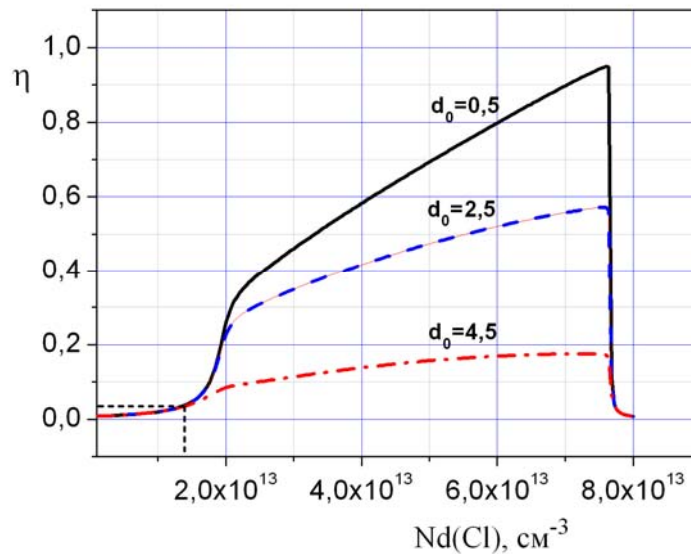


Fig. 4. Charge collection efficiency as a function of the content of chlorine dopant in the detector after X-ray irradiation with the dose of 260 kGy at a concentration of radiation defect Z , equal to $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. The vertical and horizontal dashed lines indicate, respectively, the concentration of Cl and collection efficiency η in the studied detector.

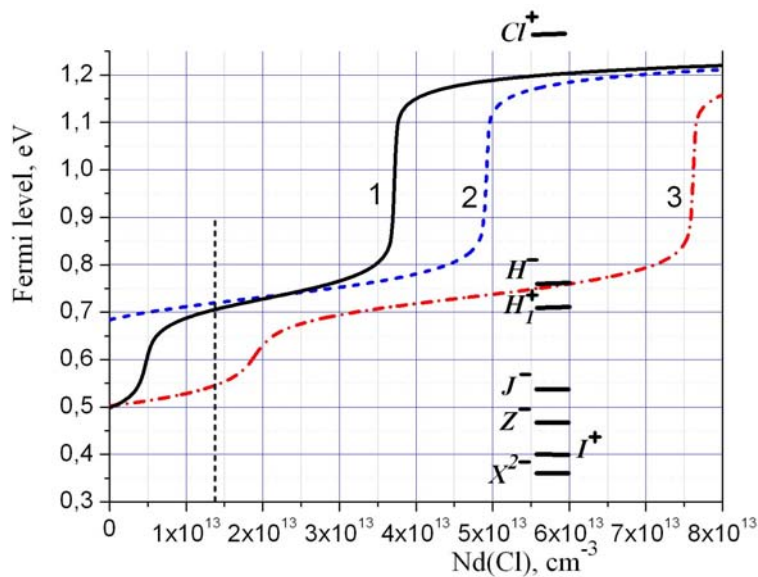


Fig. 5. The behavior of the Fermi level in the CdTe:Cl, depending on the concentration of the dopant; 1 – unirradiated material, 2 – irradiated CdTe:Cl with measured parameters of levels; 3 – irradiated CdTe:Cl with calculated concentration of radiation-induced levels where the detector lost its registering properties.

CONCLUSION

The analysis of published experimental results of measuring characteristics of deep and shallow levels in CdTe:Cl was carried out, and a concrete variant to parametrize the recorded levels was suggested together with determination of their concentrations, capture cross-sections, donor or acceptor types. Proposed parametrization is valid for any CdTe:Cl material having the energy levels as in the table. Accepted parameters of deep levels provide a good agreement of calculated electrophysical properties: resistivity, electron mobility and lifetime of nonequilibrium charge carriers with measured or well known values for the unirradiated material.

The main contribution to the degradation of the detector properties of CdTe:Cl during operating under hard radiation exposure gives a reduction in the resistivity by three orders of magnitude, as well as the capture of free charge carriers at the radiation-induced levels Z and J allocating above the valence band by 0.47 and 0.53 eV, respectively. Average drift time of nonequilibrium charge carriers in detector before their capture at these levels decreases for electrons by two orders and for holes - three orders of magnitude.

For significant degradation of registering properties of CdTe:Cl detector the concentration of J and Z defects plus the total concentration of shallow acceptors or the difference between the total concentration of ionized acceptors and

donors should be approximately an order of magnitude more than the experimentally measured values.

REFERENCES

1. Derek S. Bale, Csaba Szeles Nature of polarization in wide-bandgap semiconductor detectors under high-flux irradiation: Application to semi-insulating $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 77. – Issue 3. – P. 035205-1–035205-16.
2. Fraboni B., Pasquini L., Castaldini A., Cavallini A., Siffert P. X-ray irradiation effects on the trapping properties of $Cd_{1-x}Zn_xTe$ detectors // *Journal of Applied Physics*. – Vol. 106. – 2009, No.9. – P. 093713.
3. Fraboni B., Cavalcoli D., Cavallini A., and Fochuck P. Electrical activity of deep traps in high resistivity CdTe: Spectroscopic characterization // *Journal of Applied Physics*. – 2009. – Vol. 105. – P. 073705–6.
4. Babentsov V., Franc J., James R.B. Compensation and carrier trapping in indium-doped CdTe: Contributions from an important near-mid-gap donor // *Applied Phys. Letters* Vol. 94.– 2009. – P. 052102.
5. Carini G.A., Bolotnikov A.E., Camarda G.S. Effect of Te precipitates on the performance of CdZnTe detectors // *Applied Physics Letters*.– 2006. – Vol. 88. – P.143515-1 – 143515-3
6. Gul R., Keeter K., Rodriguez R., Bolotnikov A.E. at al. Point defects in Pb-, Bi-, and In-doped CdZnTe detectors: deep-level transient spectroscopy (DLTS) measurements // *Journal of Electronic Materials*. – 2012. – Vol. 41, No. 3. – P. 488-493.
7. Cavallini A., Fraboni B. Defective states induced in CdTe and CdZnTe detectors by high and low energy neutron irradiation // *Journal of Applied Physics*. – 2003. – Vol. 94, No.5. –P. 3135-3142.
8. Belas E., Grill R., Franc J., Hlídaek, P. Linhart V., Slavíček T., Höschl P. Correlation of electrical and optical properties with charge collection efficiency of In-doped and In+Si co-doped CdTe // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. – 2008. – Vol. 591. - Issue 1. - P. 200–202.
9. Gul R., Bolotnikov A., Kim H.K., Rodriguez R., Keeter K., Li Z., Gu G., James R.B. Point Defects in CdZnTe Crystals Grown by Different Techniques // *Journal of Electronic Materials*. – 2011. – Vol. 40, No. 3. – P. 274–279.
10. Cavallini A., Fraboni B., Dusi W., Zanzarini M., Hage-Ali M., Siffert P. Defects introduced in cadmium telluride by γ irradiation // *Journal of Applied Physics*. – 2001. – Vol. 89, No. 8. – P. 4664–4666.
11. Fraboni B., Cavallini A., Auricchio N., Dusi W., Zanzarini M., Siffert P. Time and thermal recovery of irradiated CdZnTe detectors // *Semiconductor Science and Technology*. - 2006. - Vol. 21.– No.3. – P. 1034-1040.
12. Kondrik A.I. Modelirovanie svoystv CdZnTe i parametrov detektorov γ -izlucheniya na ego osnove // *Tekhnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparature*. – 2004. – No.6. – S. 17-22.
13. Tapiero M., Benjelloun N., Zielinger J.P. Hamd S.E., Noguét C. Photoinduced current transient spectroscopy in high-resistivity bulk materials: Instrumentation and methodology // *Journal of Applied Physics*. – 1988.– Vol. 64. – P.4006-4012.
14. Cavallini A., Frabony B., Dusi W. Compensation processes in CdTe-based compounds // *Nuclear Science, IEEE Transactions*. – 2005. – Vol. 52. – Issue 5. – P.1964-1967.
15. Fraboni B., Cavallini A., Auricchio N., Bianconi M. Deep traps induced by 700 keV protons in CdTe and CdZnTe detectors // *Nuclear Science Symposium Conference Record*. (Oct. 29 – Nov. 1 2006). San Diego, Canada. – IEEE. – 2006. – P. 3594-3597.
16. Hofmann D.M, Stadler W., Christmann P., Meyer B.K. Defects in CdTe and $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. – Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 1996. – Vol. 380. – Issues 1-2. – P. 117-120.
17. Castaldini A., Cavallini A., Fraboni B. Deep energy levels in CdTe and CdZnTe // *Journal of Applied Physics*. – 1998. – Vol. 83, No. 4. – P. 2121-2126.
18. Castaldini A., Cavallini A., Fraboni B., Fernandez P., Piqueras J. Midgap traps related to compensation processes in CdTe alloys // *Phys. Rev. B*. – 1997. – Vol. 56, No. 23. – P. 14897-14900.
19. Kondrik A.I. Effektivnost' sbora zaryadov v datchikakh γ -izlucheniya s razlichnoi konfiguratsiyey elektrodov // *Tekhnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparature*. – 2012. – No.4. – S. 47-51.
20. Stadler W., Hofmann D., Alt H., Muschik T., Meyer B., Weigel E., Mueller-Vogt G., Salk M., Rupp E., Benz K. Optical investigations of defects in $Cd_{1-x}Zn_xTe$ // *Physical Review B*. – 1995.– Vol. 51, No. 16. – P. 10619-10630.
21. Allen J.W. Spectroscopy of lattice defects in tetrahedral II-VI compounds // *Semiconductor Science and Technology*. – 1995.– Vol. 10, No. 8. – P. 1049-1055.
22. Fraboni B., Cavallini A., Dusi W. Damage induced by ionizing radiation on CdZnTe and CdTe detectors // *Nuclear Science, IEEE Transactions*. – 2004. – Vol. 51. – Issue 3. – P. 1209-1215.

PACS: 533.9; 538.311

INFLUENCE OF THE RELATIVISTIC ELECTRON BEAM SPECTRAL CHARACTERISTICS ON THE INSTABILITY DEVELOPMENT PROCESS AT NEAR-LIMITING CURRENT

G.E. Sarukhanian^{*,}, A.M. Gorban^{*,**}**

^{*} National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"
1, Akademicheskaya St., 61108, Kharkov, Ukraine

^{**} V.N.Karazin Kharkov National University
4 Svoboda Sq., 61022, Kharkov, Ukraine

E-mail: gсар000@mail.ru

Received February 7, 2014

The paper presents the results of the numerical research of the influence of spectral characteristics of the relativistic electron beam, restricted by a spatial charge, on the instability development at near-limiting current. The beam system model is described permitting to calculate with minor errors the process characteristics for both narrow and wide electron energy spread in the beam. Instability development phases are defined and their duration is calculated. The dependences of instability development time and virtual cathode steady-state operation on the relativistic electron beam spectrum width are determined.

KEY WORDS: instability development, electron beam, virtual cathode, spectral characteristics, computer simulation

ВПЛИВ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ЕЛЕКТРОННИХ ПУЧКІВ НА ПРОЦЕС РОЗВИТКУ НЕСТІЙКОСТІ ПРИ СТРУМІ БЛИЗЬКОМУ ДО ГРАНИЧНОГО

Г.Е. Саруханян^{*,}, А.М. Горбань^{*,**}**

^{*} Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАНУ
вул. Академічна 1, 61108, Харків, Україна

^{**} Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна
пл. Свободи 4, 61022, Харків, Україна

Представлені результати чисельного дослідження впливу спектральних характеристик релятивістського електронного пучка на розвиток нестійкості при струмі, близьким до граничного, обмеженого просторовим зарядом. Описана модель пучкової системи, що дозволяє з малими похибками розраховувати характеристики процесів, як для малого, так і для великого розкиду енергії електронів в пучку. Виділено фази розвитку нестійкості, визначено їх тривалості. Встановлено залежності часу розвитку нестійкості і характеру усталеного режиму віртуального катода від ширини спектра релятивістського електронного пучка.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: розвиток нестійкості, електронний пучок, віртуальний катод, спектральні характеристики, комп'ютерне моделювання

ВЛИЯНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РЕЛЯТИВИСТСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА НА ПРОЦЕСС РАЗВИТИЯ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ПРИ ТОКЕ БЛИЗКОМ К ПРЕДЕЛЬНОМУ

Г.Э. Саруханян^{*,}, А.М. Горбань^{*,**}**

^{*} Национальный Научный Центр «Харьковский физико-технический институт»
61108, Академическая, 1, г. Харьков, Украина

^{**} Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
61022, Харьков, пл. Свободы 4, Украина

Представлены результаты численного исследования влияния спектральных характеристик релятивистского электронного пучка на развитие неустойчивости при токе, близком к предельному, ограниченному пространственным зарядом. Описана модель пучковой системы, позволяющая с малыми погрешностями рассчитывать характеристики процессов, как для малых, так и для больших разбросов энергии электронов в пучке. Выделены фазы развития неустойчивости, определены их длительности. Установлены зависимости времени развития неустойчивости и характера установившегося режима виртуального катода от ширины спектра релятивистского электронного пучка.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: развитие неустойчивости, электронный пучок, виртуальный катод, спектральные характеристики, компьютерное моделирование

It is well-known that at injection of the current close to some critical value (limit, space-charge limited or, so-called, supercritical current) into the diode gap the Bursian instability arises in the drift gap. The virtual cathode is formed during an instability development [1], which oscillates in the space and reflects electrons backward to the injection plane. The subject of our study is a scenario of the relativistic electron beam instability onset if the beam current is near the limit or slightly exceeds it. Also, the influence of relativistic electron beam spectral characteristics on the instability development, mode and virtual cathode operation parameters are researched. The research on the scenario of instability development in the wide high-current electron beam requires the use of models possessing minor numerical errors for simulation of beams without energy spread, on the one hand, and permitting the adequate simulation of beams with a quite wide energy spread on the other hand. Frequently one uses different models for

simulation of the beam without energy spread and that with a wide energy spread, however, the question arises: which of these models is more adequate?

The aim of this paper is to create a one-dimensional model of the beam system permitting to calculate with minor errors the process characteristics for both the narrow and wide electron energy spread in the beam. This model is the first step to creating a tool for the research on beams in a wide range of electron energies – a three-dimensional model of the beam. The paper is also aimed at numerical research on the electron beam spectrum width influence on the instability development process.

SIMULATION MODEL

As a simulation object we consider the drift area restricted, in the direction of beam propagation, by the grounded electron-transparent planes. In the transverse direction the drift area is not restricted (Fig.1). The electric field is self-consistent, potential one. A continuous injection of 1 MeV electrons into the system is provided. Initial particle pulses obey to the Gauss distribution. The investigated values were relative pulse spread parameter dp / p_0 from 0 to $5 \cdot 10^{-2}$, where p_0 is the average value of the initial particle pulse, dp is the pulse spread.

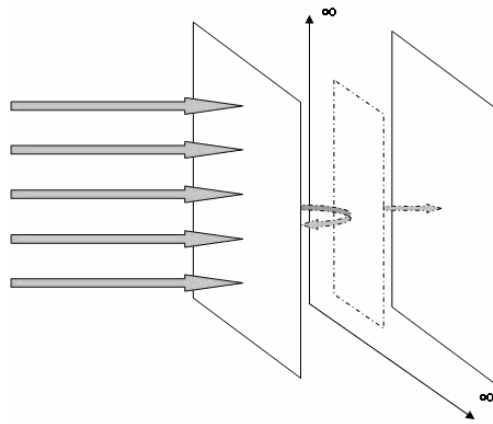


Fig.1. The drift area with an injected beam

The system is described by the equations for the self-consistent potential φ and electric field intensity E

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho, \varphi|_B = 0 \tag{1}$$

$$E = -grad \varphi, \tag{2}$$

and by the electron motion equations

$$\frac{dp}{dt} = qE, p|_{x=0} = f(p_0), \tag{3}$$

where $f(p_0)$ is the statistic pulse distribution function, p is the particle pulse and q is its charge. The equation for x particle coordinates, with taking into account the relativistic correction, has the following form

$$\frac{dx}{dt} = \frac{pc}{\sqrt{p^2 + m^2 c^2}}, \tag{4}$$

where m is the particle mass, c is the velocity of light. So, we have a problem of wide electron beam propagation of $ldlv$ dimension.

For simulation of similar systems as a basic model one widely uses a discrete PIC model for one-dimensional electron plasma, described in the book by R. Hockney "Computer Simulation Using Particles" [2]. Below given are the equations of the discrete model modified for the given problem.

Charge distribution:

$$\rho_p = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^{N_p} q_i W(x_i - x_p), \tag{5}$$

where

$$W(x) = \begin{cases} 1 & \text{at } |x| \leq h/2 \\ 0 & \text{if not} \end{cases} \tag{6}$$

Field equations:

$$\frac{\varphi_{p+1} - 2\varphi_p + \varphi_{p-1}}{H^2} = -\frac{\rho_p}{\varepsilon_0}, \tag{7}$$

$$E_p = \frac{\varphi_{p-1} - \varphi_{p+1}}{2H}. \tag{8}$$

Force interpolation:

$$E_i^n = E(x_i^n) = N_s \sum_{p=0}^{Ng-1} W(x_i^n - x_p) E_p^n. \tag{9}$$

Motion equations:

$$\frac{p_i^{n+1/2} - p_i^{n-1/2}}{dt} = qE(x_i^n), \tag{10}$$

$$\frac{x_i^{n+1} - x_i^n}{dt} = \frac{p_i^{n+1/2} c}{\sqrt{(p_i^{n+1/2})^2 + N_s^2 m_e^2 c^2}}, \tag{11}$$

where N_s is the coefficient for finite-size particles. To avoid significant numerical errors, caused by the charge discrimination and spatial resolution, an average number of particles for 1 mesh point, not less than 250 have been provided in the model. A comprehensive description of the computation model is given in [3]. As a result of the above modifications we succeeded in obtaining the model capable to describe the beam with both near and wide energy spreads.

RESULTS AND DISCUSSION

During of investigations the amplitude of the potential extremum was observed. Fig.2 presents the amplitude of the potential extremum for the beam with an energy spread of 0.01% (a) and 1% (b). Also we observed the fluxes of passing particles (denoted by “+” in Fig.3) and reflected particles (denoted by “-“ in Fig.3) with an energy spread of 0.01% (a) and 1% (b).

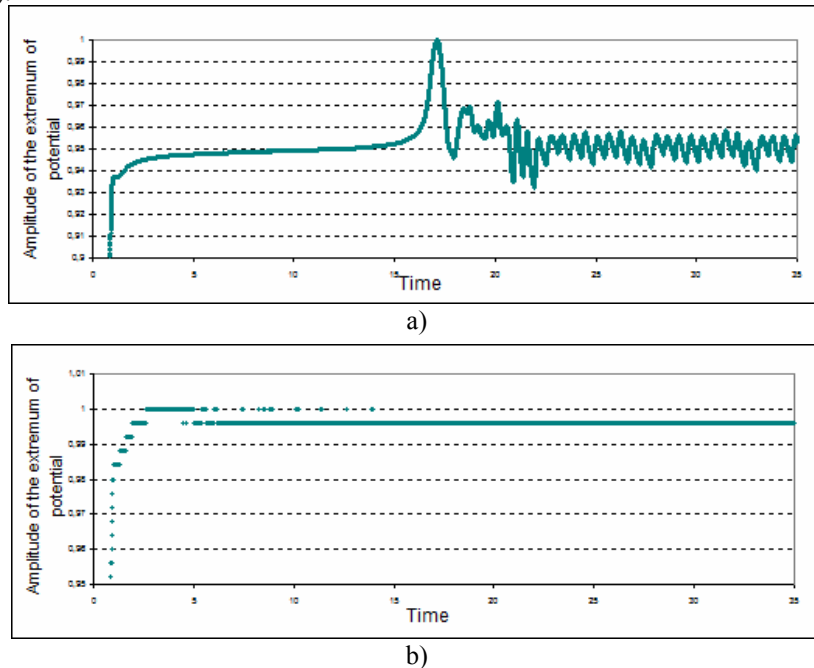


Fig.2. The amplitude of the potential extremum
a) energy spread of 0.01%, b) - 1%

The amplitudes of the extremum are shown in the relative units, for a unit time taken was the time of electron transit through the drift gap with an initial pulse p_0 . From Fig.2a,3a it is seen that the time of instability development and virtual cathode formation exceeds significantly the time of electron transit through the drift gap. Fig.2b,3a show that the energy spread increases when the instability development time decreases appreciably. However, if the current density decreases the instability development time increases, but in this case the energy spread decreases to 0.01% and there is no instability development.

Below in Fig.4 the plots of the particle density in different instants of time before the appearance of the first reflected particles (from 15 to 17 transit times) are shown. From Fig.4 one can see that the instability development begins when the particle density profiles are changing so that their point of extremum displaces towards the beam injection plane and the amplitude is slowly increasing.

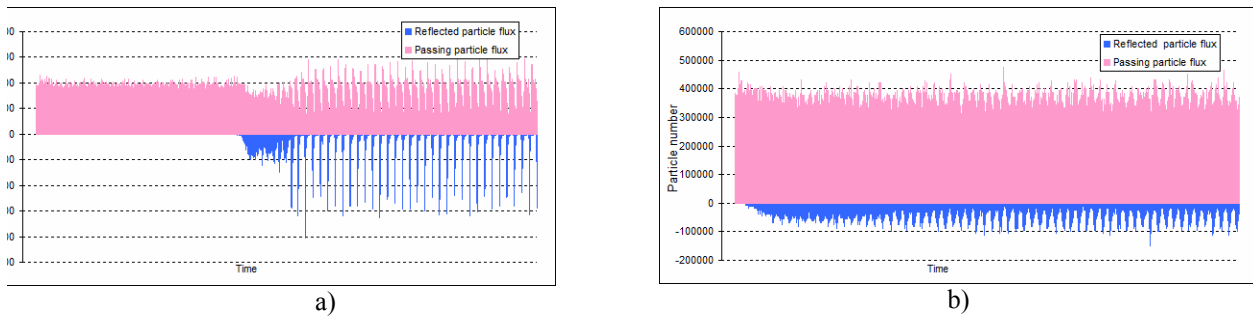


Fig.3. Fluxes of passing and reflected particles
a) energy spread of 0.01%, b) - 1%

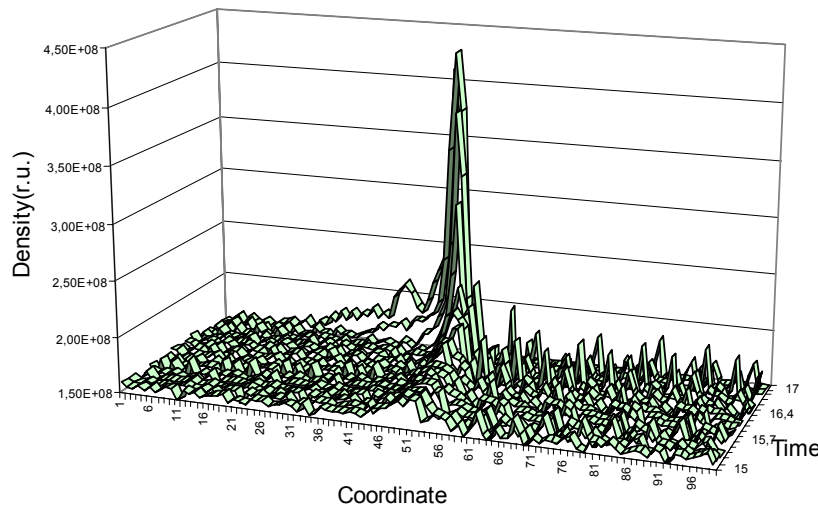


Fig.4. Particle density profiles in different instants of time from 15 to 17 transit times for the beam with an energy spread of 0.01%.

This situation leads to the beam instability development with the current values lower than these obtained by the analytic solution [4]. Particular attention should be given to the presence of a long preliminary stage of instability development.

The above analysis of figures has revealed four main phases of electron beam instability development. Initial phase is characterized by the slow smooth rise of the potential extremum and slow increase of the charge density (in Fig.2a from 2 to 15 time units). Linear stage is characterized by the exponential growth of the potential extremum and charge density, as well as, by the slight displacement of the coordinate of the potential extremum and charge density towards the system origin (in Fig.2a from 15 to 17 time units). Transient phase is characterized by the chaotic oscillations of the potential extremum and discharge density; there arises a reflected particle flux (in Fig.2a from 17 to 22 unit times). Nonlinear stage is the region of existence of the virtual cathode with steady-state oscillations of the potential extremum; there are a passing particle flux and a reflected particle flux (in Fig.2a from 2 to 22 time units).

CONCLUSIONS

The research has shown that the relativistic electron beam spectral characteristics exert influence on the instability development and virtual cathode parameters when the current is neat the limiting value. The process of potential instability development in the electron beam is characterized by the times significantly exceeding the transit time of the system and strongly depends on the energy spread. The behavior of virtual cathode steady-state oscillations also depends on the energy spread.

REFERENCES

1. Kovalyov N.F. On stationary states of electron beams in the drift space // Technical Physics . – 2002. – Vol.72, No.7. – P.113-116.
2. Hockney R.W., Eastwood J.W. Computer Simulation Using Particles. - Oxford: Taylor & Francis, 1989. - 540p.
3. Sarukhanyan G.E. Computer simulation of a virtual cathode in the wide range of electron beam spread // Proceedings of the international scientific-technical conference “Computer simulation in high technologies”, May 2010, Kharkov. - P.304-307.
4. Miller R. An Introduction to the Physics of Intense Charged Particle Beams. - New York: Springer, 1982. - 351p.

PACS: 52.50.Dg, 52.77.Dq

PLASMA FILTERS IN TECHNIQUE OF THE VACUUM-ARC COMPOSITE COATING DEPOSITION

D.S. Aksyonov, I.I. Aksenov, V.A. Belous, Yu.A. Besedina, S.I. Mel'nikov

National Science Centre "Kharkov Institute of Physics and Technology"

Academicheskaya Str. 1, Kharkov 61108, Ukraine

e mail: iaksenov.nskipt@gmail.com

Received January 30, 2014

The brief survey of devices for micro- and nanostructured composite coatings formation by deposition from a filtered cathodic arc plasma is given. The main attention is paid on the features specifying that how uniform is thickness and composition distribution of the coating deposited by use of those devices. Analysis of the publications showed that in respect of ability to obtain uniform coatings the wide-aperture single- and two-channel systems with acute-angled or "specular" magnetic fields are the most perspective. The setup which have been tested rigidly in industrial conditions, and designed efficient setups equipped with the said systems are described as examples.

KEYWORDS: T-shaped two-channel filter, conceptual model, composite coating, cathodic arc plasma

ПЛАЗМОВІ ФІЛЬТРИ В ТЕХНІЦІ ОСАДЖЕННЯ ВАКУУМНО-ДУГОВИХ КОМПОЗИТНИХ ПОКРИТТІВ

Д.С. Аксьонов, І.І. Аксьонов, В.А. Білоус, Ю.О. Бесєдіна, С.І. Мельнік

Національний науковий центр „Харківський фізико-технічний інститут”

вул. Академічна, 1, Харків 61108, Україна

Наведений короткий огляд пристроїв для формування мікро- та наноструктурованих композитних покриттів осадженням з фільтрованої вакуумно-дугової плазми. Основну увагу приділено тому, наскільки однорідно за складом і товщиною розподіляється по поверхні конденсації покриття, що осаджується за допомогою пристроїв, що розглядаються. Аналіз публікацій показав, що у відношенні здатності одержання однорідних за складом і товщиною покриттів найбільш перспективними є широкоапертурні одно- та двоканальні системи фільтрації з гострокутовою та „дзеркальною” геометріями транспортуючих магнітних полів. В якості прикладу описані установки: що виготовлена і пройшла жорсткі випробування в умовах виробництва, та високопродуктивна установка, оснащена зазначеними системами, яка проектується.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: Т-подібний двоканальний фільтр, концептуальна модель, композитні покриття, вакуумно-дугова плазма

ПЛАЗМЕННЫЕ ФИЛЬТРЫ В ТЕХНИКЕ ОСАЖДЕНИЯ ВАКУУМНО-ДУГОВЫХ КОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ

Д.С. Аксёнов, И.И. Аксёнов, В.А. Белоус, Ю. Беседина, С.И. Мельников

Национальный Научный Центр "Харьковский физико-технический институт"

ул. Академическая 1, Харьков 61108, Украина

Приведен краткий обзор устройств для формирования микро- и наноструктурированных покрытий сложного состава осаждением из фильтрованной вакуумно-дуговой плазмы. В статье основное внимание уделено тому, насколько однородно по составу и толщине распределяется по поверхности конденсации покрытие, осаждаемое с помощью рассматриваемых устройств. Анализ публикаций показал, что в отношении способности получения однородных по составу и толщине покрытий наиболее перспективны широкоапертурные одно- и двухканальные системы фильтрации с остроугольной и пробочной геометрией транспортирующих магнитных полей. В качестве примеров описаны прошедшая испытания в производственных условиях и проектируемые высокопроизводительные установки, оснащенные упомянутыми системами.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: Т-образный двухканальный фильтр, концептуальная модель, композитные покрытия, вакуумно-дуговая плазма

Высокотвёрдые композиционные покрытия на основе нитридов и/или карбидов двух и более металлов отличаются более высокими (по сравнению с однокомпонентными покрытиями) механическими характеристиками и находят всё более широкое применение в качестве износостойких и антифрикционных поверхностных слоёв в инструментальном производстве и в машиностроении [1]. Из PVD. (physical vapor deposition – физическое осаждение из паровой фазы) методов наиболее перспективным представляется вакуумно-дуговое осаждение [2–4]. Простейшая и наиболее распространённая методика такого осаждения заключается в конденсации плазмы, генерируемой вакуумной дугой с расходуемым катодом из материала, состав которого обеспечивает требуемое процентное содержание компонентов покрытия. Недостаток метода заключается в сложности и высокой стоимости изготовления мишеней требуемого состава.

Попытки упростить проблему, заменив катод из монолитного материала сложного состава мозаичным катодом, где в основной металл запрессовываются вставки другого металла, практически не имели успеха: состав покрытий, получаемых с применением таких электродов, неконтролируемым образом изменяется по мере «выгорания» катодной мозаики. Данная «неконтролируемость» в значительной степени ослаблена в установках, оснащённых испарителем, разработанным авторами работы [5]. Катод испарителя состоит из двух частей, изготовленных из разных материалов. Изменяя величину и геометрию магнитного поля, управляют перемещением КП с одной части катода на другую с частотой до 1 кГц, что позволяет достичь равномерной

эрозии катода и, следовательно, равномерного распределения толщины покрытия по поверхности подложки. Что же касается распределения концентрации компонентов по поверхности конденсации, то здесь вопрос остаётся открытым.

Другой подход к решению проблемы заключается в одновременном или поочерёдном осаждении конденсата из потоков плазмы от источника с двумя или более катодами из разных металлов [6,7]. Плазменные потоки направляются на подложку через общий прямолинейный плазмод с продольным ведущим магнитным полем. Поскольку плазма от каждого катода в такой системе транспортируется «своим» пучком магнитных силовых линий, пересекающих рабочий торец «своего» катода [3,4], плазменные потоки, проходя вдоль плазмоды, практически не смешиваются. В результате, при конденсации потоков формируется покрытие с сильно неоднородным распределением концентрации компонентов по поверхности подложки.

Приём, который позволяет добиться более-менее равномерного распределения концентраций компонентов покрытия по поверхности подложки, заключается в послойном осаждении потоков плазмы, генерируемых двумя (или более) источниками с катодами из разных материалов, расположенными на боковой поверхности технологической камеры. Обрабатываемое изделие при этом вращается перед источниками со скоростью, необходимой для обеспечения требуемой толщины слоёв наносимого покрытия [8]. Типичными установкам, позволяющими осуществить данный технологический процесс, являются серийные установки типа «Булат» [9]. Покрытия, получаемые данным способом, имеют слоистую структуру.

Представляет интерес система для нанесения покрытий из чередующихся слоёв двух металлов [10]. Источниками плазмы здесь служат два параллельно расположенных цилиндрических катода, вращающихся вокруг собственных осей. Катодное пятно на каждом катоде совершает возвратно-поступательное движение вдоль образующей цилиндра, обеспечивая тем самым равномерную эрозию электродов и, следовательно, равномерное распределение составляющих покрытий по поверхности обрабатываемого объекта (подложки). Перемещение катодных пятен вдоль образующей каждого из цилиндров осуществляется с помощью магнитного поля.

В описанных системах не предусмотрены меры по удалению из конденсируемой плазмы макрочастиц (МЧ) катодного материала, снижающих качество покрытий. Плазменные источники и установки, оснащённые одно- и многоканальными фильтрующими системами для осаждения микро- и наноструктурированных композитных покрытий рассмотрены в нижеследующих разделах.

Целью настоящей работы является анализ имеющихся сведений для выявления наиболее перспективных технических решений, могущих послужить основой для создания высокопроизводительных вакуумно-дуговых установок, обеспечивающих возможность формирования высококачественных покрытий сложного состава с равномерным распределением толщины и компонентов по поверхности конденсации.

ВАКУУМНО-ДУГОВЫЕ ИСТОЧНИКИ ПЛАЗМЫ С ФИЛЬТРАМИ ДЛЯ ОСАЖДЕНИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПОКРЫТИЙ

Системы с одно- и двухканальными фильтрами

Проблема макрочастиц наиболее кардинально решается с помощью фильтрующих устройств, действие которых основано на пропускании плазмы вдоль криволинейных магнитоэлектрических плазмодов (МЭП) [3]. В таких системах заряженные компоненты – ионы и электроны – транспортируются от места их эмиссии – катодного пятна (КП) до подложки по криволинейным траекториям, повторяющим изгибы МЭП, а тяжелые незаряженные или слабо заряженные макроблоки и нейтралы, не реагируют ни на электрические, ни на магнитные поля и потому, двигаясь по прямой, улавливаются стенками МЭП и на выход системы не попадают. Фильтр является также эффективным инструментом, с помощью которого можно управлять в широком интервале плотностью потока плазмы на подложку, регулируя тем самым скорость роста конденсата. Одновременно обеспечивается возможность снижения теплового потока на подложку и ограничения температуры ее нагрева допустимыми пределами.

Авторами работы [11] описана система с миниатюрным импульсным двухкатодным источником вакуумно-дуговой плазмы с общим цилиндрическим анодом и плазменным фильтром открытой архитектуры [2]. В описанных экспериментах осаждали плёнки Ta-C:Mo и поэтому один из катодов был выполнен из графита, а другой – из молибдена. В связи с тем, что катоды как центры эмиссии потоков плазмы углерода и металла разнесены на некоторое расстояние друг от друга, максимумы плотности конденсата этих материалов на подложке также смещены относительно друг друга.

Существенное повышение однородности распределения покрытия по толщине на подложке достигалось применением многополюсного магнитного «гомогенизатора» [2, 12,13]. Однако значительная неравномерность этого распределения сохранялась и в данном случае. Толщина конденсата в центре подложки диаметром 10 см превышала толщину покрытия на её краях почти на 40 %.

В работе [14] исследовались многослойные TiN/AlN и композитные TiAlN плёнки, полученные в системе, устройство которой иллюстрирует рис. 1. Система содержит два источника плазмы с катодами из разных материалов (в рассматриваемом случае – из титана и алюминия), двух тороидальных (90°) фильтров и электромагнитного смесителя. Регулируя частоту следования и очерёдность включений источников, получали

многослойные TiN/AlN плёнки с различной структурой. Композитные TiAlN плёнки осаждали в режиме одновременной работы источников. Сведений о распределении скорости осаждения и концентрации компонентов композитных покрытий по поверхности подложки не имеется.

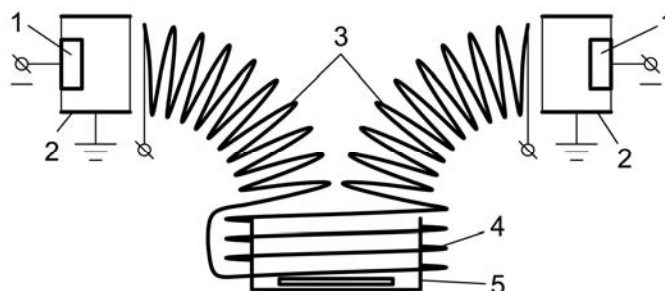


Рис. 1. Двухканальная система с тороидальными фильтрами и смесителем для осаждения композитных однослойных и многослойных покрытий [14]
катоды (1), аноды (2), фильтры (3), смеситель (4), экран с подложкой (5)

Ксу Ши и др. [15] предложили двухканальный источник фильтрованной плазмы (рис. 2). В его состав входят два генератора плазмы с магнитной стабилизацией дуги и плазмовод с двумя входными и одной общей выходной секцией (в форме буквы Y). Через выходную секцию смешанный поток плазмы от двух генераторов попадает на подложку. В каждой входной секции размещён фильтр 10 в виде диафрагмы, охваченной фокусирующей катушкой. С помощью диафрагмы отсекается периферийная, наиболее интенсивная, часть потока МЧ, а ионная составляющая плазмы, сфокусированная магнитным полем катушки, проходит сквозь отверстие диафрагмы и через индивидуальный канал плазмовода поступает в общий, выходной, отрезок плазмовода 4 и далее на подложку 9.

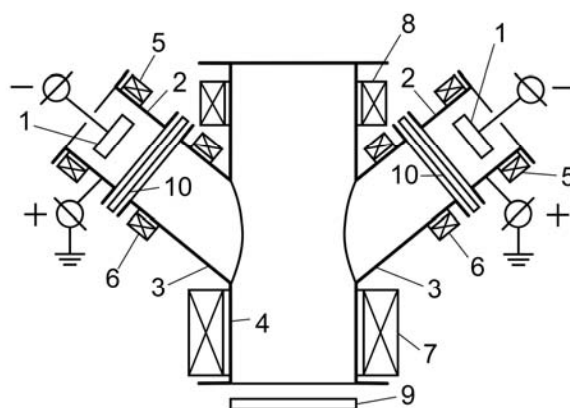


Рис. 2. Двухканальный источник фильтрованной плазмы
1 – катоды, 2 – аноды, 3 и 4 – входные и выходные секции плазмовода соответственно, 5 – 8 – катушки, 9 – подложка, 10 – фильтр-диафрагма [15]

Такикава и Тану в обзоре [16] сообщают о разработке источника вакуумно-дуговой плазмы с фильтром Y-типа (рис. 3). Такой источник аналогичен источнику Ксу Ши без фильтрующих диафрагм. По результатам исследований [17] установлено, что в системе Y-типа с катодами из титана и алюминия смешения потоков плазмы не происходит. В связи с этим равномерного распределения компонентов в формируемых плёнках получить не удалось.

Гороховским в патенте [18] описан двухкатодный источник плазмы с T-образным фильтром (рис. 4). Встречные плазменные потоки от двух катодов по входным плазмоводам направлялись в общий для них выходной плазмовод. Последний разделён плоским продольным элементом (на рисунке – поз. 7) на два практически независимых друг от друга плазмоведущих канала. Потоки плазмы от двух катодов после поворота на 90° проходят на подложку через выходной плазмовод, каждый по своему каналу, не смешиваясь. В этой связи источник в том виде, как он описан в патенте, может быть использован для нанесения слоистых покрытий на основе двух материалов, но не пригоден для формирования однородных по составу композитных покрытий при использовании моноэлементных катодов.

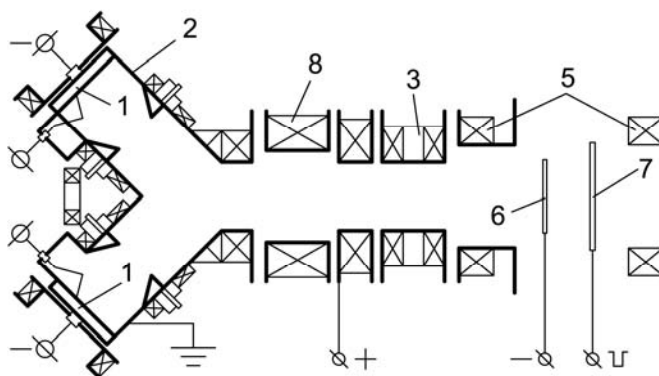


Рис. 3. Источник плазмы с Y-образным фильтром

1 – катод, 2 – анод, 3 – отклоняющие катушки, 5 – катушки выравнивателя поля, 6 – заслонка, 7 – подложка, 8 – смеситель [16]

Рассмотренные источники плазмы обладают, как известно, сравнительно невысокой производительностью и, оставаясь достаточно сложными системами с низким коэффициентом полезного использования плазмообразующего материала, не позволяют решать вопросы эффективности перемешивания нескольких потоков плазмы и равномерности распределения плотности выходного потока по его сечению. Решение этих вопросов является непременным условием успешного преодоления проблемы вакуумно-дугового синтеза качественных композитных покрытий, особенно наноструктурированных, в условиях промышленного производства.

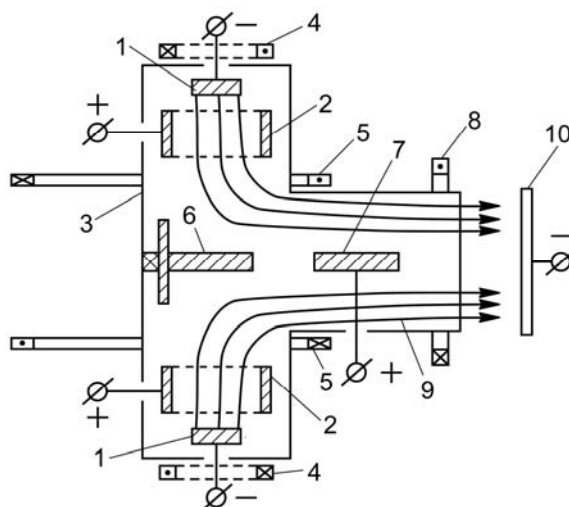


Рис. 4. Двухкатодный источник фильтрованной плазмы с T-образным плазмододом

1 – катод, 2 – анод, 3 – плазмодод, 4 – катодная катушка, 5 – отклоняющие катушки, 6, 7 – отклоняющие электроды, 8 – выходная фокусирующая катушка, 9 – выходная секция плазмодода, 10 – подложка [18]

Системы с широкоапертурными двухканальными фильтрами

Возможность формировать одновременно равнотолщинное и однородное по составу покрытие не может быть достигнута без обеспечения условий для более качественного смешения компонентов конденсируемого плазменного потока и выравнивания плотности плазмы по его сечению. Можно было ожидать, что смешение потоков, транспортируемых к подложке каждый своим пучком магнитных силовых линий, произойдет более эффективно, если в области смешения будет сформирована зона со слабым (почти нулевым) полем в приосевой области и усиленным – по её периферии. Действительно, внутри такой зоны магнитное поле теряет свои «удерживающие» свойства и не препятствует смешиванию плазменных потоков. В этом отношении представляют интерес системы с остроугольной и пробочной геометрией пространственного распределения магнитных полей. Вариантом решения проблемы производительности также могут служить осесимметричные МЭП с полями остроугольной или пробочной геометрии. Генерируемый катодным пятном и движущийся вдоль оси сфокусированный поток плазмы в таких системах трансформируется в широкий радиальный поток с

симметричным и однородным по азимуту распределением плотности. Это позволяет обрабатывать одновременно в несколько раз большее количество изделий (по сравнению с устройствами с однонаправленными потоками плазмы), что в определенных условиях равнозначно повышению производительности процесса [3].

Прототипом плазменных систем такого типа является разработанная в ННЦ ХФТИ двухканальная система формирования радиальных потоков плазмы (СФРП), которая достаточно подробно описана в [3]. Схема СФРП представлена на рис. 5. Система содержит два одинаковых источника плазмы с магнитной фокусировкой. Источники размещены соосно и обращены выходными торцами друг к другу. Два потока плазмы, генерируемые дугowymi разрядами источников с катодами 1 из одного и того же или разных плазмообразующих материалов, смешиваются в области минимума магнитного поля между анодами 2. Заряженные компоненты смешанной плазмы в виде радиального веерообразного потока уходят из системы через кольцевой зазор между анодами на подложки 4, размещаемые вокруг этого зазора. МЧ, двигаясь по прямолинейным траекториям, на подложки не попадают. Для случая титановой плазмы коэффициент пропускания ионного компонента $I_{i\text{ex}} / I_{i\text{ent}}$ и коэффициент эффективности системы $I_{i\text{ex}} / I_{\text{arc}}$ ($I_{i\text{ex}}$ и $I_{i\text{ent}}$ – ионные токи на выходе и входе системы, I_{arc} – ток дуги) составляют, соответственно, ~ 90 % и 8,4 %. Это в 2 ÷ 7 раз выше, чем для других наиболее совершенных систем [3,19].

Первые результаты исследования возможностей применения данной системы для формирования покрытий сложного состава опубликованы в работе [20]. Полученные данные свидетельствуют о том, что исследуемая система является эффективным средством для формирования композиционных наноструктурных плёнок (покрытий) на основе двух металлов с возможностью регулировки относительного содержания компонентов в процессе осаждения покрытия. Показано, что относительное содержание составляющих конденсата зависит как от концентрации металлических компонентов плазмы, которые поступают к поверхности конденсации, так и от давления и природы газа, присутствующего в зоне осаждения, в частности – от распыляющей способности этого газа. При этом обеспечивается одно из важнейших преимуществ исследуемой системы – возможность осаждения покрытий с однородным распределением толщины по площади, значительно превышающей площадь, обрабатываемую с помощью любой другой известной системы аналогичного назначения. Ещё одно важное преимущество рассматриваемой системы заключается в значительном снижении средней энергии частиц в радиальном, выходном, потоке плазмы по сравнению с их энергией в первичных аксиальных потоках [3]. Эта особенность системы открывает возможность использования вакуумно-дугowych методов для осаждения покрытий на материалы с низким энергетическим порогом деградации. Например, в случае нанесения защитных покрытий на оптические элементы из полимеров или на магнитные слои жёстких дисков памяти, а также на магнитные головки для записи и считывания информации. Однако получаемые покрытия неоднородны по фазовому составу. Кроме того, на формирование покрытий в зоне равнотолщинности и однородности состава покрытия расходуетсся существенно меньшая часть выходного потока фильтрованной плазмы. В этом отношении, как полагают авторы, требуются дальнейшие работы по усовершенствованию системы и исследованию её возможностей. В другой работе [21] приведены результаты экспериментов по формированию в обсуждаемой системе трёхкомпонентных покрытий (без учёта газовой составляющей). С применением катодов из Mg или Mo в одном плече системы и из композита $\text{Ti}_{0,9}\text{Al}_{0,1}$ в другом получены покрытия $(\text{Ti}_{0,92}\text{Al}_{0,07}\text{Mo}_{0,01})\text{N}$ и $(\text{Ti}_{0,88}\text{Al}_{0,06}\text{Mg}_{0,06})\text{N}$ сверхвысокой твёрдости (>40 ГПа). Покрытия отличаются высокой термической стабильностью. Конденсаты $(\text{Ti-Al-Mg})\text{N}$ сохраняют первоначальную твёрдость при нагреве до 1000 °С, а $(\text{Ti-Al-Mo})\text{N}$ – до 1200 °С. Косвенно это также свидетельствует о возможности применения данной системы для получения нанокompозитных покрытий.

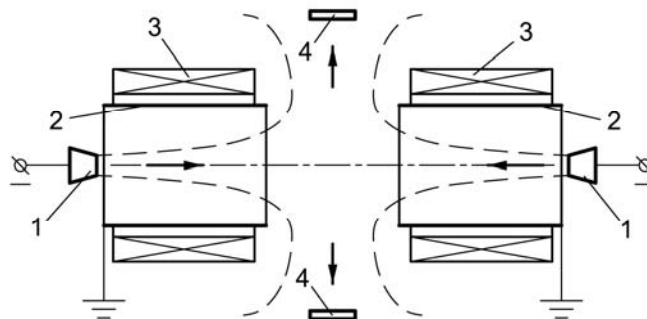


Рис. 5. Система формирования радиальных потоков плазмы (СФРП)

1 – катоды, 2 – аноды, 3 – магнитные катушки, 4 – подложки

Акцентируя внимание на важных преимуществах системы с преобразованием двух встречных аксиальных потоков в один общий радиальный поток, нельзя не отметить то обстоятельство, что применение такой системы

с веерообразным плазменным потоком на выходе в производственной практике не всегда оправдано. В ряде случаев представляется более целесообразным располагать системой, которая при высокой эффективности позволяет формировать однонаправленный поток плазмы. Схема устройства такого типа изображена на рис. 6 [22]. В отличие от СФРП распределение магнитных полей в нём асимметричное, обеспечивающее поворот встречных потоков плазмы на 90° в сторону общего выходного плазмоведа 5. Объединённые аноды 2 совместно с плазмоводом 5 представляют собой двухканальный Т-образный плазмовод.

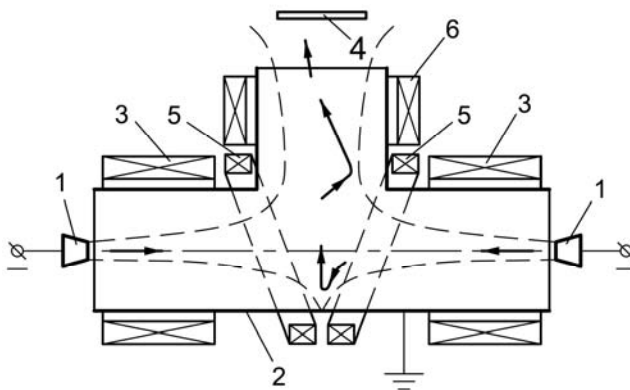


Рис. 6. Двухканальный вакуумно-дуговой источник фильтрованной плазмы с асимметричным остроугольным распределениями магнитного поля
 1 – катоды, 2 – аноды, 3 – магнитные катушки, 4 – подложка, 5 – выходной плазмовод

Высказанное предположение о возможности использования полей остроугольной и пробочной геометрии для выравнивания однородности состава и плотности плазменных потоков в значительной мере оправдывается приведенными в работе [23] результатами экспериментов по формированию Ti-Si и Ti-Si-N покрытий, синтезируемых с применением вакуумно-дугового источника фильтрованной плазмы с расходуемым титан-кремниевым катодом. Очистка плазмы от МЧ в этих экспериментах осуществлялась с помощью Т-образного фильтра. Установлено, что путём регулировки параметров процесса осаждения (давления рабочего газа в реакционном объёме установки, отрицательного потенциала смещения на подложке, напряжённости и формы распределения магнитных полей в плазменном источнике) концентрацию кремния в конденсате можно изменять в широких пределах – от нуля до максимального значения, определяемого его содержанием в катод. При осаждении в режиме с ослабленным магнитным полем на выходе системы концентрация кремния в Ti-Si-N покрытии диаметром ~ 12 см составляла $4 \pm 0,25\%$ (против 5% в катод). Этот результат несколько выше, чем в экспериментах, описанных в работе [12], хотя и получен в отсутствие гомогенизатора.

Многоканальный источник фильтрованной вакуумно-дуговой плазмы описан в патенте [24]. Варианты исполнения источника базируются на одном или комбинации нескольких Т-образных широкоапертурных плазмоводов. Некоторые из комбинаций обеспечивают поворот плазменного потока на 180° , в том числе и в виде суммы поворотов в двух разных плоскостях, тем самым исключая взаимное запыление катодов продуктами их эрозии – нейтральными парами и макрочастицами.

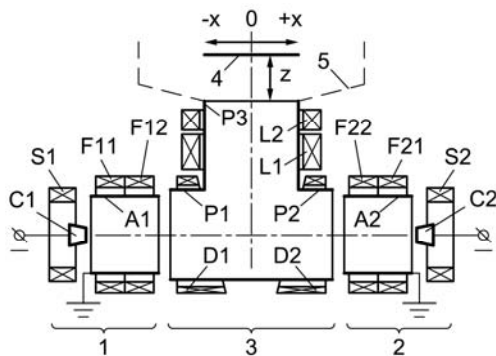


Рис. 7. Схема вакуумно-дугового источника плазмы с двухканальным Т-образным фильтром
 1, 2 – генераторы плазмы, 3 – Т-образный фильтр, 4 – местоположение подложки, A1 и A2 – аноды, C1 и C2 – катоды, S1 и S2 – стабилизирующие катушки, F11, F12 и F21, F22 – анодные (фокусирующие) катушки, D1 и D2 – отклоняющие катушки, L1 и L2 – выходные катушки, P1 и P2 – входные секции плазмоведа, P3 – выходная секция плазмоведа

Из рассмотренных источников плазмы с двухканальными фильтрами наиболее изучен вариант по патенту [24], представленный на рис. 7. Своим выходным торцом плазмовод пристыкован к вакуумной камере

установки "Булат-6" (не показана). Более детально устройство описано в работах [24–26]. В исследованном варианте источника катод С1 был изготовлен из алюминия, катод С2 – из титана. Источник обеспечивает возможность формирования композитных покрытий на основе двух металлов с достаточно однородным распределением концентрации компонентов (около $\pm 6,5\%$). Максимальное значение системного коэффициента эффективности (отношения величин выходного ионного тока к току дуги) в условиях экспериментов составляло 2,5 %. Регулировкой магнитных полей в плазмоведущих каналах источника можно в широких пределах управлять величиной ионного компонента выходного плазменного потока и диаграммой распределения его плотности;

МОДЕЛИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Общие сведения об установке-прототипе

В последние годы в ННЦ ХФТИ разработаны проекты высокопроизводительных установок, в концепцию которых легли новые конструкторские решения, обеспечивающие реализацию передовых вакуумно-дуговых технологий, в том числе – методов формирования композитных микро- и наноструктурных покрытий, получение которых в условиях промышленного производства прежними средствами остаётся невозможным. Прототипом новых концептуальных моделей установок можно считать разработанную в ХФТИ установку Булат-9, изготовленную в двух экземплярах опытным производством Института два десятилетия назад и прошедшую жёсткие испытания в условиях массового производства – осаждения защитных декоративных покрытий на изделия бытового назначения. Описание установки, особенностей конструктивного решения её основных узлов и систем, технологических возможностей и эксплуатационных характеристик приведены в статье [27].

Упрощённый чертёж общего вида установки и схема её вакуумно-плазменного агрегата представлены на рис. 8 и 9 соответственно. Помимо обычных, ставших уже "стандартными", технологий, реализуемых с помощью известных вакуумно-дуговых установок, установка Булат-9 позволяет осуществлять ряд технологических процессов модифицирования поверхности изделий, которые на серийных машинах затруднены или практически невозможны. К ним относятся: упрочнение с помощью нитридных композиционных покрытий мелкоразмерного инструмента (сверла диаметром ~ 1 мм, зубные боры); нанесение покрытий на внутренние поверхности инструментов из сталей с низкой температурой отпуска (плашки, фильеры); нанесение износостойких покрытий на детали машин с температурой отпуска 250–280 °С (детали топливной аппаратуры из сталей и сплавов типа ХВГ, 40Х); получение бескапельных покрытий с применением плазменного фильтра; азотирование поверхности на глубину 30–50 мкм при температуре 300–500 °С; создание сложных, принципиально новых, типов покрытий и композиций модифицированием поверхности (азотированием) с последующим послойным нанесением проводящих и/или диэлектрических покрытий.

В установке «Булат-9» применён ряд технических решений, нетрадиционных для вакуумно-дуговых машин аналогичного назначения: Это, прежде всего, камера колпачного типа, что позволило промывать её внутренние поверхности и элементы содержащейся в ней оснастки сухим горячим азотом (или аргоном) при загрузке и выгрузке обрабатываемых изделий со стороны днища. Горячий газ, заполняющий пространство под колпаком камеры и будучи легче окружающего атмосферного воздуха, препятствует проникновению последнего в камеру. Таким образом, исключается попадание атмосферной влаги в камеру, что способствует значительному сокращению достижения рабочего вакуума перед началом цикла вакуумно-плазменной обработки изделий.

Установка содержит систему автоматической загрузки изделий в камеру и выгрузки их из камеры. В систему входит днище, перемещаемое по вертикали с помощью подъёмника, и два стола горизонтальной подачи изделий на днище. В установке использованы усовершенствованные вакуумно-дуговые источники плазмы, включая источник с плазменным фильтром. Для подавления микродуг на поверхностях обрабатываемых изделий служит система колебательных LC-контуров. Управление технологическим циклом, включая процессы откачки камеры, выгрузки и загрузки изделий, весь процесс ионно-плазменной обработки (очистка ионной бомбардировкой, электронный нагрев изделий, азотирование, осаждение покрытия) осуществляются автоматически. Перечисленный комплекс технических решений определил уникальность установки, как по конструктивному исполнению, так и по производительности, энергетической экономичности, по технологическим возможностям и гибкости перестройки с одного технологического процесса на другой, по простоте обслуживания. Полная автоматизация установки позволяет обслуживать её персоналом средней квалификации и использовать в качестве составной части линий по производству инструментов, прецизионных деталей машин, декоративных изделий и т.п. Возможности и технические решения, заложенные в установке, наиболее полно могут быть реализованы при компьютерном управлении. По эксплуатационным качествам установка остается непревзойденной, а по концепции конструктивного исполнения – новой, хотя и создана более двух десятилетий назад. По мнению авторов, ряд технических решений, использованных в «Булате-9» целесообразно применить при создании новых установок для вакуумно-дугового осаждения покрытий и других видов ионно-плазменной обработки материалов.

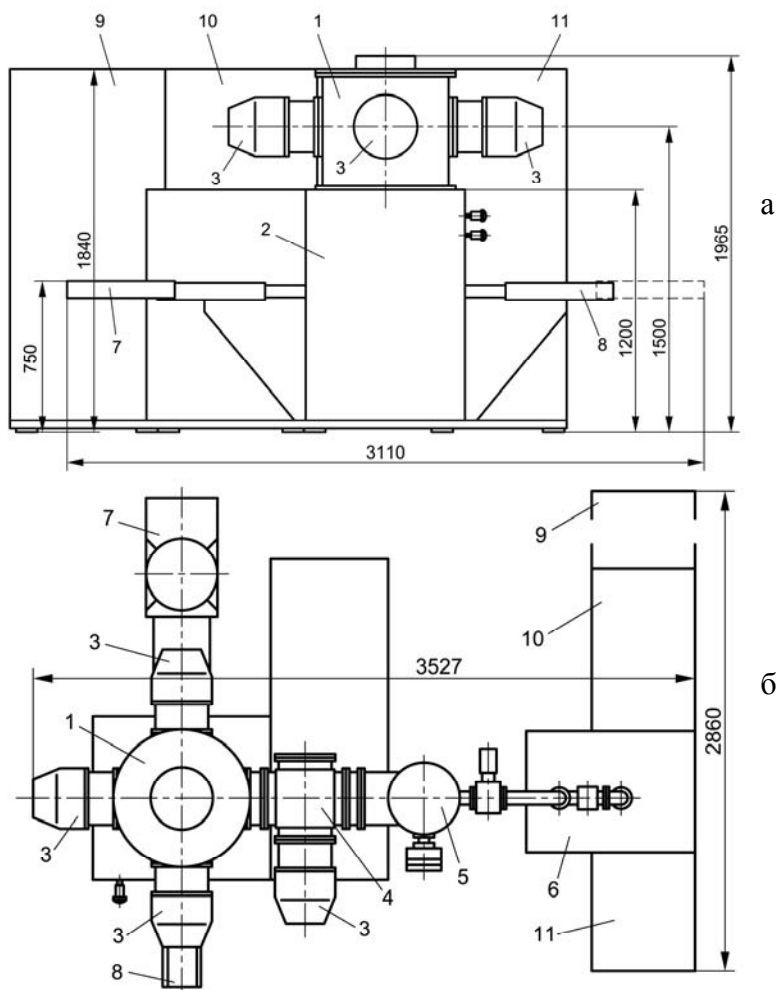


Рис. 8. Установка Булат-9.

Вид спереди (а), вид сверху (б): камера (1), подставка (2), источник плазмы (3), плазменный фильтр (4), диффузионный насос (5), форвакуумный насос (6), стол загрузки (7), стол выгрузки (8), стойка управления (9), источник питания вакуумных дуг (10), источник отрицательного напряжения смещения на подложке (11) [27]

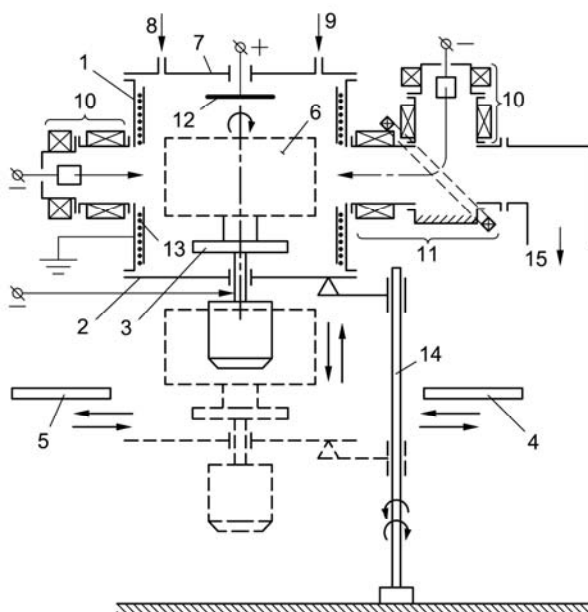


Рис. 9. Схема вакуумно-плазменного агрегата установки Булат-9:

вакуумная камера (1), днище (2), платформа (3), столы загрузки и выгрузки (4, 5), обрабатываемые изделия (6), крышка (7), подача рабочих газов (8, 9), катушки плазменного источника (10), плазменный фильтр (11), анод тлеющего разряда (12), нагреватель (13), подъёмник (14), к системе откачки (15) [27]

Концептуальная модель установки с СФРП

На базе СФРП разработан концептуальный проект технологической установки для формирования композитных покрытий осаждением из смешанного двухкомпонентного потока плазмы. Схема её вакуумно-плазменного агрегата показана на рис. 10. В связи с осевой симметрией СФРП представилось целесообразным избрать куполообразный вариант рабочей камеры установки. Камера имеет цилиндрическую форму с вертикальной осью, выполнена из нержавеющей немагнитной стали и состоит из двух частей: нижней, стационарной, части и верхней, подвижной, части, перемещение которой вверх и вниз осуществляется с помощью подъёмника с электроприводом.

Во время загрузки камеры подвижная часть находится в верхнем положении, открывая свободный доступ к устройству карусельного или иного типов, на котором устанавливаются изделия, подлежащие обработке. Во время рабочего цикла (откачка, прогрев, ионная очистка, осаждение покрытия, ионно-плазменное модифицирование, остывание изделий) верхняя часть камеры опущена и через резиновый уплотнитель герметически соединена с нижней частью. К днищам обеих частей камеры через центральные проёмы с помощью скользящих уплотнительных узлов пристыкованы вакуумно-дуговые источники плазмы (испарители). Детально источники плазмы описаны в работах [3].

На боковой поверхности подвижной части камеры размещены отклоняющие катушки для коррекции диаграммы направленности выходного потока плазмы [3]. Расходящийся радиальный осесимметричный (веерообразный) выходной поток плазмы обуславливает целесообразность использования установки для осаждения покрытий на изделия, которые могут быть размещены вокруг кольцевого выходного зазора между анодами плазменных источников в гнездах карусели или подложкодержателя другого типа. Такими изделиями могут быть инструменты типа свёрл, метчиков, фрез, и т. п., лопатки турбин, поршни плунжерных пар и другие виды деталей машин и приборов, в том числе элементы точной механики, оптики, электроники.

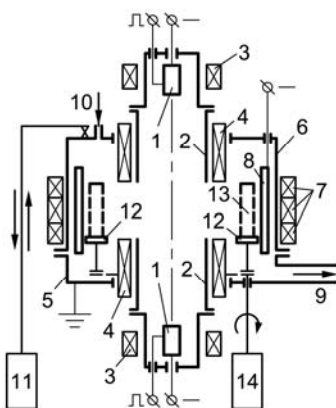


Рис. 10. Схема установки с СФРП (вариант 1)

катоды (1), аноды (2), стабилизирующие катушки (3), фокусирующие катушки (4), неподвижная (5) и подвижная (6) части рабочей камеры, отклоняющие катушки (7), экран (8), к системе откачки (9), напуск газа (10), подъёмник (11), Карусельный подложкодержатель (12), обрабатываемые изделия (13), привод карусели (14) [28]

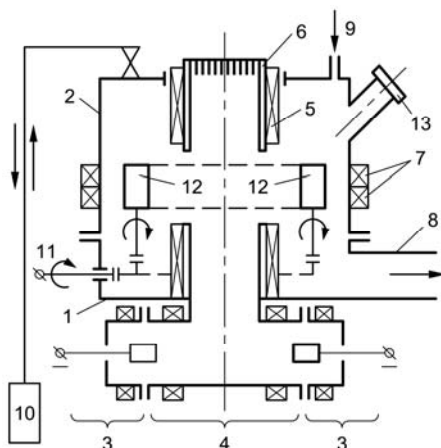


Рис. 11. Схема установки с СФРП (вариант 2)

Неподвижная (1) и подвижная (2) части рабочей камеры, источники плазмы (3), Т-образный фильтр (4), отражающая катушка (5), антианод-ловушка (6), отклоняющие катушки (7), к откачной системе (8), напуск газа (9), подъёмник (10), привод карусели (11), обрабатываемые изделия (12), смотровое окно (13)

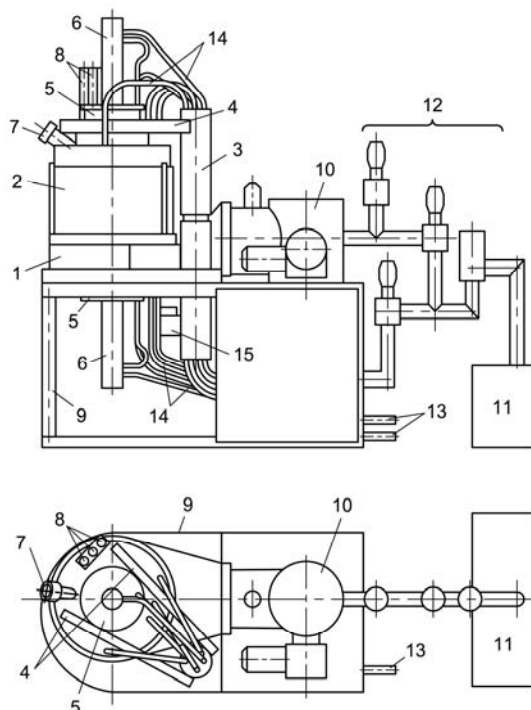


Рис. 12. Общий вид установки с СФРП.

Неподвижная (1) и подвижная (2) части рабочей камеры, подъемник (3), подвесные штанги (4), корпуса источников плазмы (5), токовводы (6), смотровое окно (7), датчики вакуумметра (8), станина (9), высоковакуумный насос с затвором (10), форвакуумный насос (11), система форвакуумных клапанов (12), ввод и вывод охлаждающей воды (13), шланги системы охлаждения (14) [28]

На рис. 11 представлена схема второго концептуального варианта конструкционного решения технологической установки с СФРП. Здесь вместо нижнего безфильтрового источника использована система с двумя источниками 3, состыкованными с общим Т-образным фильтром 4. Более подробно система описана выше и изображена на рис. 9. Вместо верхнего источника плазмы здесь установлен полый цилиндрический электрод 6 (антианод) с отражающей катушкой 5. Электрод 6 с оребренной донной (торцевой) поверхностью служит ловушкой МЧ. Включаемые встречно по отношению друг к другу катушка 5 антианода-ловушки и катушка выходного плазмоведа фильтра 4 служат для формирования остроугольного магнитного поля для вывода суммарного выходного плазменного потока через кольцевой зазор между выходным плазмоводом и электродом 6 на обрабатываемые изделия 12. Упрощенный чертёж установки с СФРП представлен на рис. 12.

ПРОЕКТИРУЕМАЯ УСТАНОВКА БУЛАТ-10

Общие сведения

С учётом опыта длительной и интенсивной эксплуатации в лабораторных и производственных условиях двух экспериментальных образцов установки Булат-9 разрабатывается проект установки Булат-10, в котором при сохранении основной концепции установки-прототипа осуществлен ряд конструктивных изменений. Вакуумно-дуговая автоматизированная установка «Булат-10» предназначена для синтеза твердых, высокотвердых и сверхтвердых материалов (карбидов, нитридов, оксидов, композитов) и нанесение их в виде микро- и наноструктурированных в том числе и многослойных функциональных покрытий: износостойких, коррозионно- и эрозионноустойких, декоративных, тепло- и электропроводящих и др. Предполагается использование установки в производстве инструментов, в машино- и приборостроении, в электронике, точной механике, оптике, медицине и др.

Общий вид новой модификации установки показан на рис. 13. Внесенные в конструкцию установки изменения направлены на повышение её производительности и надежности, на упрощение обслуживания. В установке «Булат 10», как и в «Булат-9», применён ряд технических решений, нетрадиционных для вакуумно-дуговых машин аналогичного назначения: Это, прежде всего, куполообразная камера, что позволило промывать её внутренние поверхности и элементы содержащейся в ней оснастки сухим горячим азотом (или аргоном) при загрузке и выгрузке обрабатываемых изделий со стороны днища. В то же время камера снабжена боковой дверью, используемой в процессе регламентных работ. В боковой стенке камеры имеется два окна для размещения датчика ИК-пирометра и/или ввода термопары (не показаны). Внутренние размеры камеры: высота составляет 1050 мм, поперечный размер – 900 мм. В подставке 2 под камерой размещены электроприводы для управляемого перемещения столов горизонтальной подачи и вертикального перемещения днища (не показаны). В зависимости от конкретного назначения установки камера может быть оснащена либо четырьмя, либо двумя

источниками плазмы (базовая модель, рис. 13), либо двумя системами, каждая из которых состоит из двух источников плазмы и общего для них Т-образного фильтра (рис. 14), либо системой из Т-образного фильтра, к каждому плечу которого подсоединены по два источника плазмы (рис. 15). Откачка камеры осуществляется через L-образный фильтр с двумя источниками плазмы (поз. 4 на рис. 13). В зависимости от материала катодов этих источников через фильтр в камеру поступает поток фильтрованной плазмы соответствующего состава. В случае, если катоды выполнены из титана, рассматриваемая система при отключенном питании магнитных катушек фильтра может выполнять функции электродугового сорбционного насоса.

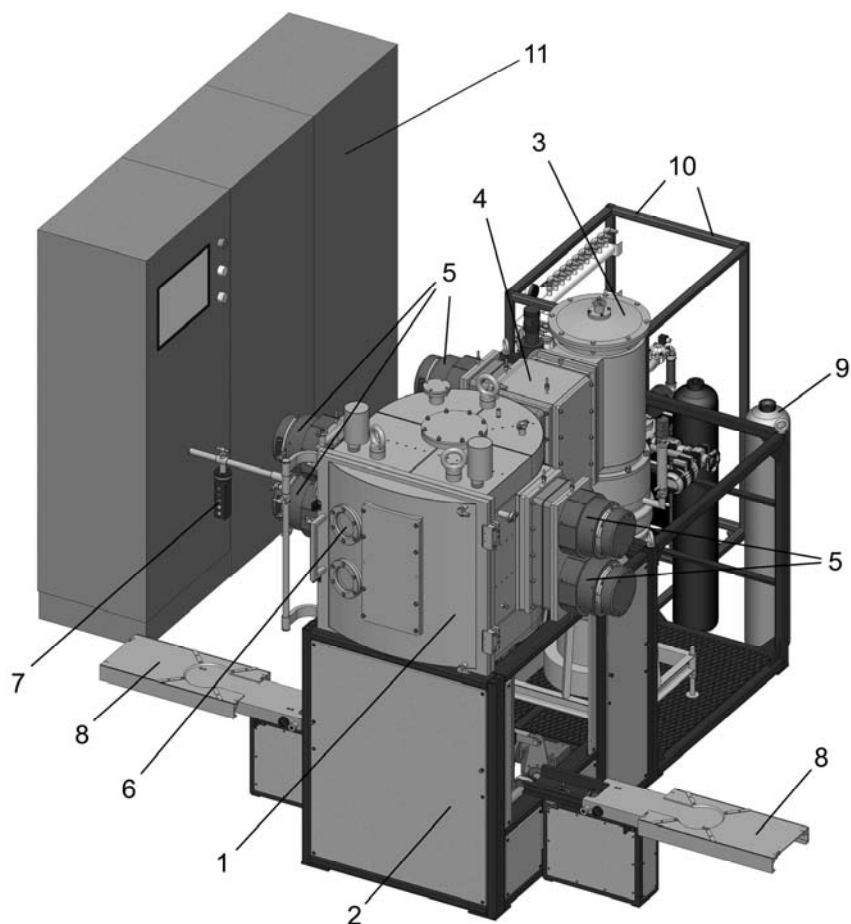


Рис. 13. Базовая модель установки Булат-10

1 – камера, 2 – подставка, 3 – система вакуумной откачки; 4 – фильтр L-образный, 5 – вакуумно-дуговые генераторы плазмы, 6 – смотровое окно, 7 – пульт ручного управления системой загрузки – выгрузки, 8 – стол горизонтальной подачи, 9 – баллоны с рабочими газами, 10 – система водоснабжения, 11 – шкаф электропитания и управления.

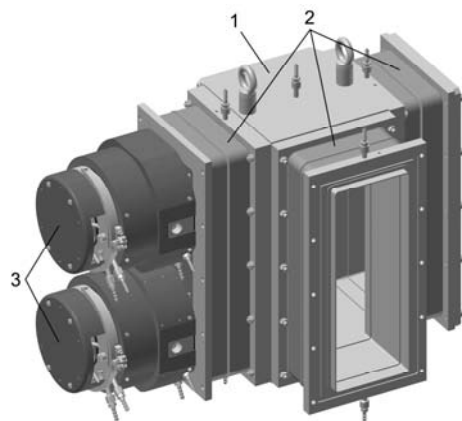


Рис. 14. Т-образный фильтр с двумя источниками плазмы
1 – корпус фильтра, 2 – электромагнитные катушки, 3 – источники плазмы

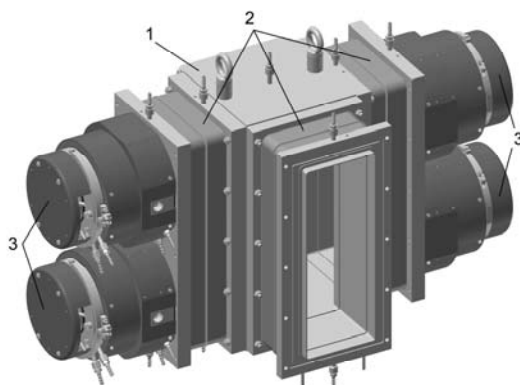


Рис. 15. Т-образный фильтр с четырьмя источниками плазмы
 1 – корпус фильтра, 2 – электромагнитные катушки, 3 – источники плазмы

Технические характеристики

1. Количество источников плазмы, шт.....	6
2. Максимальная площадь поверхности напыления, дм ²	115
3. Максимальные размеры обрабатываемых изделий, мм	
диаметр.....	700
высота.....	540
4. Число оборотов шпинделя устройства поворотного, об./мин.....	7,5
5. Допустимая нагрузка на шпиндель устройства поворотного, кГ.....	до 150
6. Предельный вакуум в рабочей камере, Па (мм рт. ст.), не более.....	$6,5 \cdot 10^{-3} (5 \cdot 10^{-5})$
7. Рабочее давление в камере, Па (мм рт. ст.).....	от $6,5 \cdot 10^{-3} (5 \cdot 10^{-5})$ до $6,5 \cdot 10^{-1} (5 \cdot 10^{-3})$
8. Время откачки камеры до давления $6,5 \text{ Па} (5 \cdot 10^{-2} \text{ мм рт.ст.})$, мин.....	4
9. Время откачки камеры до давления $6,5 \cdot 10^{-3} \text{ Па} (5 \cdot 10^{-5} \text{ мм рт.ст.})$, мин.....	8
10. Охлаждение – водяное	
11. Максимальная потребляемая электрическая мощность, кВт, не более.....	55
12. Напряжение питания, В.....	$380/220 \pm 10\%$
13. Частота напряжения питания, Гц.....	50 ± 1
14. Ток дуги, А.....	до 150
15. Возбуждение и поддержание дугового разряда.....	автоматическое
16. Напряжение холостого хода выпрямителя ионной бомбардировки (источника отрицательного напряжения смещения на подложке), регулируемое, ($\pm 10\%$) кВ.....	от 0,1 до 1,1

Шкаф электропитания и управления 11 содержит:

- источники питания и управления вакуумно-дуговыми генераторами плазмы,
- источники питания электромагнитных катушек плазменных фильтров,
- источник отрицательного напряжения смещения на подложке (выпрямитель),
- систему напуска рабочих газов в камеру,
- систему контроля температуры обрабатываемых изделий в процессе нанесения покрытий,

В проектируемой установке, как и в установке-прототипе, предусматривается система автоматического управления всем технологическим циклом, начиная от загрузки в камеру кассеты с изделиями, подлежащими обработке, до её выгрузки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из анализа литературных данных и описания разработок ХФТИ следует, что в отношении способности получения однородных по составу и толщине композитных микро- и наноструктурированных покрытий наиболее перспективными являются плазменные источники с широкоапертурными одно- и двухканальными системами фильтрации с остроугольной и пробочной геометрией транспортирующих магнитных полей. При разработке нового оборудования, оснащённого такими системами, целесообразно в качестве прототипа использовать установку типа Булат-9, которая по производительности, широте технологических возможностей и эргономическим характеристикам является непревзойдённой с момента создания до настоящего времени. В работе кратко изложены основные концептуальные данные по проектируемой установке рассматриваемого типа.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ

1. Reshetnyak Ye. N. Strel'nitskiy V.E. Sb. Sintez uprochnyayushchich nanostrukturnykh pokrytiy // Problems of atomic science and technology. Ser. Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnogo materialovedeniya. – 2008. – No.2(92).– P. 119-130.
2. Anders A. Cathodic Arcs: From Fractal Spots to Energetic condensation. – Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics, 2008. – 540 p.
3. Aksenov I.I. Vakuumnaya duga v trozionnykh istochnikakh plazmy. – Kharkov: NNTs KFTI, 2005. – 212p.
4. Aksenov I.I., Andreev A.A., Belous V.A., Strel'nitskiy V.E., Khoroshikh V.M. Vakuumnaya duga: istochniki plazmy, osazhdenie pokrytiyi, poverkhnostnoye modifitsirovaniye. – Kiev: Naukova Dumka, 2011. – 724 p.
5. Jilek M., Cselle T., Holubar P., Morstein M., Veprek-Heijman M.G.J., Veprek S. Development of Novel Coating Technology by Vacuum Arc with Rotating Cathodes for Industrial Production of nc-(Al_{1-x}Ti_x)N/a-Si₃N₄ Superhard Nanocomposite Coatings for Dry, Hard Machining // Plasma Chemistry and Plasma Processing. –2004.– Vol. 24.– No.4.– P. 493-510.
6. Zhitomirsky V.N., Boxman R.L., Goldsmith S., Grimberg I., Weiss B.Z. Superposition of two plasma beams produced in a vacuum arc deposition apparatus // Proc. of XVIIIth ISDEIV, Eindhoven, 1998. – P. 609-612.
7. Ben-Ami R., Zhitomirsky V.N., Boxman R.L., and Goldsmith S. Superposition of two plasma beams produced in a vacuum arc deposition apparatus // Plasma Sources Sci. Technol. – 1999.– Vol. 8.– P. 355–362.
8. Mukhin V.S., Budilov V.V., Shekhtman S.R., Kireev R.M. Nanostructured protective coatings. Kharkov nanostructural assembly. Vacuum nanotechnologies and equipment. – Kharkov: 2006.– P. 205-209.
9. Kunchenko Yu.V., Kunchenko V.V., Neklyudov I.M., Kartmazov G.N., Andreev A.A. Sloistye Ti-Cr-N-pokrytiya poluchayemye metodom vakuumno-dugovogo osazhdeniya // VANT, ser. Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnogo materialovedeniya. – 2007. – No.2 (90). – P. 203-214.
10. Xing-zhao Ding, Zeng X.T., Liu Y.C., Fang F.Z., Lim G.C. Cr_{1-x}Al_xN coatings deposited by lateral rotating cathode arc for high speed machining applications // Thin Solid Films.– 2008.– Vol. 516. – P. 1710-1715.
11. Anders A., Pasaja N., Sansongsiri S. Filtered cathodic arc deposition with ion-species-selective bias // Review of scientific instruments. – 2007. – Vol. 78 – P. 1-5.
12. Anders S., Raoux S., Krishnan K., MacGill R.A., Brown I.G. Plasma distribution of cathodic arc deposition systems // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol. 79. – No.9. – P.6785-6790.
13. Bilek M.M.M, Anders A., Brown I.G. Magnetic system for producing uniform coatings using a filtered cathodic arc // Plasma Sources Sci. Technol. – 2001. Vol.10. – P. 606–613.
14. Dai Hua, Shen Yao, Wang Jing, Xu Ming, Li Liuhe, Li Xiaoling, Cai Xun, and Chu Paul K. Fabrication for multilayered composite thin films by dual-channel vacuum arc deposition // Review of scientific instruments. – 2008. - Vol. 79. – P. 065104-1 – 065104-5]
15. Int. Appl. No. PCT/IB98/01794 published under PCT No. WO 99/223396, October 24, 1997.
16. Takikawa Hirofumi, Tanoue Hideto. Review of cathodic arc deposition for preparing droplet-free thin films // IEEE Trans. on Plasma Sci. – 2007.– Vol. 35 – No. 4 – P. 992-999.
17. Takayuki Mashiki, Hiroki Hikosaka, Hideto Tanoue, Hirofumi Takikawa, Yushi Hasegawa, Makoto Taki, Masao Kumagai, Masao Kamiya. TiAlN film preparation by Y-shape filtered-arc-deposition system // Thin Solid Films. – 2008.– Vol. 516. – P. 6650–6654.
18. US Patent No.: US 6,663,755 B2. Dec. 16, 2003.
19. Aksenov I.I., Strel'nitskiy V.E., Vasilyev V.V., Zaleskiy D.Yu. Efficiency of magnetic plasma filters // Surf. Coat. Technol. – 2003. – Vol. 163-164.– P.118-127.
20. Arsenov I.I., Kuprin A.I., Lovino N.S., Ovcharenko V.D., Sobol O.V. Ocazhdenie nanostrukturnykh pokrytij iz dvukhkomponentnykh potokov filtrovannoi vakuumno-dugovoi plazmy // Kharkovskaya nanotekhnologicheskaya assamblyta. T.1, “Vakuumnye tekhnologii i oborudovaniye, Kharkov, 2006”. – P. 173-178.
21. Kuprin A.I, Tolvachova G.N. Termicheskaya stabilnost mnogokomponentnykh nanostrukturnykh plyonok, osazhdyonnykh vakuumno-dugovym metodom // Sb. Trudov III mezhdunarodnoj konf. Fiziko-khimicheskie osnovy forvirovaniya I modifikatsii mikro- i nanostruktur, Kharkov, Ukraina, 2009. – P.193-195.
22. Aksenov I.I, Aksyonov D.S., Vasilyev V.V., Luchaninov A.A., Reshetnyak Ye.N., Strel'nitskiy V.E. Vakuumno-dugovye istochniki plazmy s dvukhkanal'nym magnitnyv fil'trom // Kharkovskaya nanotekhnologicheskaya assambleya. T.1, “Vakuumnye tekhnologii i oborudovaniye, Kharkov, 2008”. – P. 257-265.
23. Aksyonov D.S., Aksenov I.I., Luchaninov A.A., Reshetnyak E.N., Strel'nitskiy V.E. Synthesis of Ti-Si and Ti-Si-N coatings by condensation of filtered vacuum-arc plasma // VANT, ser. Vakuum, chistye materialy, sverkhprovodniki. – 2009. – No.6 (18).– P. 268-272.
24. US Patent No. US 7,381,311. Jun. 3, 2008.
25. Aksenov I.I., Aksyonov D.S., Vasilyev V.V., Luchaninov A.A., Reshetnyak E.N., Strel'nitskiy V.E. Two-Cathode Filtered Vacuum Arc Plasma Source // IEEE Trans. Plasma Sci. – 2009 – Vol. 37. – No.8. – P.1511-1516.
26. Aksyonov D.S., Aksenov I.I., Luchaninov A.A., Reshetnyak E.N., Strel'nitskiy V.E. Deposition of Ti-Al-N Coatings Using Two-Channel T-Shaped Magnetic Filter // Proc. of XXIVth ISDEIV, Braunschweig, Germany, 2010. – P.494 – 496.
27. Aksenov I.I, Belous V.A. Vysokoproizvoditel'naya vakuumno-dugovaya ustanovka dlya osazhdeniz pokrytij // VANT, ser. Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnogo materialovedeniya. – 2008. – No.2 (92). – P.108-118.
28. Aksyonov D.S., Aksenov I.I., Belous V.A., Strel'nitskiy V.E. Kontseptual'nye modeli vakuumno-dugovykh ustanovok dlya formirovaniya pokrytij iz mikro- i nanostrukturirovannykh kovpozitnykh materialov // Materialy XVII mezhdunarodnoj nauchno-technitsheskoj konferentsii “Vysokiye tekhnologii v promyshlennosti Rossii”, Moskva, Rossiya, 2011.

PACS: 29.27.Eg

ELECTRON BEAM TRANSPORT IN DIELECTRIC TUBES**O.S. Druj, V.V. Yegorenkov, A.V. Shchagin, V.B. Yuferov***National Science Center «Kharkov Institute of Physics and Technology»**Academichna str., 1, Kharkov, 61108, Ukraine**E-mail: eder07@rambler.ru**Received January 21, 2014*

The present paper outlines the results of experimental studying the transport process of pulse high-current beam of electrons about 200 ns in duration with energy under 200 keV through straight and bent glass tubes. A 17 degrees deviation of the electron beam going through the bent glass tube is demonstrated. Deviating the beam by non uniform electric field which forms inside the glass tube due to electric charge brought to the tube wall by beam electrons is assumed.

KEY WORDS: electron beam, dielectric tube, transport, pulse, high-current

ПРОХОЖДЕННЯ СИЛЬНОСТРУМОВОГО ЕЛЕКТРОННОГО ПУЧКА У ДИЕЛЕКТРИЧНИХ КАНАЛАХ**О.С. Друй, В.В. Єгоренков, А.В. Щагін, В.Б. Юферов***Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»**вул. Академічна, 1, 61108, м. Харків, Україна*

В роботі надані результати експериментального дослідження проходження сильнострумового імпульсного пучка електронів тривалістю близько 200 нс з енергією до 200 кеВ крізь пряму та зігнуту скляні трубки. Продемонстровано поворот пучка, що рухається в зігнутій скляній трубці, на кут близько 17 градусів. Висловлюється припущення, що відхилення пучка обумовлене неоднорідним електричним полем, яке утворюється всередині скляної трубки завдяки заряду, принесеному на стінки трубки електронами пучка.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: пучок електронів, діелектричний канал, транспортування, імпульсний, сильнострумовий

ПРОХОЖДЕНИЕ СИЛЬНОТОЧНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ДИЕЛЕКТРИЧЕСКИХ КАНАЛАХ**О.С. Друй, В.В. Егоренков, А.В. Щагин, В.Б. Юферов***Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»**ул. Академическая, 1, 61108, г. Харьков, Украина*

В работе приведены результаты экспериментального исследования прохождения сильноточного импульсного пучка электронов длительностью около 200 нс и энергией до 200 кэВ через прямую и изогнутую стеклянные трубки. Продемонстрирован поворот пучка, движущегося в изогнутой стеклянной трубке, на угол около 17 градусов. Предполагается, что поворот пучка обусловлен неоднородным электрическим полем, которое создается внутри стеклянной трубки благодаря заряду, принесенному на стенки трубки электронами пучка.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: пучок электронов, диэлектрический канал, транспортировка, импульсный, сильноточный

Способ транспортировки пучков заряженных частиц в вакуумных каналах с диэлектрическими стенками без применения громоздких и энергоемких внешних электромагнитных устройств привлекает в последнее время значительное внимание исследователей.

В 80х годах была экспериментально показана возможность транспортировки и фокусировки импульсных сильноточных электронных пучков в вакуумированных диэлектрических каналах благодаря электризации поверхности стенок канала, росту потенциала заряженной области до напряжения поверхностного пробоя диэлектрика, создания пристеночной плазмы и нейтрализации объемного заряда проходящего электронного пучка ионами из этой плазмы[1]. Таким образом, фронтальная часть пучка обеспечивает условия прохождения ядра пучка по каналу.

В 2000х начато изучение прохождения ионов и электронов через вакуумный канал с диэлектрическими стенками при изменении угла ориентации канала[2,3]. В этих экспериментах использовались слаботочные пучки, не создающие объемного заряда в таком канале. Обнаружено, что при повороте диэлектрического канала на несколько градусов, пучок также поворачивается на этот угол, то есть возникает самоорганизованная система пучок-канал.

В работах [4,5] описывается способ изменения направления движения пучка заряженных частиц с током до 300 мкА с помощью изогнутого диэлектрического канала и приводятся экспериментальные результаты.

С целью изучения прохождения импульсного сильноточного электронного пучка в диэлектрическом канале нами были проведены эксперименты на ускорителе ДИН2-К [6].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Ускоритель ДИН2-К состоит из генератора тока, собранного на базе конденсаторов ИКМ-50 (3 мкФ, 50 кВ), системы питания плазменных пушек на базе конденсаторов ИК-100-0.4 (0,4 мкФ, 100 кВ) и вакуумной коаксиальной линии (индуктивного накопителя), подключенной к вакуумному диоду – источнику электронного пучка.

Принципиальная схема экспериментальной установки приведена на рис.1. Генератор импульсов тока (ГИТ) через разрядник 4 соединен с катодом коаксиальной вакуумной линии 1, анодом этой линии является корпус установки. Плазменные пушки 2, расположены осесимметрично в поперечном сечении и каждая пушка запитывается от своего конденсатора через разрядник 5. Включение разрядника 4 происходит с задержкой относительно включения разрядника 5, определяемой блоком управления.

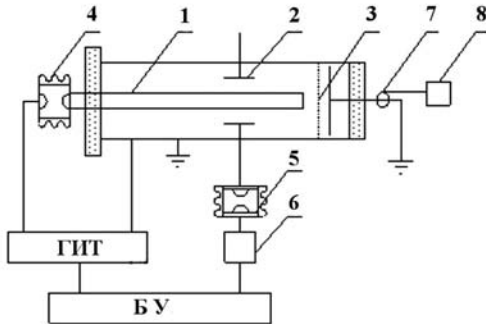


Рис. 1. Принципиальная схема установки

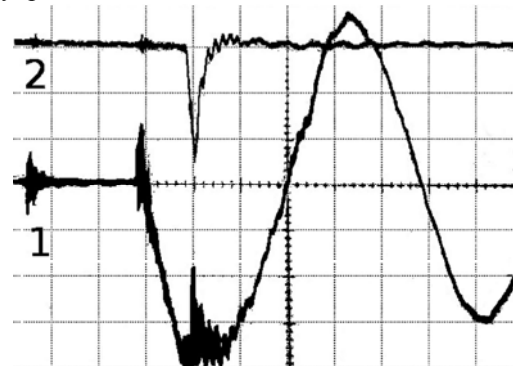


Рис. 2. Осциллограммы импульсов

После включения плазменных пушек образуется низкоомная плазменная перемычка между электродами коаксиальной линии, а после включения ГИТ энергия, запасённая в конденсаторе, передаётся в индуктивность коаксиальной линии, равную 250 нГн. При достижении максимального тока происходит размыкание плазменного ключа со скоростью роста сопротивления в цепи до 10^8 - 10^9 Ом/с [7,8]. В результате возникает импульс напряжения с амплитудой до 200 кВ при зарядном напряжении ГИТ - 25 кВ.

Анод вакуумного диода 3 - это сетка, электрически соединенная с корпусом установки. Через неё пучок электронов проходит на коллектор. Ток пучка измеряется с помощью пояса Роговского 7 осциллографом 8.

Ток пучка при импульсном напряжении до 200 кВ, составил 10 кА при длительности по полувысоте $t = 100$ нс. На рис. 2 приведены осциллограммы тока в коаксиальной линии (1) и тока электронного пучка (2). Разрешение по времени на осциллограмме – 1 мкс на клетку, по амплитуде – 0,5 В на клетку для сигнала тока в коаксиальной линии (чувствительность пояса Роговского – 35,7 мВ/кА) и 5 В на клетку для сигнала тока пучка (чувствительность пояса Роговского – 1,3 В/кА).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Эксперименты проводились со стеклянными трубками длиной 100 мм, наружным диаметром 4,3 мм внутренним диаметром — 2,7 мм. Пучок электронов входил в канал под некоторым малым углом к его оси и на внутренней поверхности канала по ходу пучка можно выделить три области прохождения: входная область, область перехода и область транспортировки пучка по каналу (рис.4б - 4г). Схема эксперимента представлена на рис.3: а) — эксперимент с прямой трубкой, б) — эксперимент с изогнутой трубкой. 1 – анод вакуумного диода, 2 – катод, 3 – стеклянная трубка, 4 – мишень, состоящая из набора алюминиевых фольг толщиной 10 мкм. Мишень находится на расстоянии 1 мм от трубки. Модель прохождения пучка заряженных частиц по диэлектрическому каналу в таком случае изложена в [9].

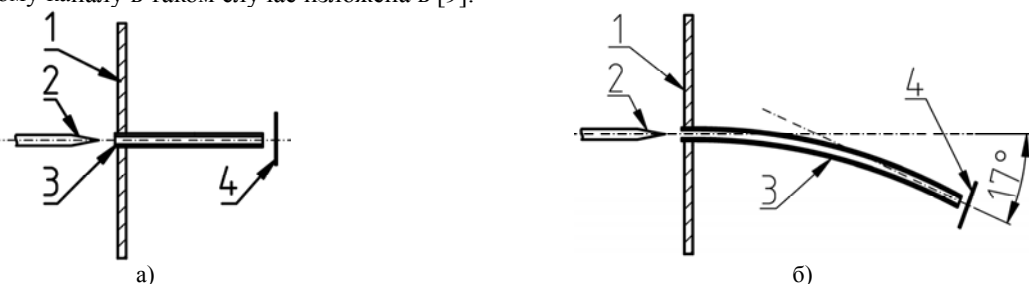


Рис. 3. Схемы эксперимента

а) - с прямой и б) - изогнутой стеклянной трубкой

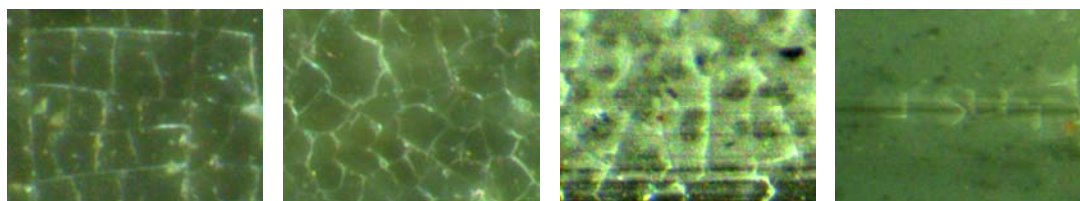
На рис. 4(а-г) показаны следы воздействия пучка на поверхность стекла.

Рис.4а — образец участка плоской стеклянной пластины, на которую нормально падал пучок электронов.

На рис.4б — автограф пучка, входящего в стеклянную трубку. Характер повреждения внутренней поверхности трубки на входном участке аналогичен тому, который наблюдался при нормальном падении пучка электронов на плоскую пластину – рис. 4а.

Далее по ходу распространения пучка на рис.4в видно уменьшение степени взаимодействия его со стенками канала и изменение характера повреждения поверхности стекла.

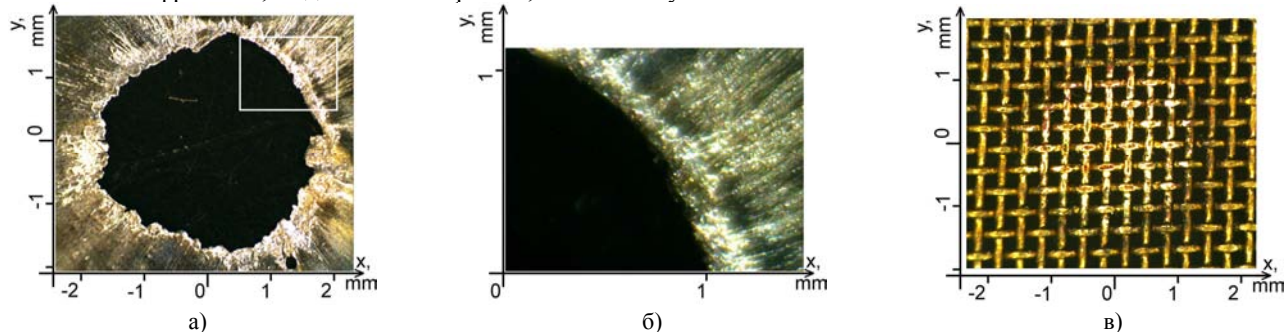
В области транспортировки пучка (рис.4г) воздействие пучка на внутреннюю поверхность канала значительно ослаблено.



а) б) в) г)
 Рис. 4. Микрофотографии поверхности стекла после воздействия на него пучка электронов

На рис. 5а показан автограф пучка, прошедшего через прямую стеклянную трубку, на первой алюминиевой фольге.

Рис.5б – фрагмент, выделенный на рис.5а, в большем увеличении.



а) б) в)
 Рис. 5. Фотографии металлических мишеней после воздействия на них пучка электронов, прошедшего через прямую трубку

На рис.5в изображен отпечаток пучка на латунной сетке (размер ячейки – 0,3мм) на выходе из канала. Видно, что пучок заполняет всё сечение канала диаметром 2,7 мм. На рис.6 показан отпечаток пучка на рентгеновской плёнке, которая размещалась на расстоянии 10 мм от края канала. Диаметр отпечатка составляет 2,3 мм.



Рис. 6. Снимок излучения на выходе из прямой трубки

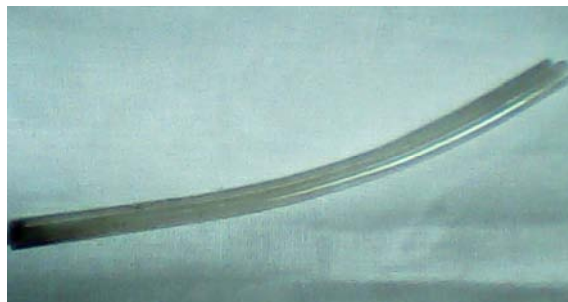


Рис. 7. Фотография изогнутой трубки, через которую проходил пучок электронов

Для проверки прохождения пучка по каналу был изготовлен изогнутый канал из стеклянной трубки (рис.7). Радиус изгиба канала равен 20 см, его длина равна 10 см, угол отклонения пучка от оси вакуумного диода на выходе из канала составил 17 градусов.

На рис.8 показан автограф пучка на третьей алюминиевой фольге на выходе изогнутого канала, а на рис.9 - отпечаток пучка на рентгеновской плёнке.

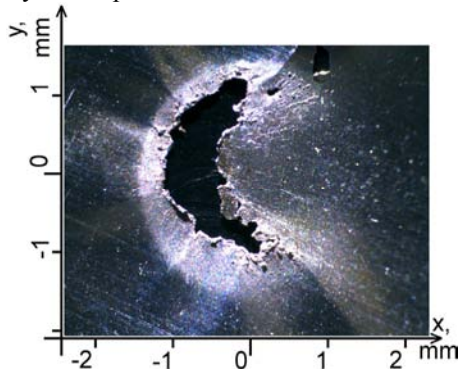


Рис. 8. Фотография металлической мишени после воздействия электронного пучка, прошедшего через изогнутую трубку

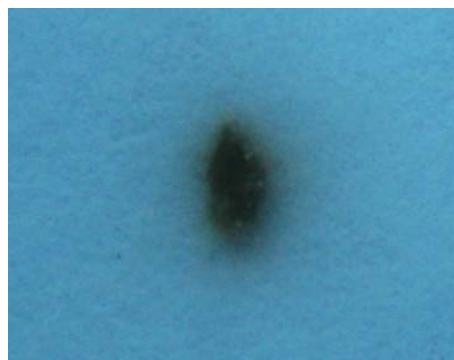


Рис. 9. Снимок излучения на выходе из изогнутой трубки

ВЫВОДЫ

Таким образом, при прохождении сильноточного пучка через стеклянный канал наблюдалось отклонение пучка каналом на 17 градусов. Данный способ изменения направления пучка позволяет во многих случаях при транспортировке пучка к приемнику излучения отказаться от громоздких внешних электромагнитных поворотных и фокусирующих устройств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Agafonov A.V., Airapetov A.Sh., Kolomenskii A.A. i dr. Rasprostraneniye i fokusirovka sil'notochnogo elektronnoho puchka v dielektricheskikh kanalakh // Fizika plazmy. – 1981. - T.7, vyp.2. - S.267-275.
2. Vokhmyanina K.A., Zhilyakov L.A., Konstantinovskii A.V. i dr. Transportirovka puchka protonov cherez kvartsevuyu trubku // Poverkhnost'. - 2005, №3. - S. 55-58.
3. Pokhil G.P., Petukhov V.P., Vokhmyanina K.A. i dr. Transportirovka i fokusirovka puchkov zaryazhennykh chastits s pomoshch'yu dielektricheskikh kanalov // Izv. RAN, seriya Fizicheskaya. - 2006,. - T.70, №6. - S.828.
4. Kumakhov M.A., Regaev R.I. Effekt mnogokratnogo beskontaktnogo povorota zaryazhennykh chastits v polom kruglom steklyannom kol'tse // ZhTF. – 2013. – T.83, vyp. 6. – S.147.
5. Kumakhov M.A. Osobennosti dvizheniya zaryazhennykh chastits v polom krughe s naelektrizovannymi stenkami // ZhTF. – 2014. - T.84, vyp. 2. - S.112.
6. Yuferov V.B., Druj O.S., Artyukh V.G., Malets V.F. Malogabaritnyi, sverkhmoshchnyi impul'snyi elektronnyi uskoritel' s SVCh-generatorom dlya oblucheniya – DIN-2K // VANT, Seriya «Fizika radiatsionnykh povrezhdenii i radiatsionnoe materialovedenie». – 1998, vyp 1(67), 2(68).
7. Bystritskii V.A., Mesyats G.A. i dr. Mikrosekundnye plazmennye preryvateli toka // Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra. – 1992. – T.23, vyp.1.
8. Yegorov O.M., Yuferov V.B., Druj O.S., Yegorenkov V.V. Plazmovyi vysokovol'tnyi rozmykach strumu // Patent Ukrayiny №103238 vid 25.09.13.
9. Stolterfoht N., Hellhammer R., Bundesmann J., Fink D., Kanai Y., Hoshino M., Kambara T., Ikeda T., and Yamazaki Y. Guiding of slow Ne⁷⁺ ions through nanocapillaries in insulating polyethelene terephthalate: Incident current dependence // Phys. Rev. A. – 2007. - Vol.76. – P.022712.

PACS: 81.30.Hd

THE FEATURES OF MULTISCALING AND HIERARCHY OF STRUCTURES IN ZIRCONIUM ALLOYS

V.G. Kirichenko

*V.N. Karazin Kharkiv National University
31 Kurchatov av., Kharkov, 61108, Ukraine*

E-mail: val_kir@mail.ru

Received December 16, 2013

The paper presents the results of experimental studies and calculations comparing the hierarchical structures at two zoom levels – nanometer and micrometer. Data about the hierarchical structures of the chain - multiscale - self-similarity structures were supplemented.

KEY WORDS: zirconium, alloys, structure, hierarchy, self-similarity

ОСОБЛИВОСТІ МУЛЬТИМАСШТАБУВАННЯ І ІЄРАРХІЇ СТРУКТУР У СПЛАВАХ ЦИРКОНІЮ

В.Г. Кіріченко

*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61108, Харків, пр. Курчатова, 31*

У роботі представлені результати експериментальних досліджень і розрахунків порівняння ієрархічних структур на двох рівнях масштабування – нанометричну і мікрометричного. Доповнені дані в ланцюжку ієрархічні структури - мультимасштабного - самоподібність структур.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: цирконій, сплави, структури, ієрархія, самоподібність

ОСОБЕННОСТИ МУЛЬТИМАСШТАБИРОВАНИЯ И ИЕРАРХИИ СТРУКТУР В СПЛАВАХ ЦИРКОНИЯ

В.Г. Кириченко

*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
61108, г. Харьков, пр. Курчатова, 31*

В статье представлены результаты экспериментальных исследований и расчетов сравнения иерархических структур на двух уровнях масштабирования – нанометрическом и микрометрическом. Дополнены данные в цепочке иерархических структур - мультимасштабность - самоподобие структур.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: цирконий, сплавы, структуры, иерархия, самоподобие

Анализ иерархической структуры твердых тел различной степени сложности строения и свойств, состава, условий деформирования успешно проводится в механике [1], при изучении функциональных материалов с заранее заданными свойствами в микро - и нанометровом пространственном масштабе [2], при исследовании измельчения кристаллической структуры при интенсивной пластической деформации твердых тел [3] и т.п. Большое внимание уделяется изучению иерархии достаточно крупных элементов земной коры [4], с продолжением иерархических рядов на микро- и наномасштабный уровень до параметров кристаллической решетки [5], а также иерархическому многомасштабному моделированию деформированных твердых тел. В [6] предложены многомасштабные критерии прочности твердых тел с иерархическими рядами элементов с размерами r_i (от 10^{-7} до 10^2 см), так что $r_i \gg r_{i+1}$ и каждый линейный размер r_i отличается от последующего r_{i+1} не меньше, чем на два порядка. Для эффективного создания моделей молекул и твердых тел на основе иерархических структур в [7] использовали общую теорию чисел с помощью введения коэффициента самоподобия структур $Q = (n+m\sqrt{l})/k$, где n, l, m, k простые числа. При умножении на Q параметров элементарной ячейки воспроизводится в реконструированных масштабах. Можно использовать [8] инвариантную меру отношения последовательных сопряженных масштабов, формирующихся в ходе эволюции иерархических структур, равная числу Φ (числу «золотого сечения»). Ряд чисел Фибоначчи, в котором $R_{n+1} = R_{n-1} + R_n$ ($R_{n-1}/R_n \rightarrow \Phi = 1,618$) является простым алгоритмом роста или уменьшения масштаба самоподобных структур. Отношения близких масштабов равны по разным оценкам составляют от 1,6 - 1,7 до $R_{n-1}/R_n = A \approx 3$. Таким образом, друг друга дополняют взаимосвязанные явления – «мультимасштабирование» - «иерархия структур» - «самоподобие структур». Близкой проблемой является и наличие согласно [3] многоярных термодинамических потенциалов межатомного взаимодействия.

Подобный подход использован для описания дефектной структуры облученных материалов на микро-, мезо- и макроуровнях [9]. Согласно этой концепции на микроуровне ядра дефектов представлены ансамблем потенциальных рельефов, реализующихся в сильно неравновесном состоянии кристалла. С учетом иерархической связи между различными структурными уровнями описана эволюция дефектной структуры, обладающей произвольным числом таких уровней [9]. Оценка критерия подобия при ионном облучении дает для параметра соответствия различие в 30-40%, что является удовлетворительным критерием на фоне идеального соответствия, равного 1 [10]. Интересным результатом является формирование новых

неравновесных радиационных состояний в металлических материалах [11]. Они появляются в твердых растворах Fe-Ni, Fe-Cr-Ni, Ni-Cr, Cu-Ni, Fe-Cr, системе V-Ti-Cr и чистых металлов (Zr, Ti) при облучении ускоренными ионами (Ar, 1 МэВ, Ar, 20-50 кэВ; Ni, 50 кэВ; в, 50 кэВ) до высокого уровня радиационных повреждений в узком диапазоне параметров облучения (дозы, температуры облучения и плотности потока). Эти эффекты сопровождаются образованием кластерных структур (30-40 Å), а также пространственно-организованных структур, которые проявляются на разных масштабных уровнях (иерархия структур).

Одним из наглядных примеров является взаимодействие топливо-оболочка в тепловыделяющем элементе (ТВЭЛ) (рис. 1), где кроме микрофотографий продольного и поперечного разреза ТВЭЛа изображены топливные таблетки в оболочке на трех этапах – до начала эксплуатации, до начала взаимодействия топливо-оболочка и после образования деформации (рис. 1в) [12].

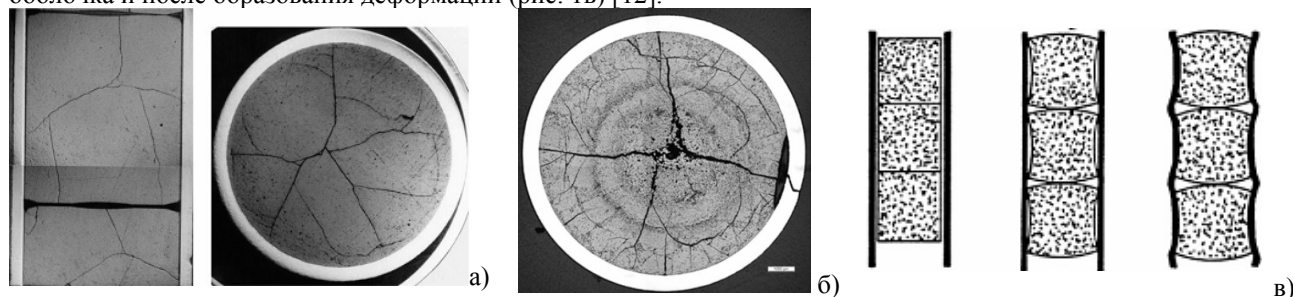


Рис. 1. Взаимодействие топливо-оболочка

а) продольный и поперечный разрез твэла, на которых видны как аксиальные, так и радиальные трещины в топливных таблетках; б) поперечный разрез ТВЭЛа с дефектом типа КРН – коррозионное растрескивание под напряжением в атмосфере агрессивных газов одна из основных радиальных трещин в таблетке, по которой газы-продукты деления поступали к оболочке и накапливались в полости образованной сколом в таблетке; в) схема образования деформации оболочки типа «бамбук» [12]

В результате растягивающие напряжения в оболочке ТВЭЛа, подкрепленные действием агрессивных продуктов деления привели к развитию исходного дефекта оболочки и, в итоге, к появлению трещины в оболочке, которая привела к разгерметизации твэла. Согласно предположениям [1-4], структуры, приведенные на рис.1 могут наглядно характеризовать смену иерархии структур при разрушении топливной таблетки и оболочки ТВЭЛа в диапазонах линейных размеров 0,001мм (рис. 1а), 0,01 мм (рис.1б), 1-10 мм (рис. 1в).

Целью настоящей работы являлось сравнительное исследование структур в альфа-цирконии и его сплавах в отсутствие внешнего воздействия на различных уровнях мультимасштабирования.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для проведения исследования были изготовлены сплавы (таблица 1). Сплавы на основе йодидного и кальциетермического циркония были приготовлены методом электроннолучевой плавки в вакууме. Слитки подвергались гомогенизирующему отжигу в вакууме $1,3 \cdot 10^{-4}$ Па в течение 50 ч при 973 К (в присутствии циркониевых опилок и стружек в качестве геттера). Затем слитки прокатывались в фольги толщиной 50 мкм при комнатной температуре. В процессе прокатки производился трехкратный промежуточный отжиг в тех же условиях каждый раз в течение 3 ч. Режим термообработки не содержал закалки из бета-области, с целью однозначной идентификации образующихся в альфа-области фаз. Рентгенографическое исследование сплавов проводили на установке ДРОН-3,0 в $\text{Cu-K}\alpha$ - излучении. Рентгеноструктурный анализ показал, что на всех этапах термомеханической обработки (ТМО) сплавов на основе циркония фазовый состав представлен только альфа-фазой Zr.

Таблица 1.

Состав сплавов на основе циркония (% , мас.)

1	Zr-1% Sn	5	Zr-0,31% Fe-0,5% Nb
2	Zr-1% Sn- 0,31% Fe	6	Zr-0,31% Fe-0,3% Mo
3	Zr-0,63% Fe	7	Zr-0,31% Fe-1 % Ta
4	Zr-0,31% Fe-0,5% V	8*	Zr-0,5% Fe - 1% Nb- 0,5% Sn

* Сплав приготовлен на основе кальциетермического циркония

Использовали просвечивающий электронный микроскоп ЭМ - 200 с разрешающей способностью 15 Å при ускоряющем напряжении 125 кВ. Анализ поверхности образцов производили с помощью сканирующего электронного микроскопа JEOL JSM-840.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В таблице 2 приведены экспериментальные значения параметров решетки сплавов циркония и отношения c/a . Анализ полученных параметров решетки альфа-циркония и построение температурных зависимостей параметров a , c и атомного объема проводили с помощью хорошо известных формул [13]: $a = 3,23118 + 16,626 \cdot 10^{-6} \cdot (T - 25) \text{ Å}$; $c = 5,14634 + 47,413 \cdot 10^{-6} \cdot (T - 25) - 32,859 \cdot 10^{-9} \cdot (T - 25)^2 - 95,161 \cdot 10^{-12} \cdot (T - 25)^3 -$

$50,722 \cdot 10^{-15} (T - 25)^4 \text{ \AA}$ (где T – температура, °C); $da / a = [a(T) - a(T=1136 \text{ K})] / a(T)$; $dT / T = (T - 1136 \text{ K}) / T$; $dV / V (< 1136 \text{ K}) = (V(T) - V(300)) / V(T)$; $dV / V (> 1136 \text{ K}) = (V(T) - V(1136 \text{ K})) / V(T)$.

Таблица 2.

Параметры решётки сплавов циркония

Сплав	$a, \text{ \AA}$	$c, \text{ \AA}$	c/a
Zr: α -фаза	3,2317	5,1476	1,5928
Zr-Fe	3,2270	5,1476	1,5952
Zr-Sn	3,2253	5,1459	1,5955
Zr-Fe-Sn	3,2281	5,1475	1,5945
Zr-Fe-Nb	3,2259	5,1451	1,5953
Zr-Fe-Mo	3,2285	5,1479	1,5944
Zr-Fe-Ta	3,2267	5,1456	1,5945
Zr-Fe-V	3,2274	5,1459	1,5950

Зависимости параметров a и c от температуры подобны, приведенным в [13]. На рис. 2,3 показаны зависимости прироста параметров da/a , dc/c и объема от температуры. В нашем случае под атомным объемом понимается объем элементарной ячейки. Наклон зависимостей da/a , dc/c от температуры различается, как и в случае зависимостей a и c от температуры, что приводит в росту значения c/a , ближе к значению $\Phi = 1,6108$.

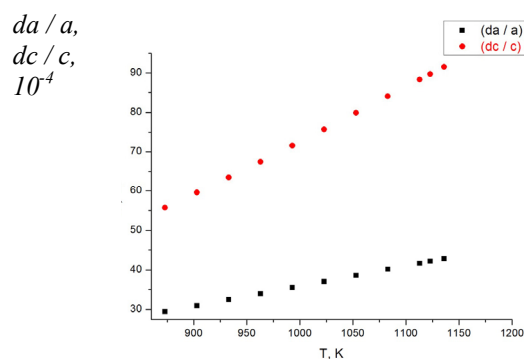


Рис. 2. Зависимости прироста параметров da/a , dc/c циркония от температуры

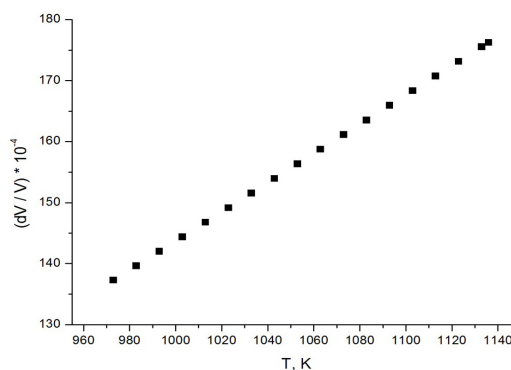


Рис. 3. Зависимость прироста объема циркония от температуры

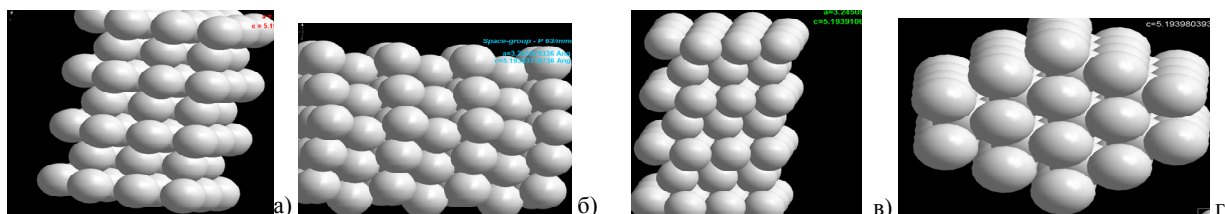


Рис. 4. Графические структуры α -Zr (исходное значение $c/a = 1,5928$) полученные с помощью программы “Diamond” в предпереходной области полиморфного превращения: а) при $T = 1133 \text{ K}$ ($c/a=1,604$); б) $T=1134 \text{ K}$; в) $T=1135 \text{ K}$ ($c/a=1,605$); г) $T=1135,9 \text{ K}$ ($c/a=1,605$)

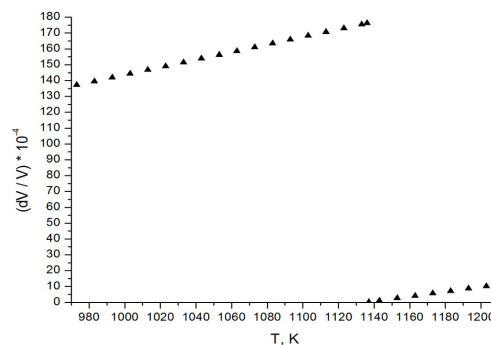
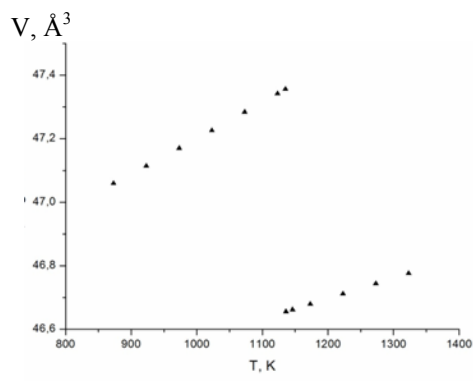


Рис. 5. Зависимости структурных параметров циркония от температуры в области полиморфного превращения а) - атомного объема; б) – относительного изменения атомного объема

На рис. 4 представлены структуры, полученные с помощью программы “Diamond” альфа-циркония в предпереходной области полиморфного превращения. С учетом известных фактов о структуре альфа – и бета-

циркония (β – Zr [ОЦК - $A2$, $a=3,61\text{\AA}$ (1143 K), пространственная группа $Im\bar{3}m$, $a/a=1$], α -Zr [ГПУ - $A3$, пространственная группа $P6_3/m$, $a=3,2317\text{\AA}$, $c=5,1476\text{\AA}$, $c/a=1,5928$,] и значений c/a , приведенных на рис. 4 можно оценить критерий подобия. При этом обращает на себя внимание скачок (рис. 5) в зависимости как V , dV/V от температуры при температуре полиморфного превращения $T=1136\text{ K}$, связанного со сменой иерархии структур при понижении температуры в последовательности β -Zr \leftrightarrow α -Zr с критерием подобия $\Phi=1,593$. Это значение отличается как от теоретического значения для плотной упаковки ($c/a=1,633$), так и предела ряда Фибоначчи ($\Phi=1,618$). Интересно отметить, что значение c/a в ряду металлов с ГПУ структурой (Zr, Ti, Hf, Y, Be) в зависимости от относительного температурного интервала существования высокотемпературной β -фазы (рис. 6) линейно спадает с ростом этого интервала, выражаемого отношением $\Delta T/T_{пл} = (T_{плавления} - T_{превращения})/T_{плавления}$. Этот спад обусловлен изменением электронной структуры атомов металлов, проявляющемся в увеличении сплюснутости электронных оболочек атомов вдоль оси c (рис. 7). На рис. 6 приведены значения c/a только для тех ГПУ металлов у которых: 1) существует полиморфное $\alpha \leftrightarrow \beta$ превращение; 2) альфа-фаза имеет ГПУ-структуру, бета-фаза имеет ОЦК-структуру. Поэтому не все ГПУ металлы могут быть представлены на рис. 6. Физической причиной образования гексагональных плотноупакованных упаковок и отклонения значений c/a от идеального является деформация сферических валентных s -орбиталей (внешних s -оболочек) за счет небольшого сжатия (на 0,7-4%) вдоль оси c у большинства ГПУ-металлов [13]. Сплюснутые вдоль оси c s -оболочки слабее перекрываются в шести направлениях $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, лежащих в плотноупакованных плоскостях (0001), и сильнее перекрываются в шести направлениях (1120). Этому отвечает 6 более длинных связей каждого атома с соседями в базисной плоскости и 6 более коротких связей атома с шестью остальными соседями (рис. 4в).

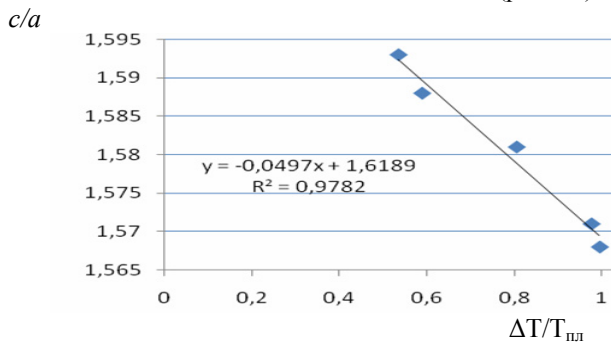


Рис. 6. Зависимость c/a от температурного интервала существования β -фазы для ГПУ – металлов

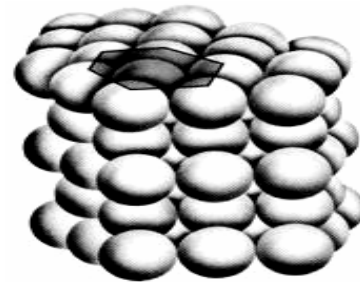


Рис. 7. Гексагональная плотная упаковка сфероидов для металлов со значениями $c/a < 1,633$ [13]

Деформация сферических s -орбиталей обусловлена такими физическими причинами: возбуждением и повышением энергии s -электронов, например, вследствие повышения температуры; возбуждением орбиталей p^6 - или d^6 - оболочки остова. В последнем случае должна возрасти s -электронная плотность в области расположения ядра атома циркония, что приводит к уменьшению изомерного сдвига на ядрах Fe^{57} по сравнению с α -Fe [14]; деформацией внешней сферической s -оболочки, расположенными внутри нее валентными d -орбиталями. Это приводит к уменьшению экранирования s -электронной плотности d -электронами, последующему увеличению s -электронной плотности в области расположения ядра атома циркония. Интересно сопоставить температурную зависимость коэффициента диффузии (рис. 8) с температурной зависимостью параметров решетки (рис. 2) и взаимной зависимости коэффициента самодиффузии от изменения атомного объема (рис. 9). Значения коэффициентов самодиффузии альфа – циркония взяты из [15]. Наблюдается линейная зависимость этих параметров от температуры, что соответствует вакансионному механизму самодиффузии в области температур около 1136 K [16], где оценка концентрации вакансий дает значение $C_v \sim 10^{-6}$. Это удовлетворительно коррелирует с данными рис. 2,3,5,6, которые иллюстрируют как линейное расширение параметров решетки a , c и атомного объема, так и вакансионный рост вдоль всех направлений.

Рассмотрим переход на микроструктурный уровень в сплавах на основе циркония. использовали набор легирующих добавок, включающий в себя $3d$ -переходные металлы: V и Fe, переходные $4d$ -металлы: Nb и Mo; и, наконец, Ta, относящийся к $5d$ -периоду. Вследствие малой растворимости легирующих добавок при легировании циркония в металлической матрице сплавов образуются нанокристаллические выделения интерметаллических фаз сложного состава (размером 10-100 нм). При этом формируется одна из наиболее важных металлических микроструктур сплава с дисперсными выделениями твердых нанокристаллических частиц в металлической матрице (рис. 10). При термомеханической обработке изменяются важные параметры, характеризующие выделения в матрице, – размер частиц и расстояния между ними, имеющие линейную взаимосвязь (рис. 11). По этим данным можно оценить параметр подобия: в этом случае $R_{n-1}/R_n \approx (1,3 - 1,8)$, в зависимости от температуры отжига, что удовлетворительно согласуется с оценкой, приведенной в [8].

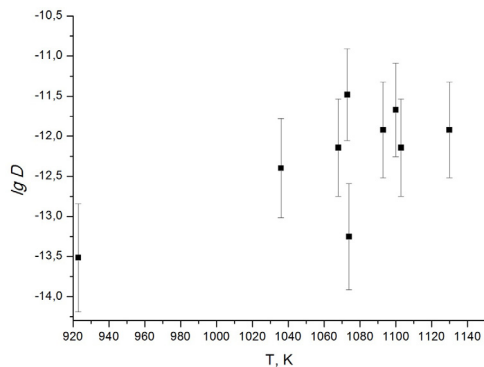


Рис. 8. Зависимость коэффициента самодиффузии циркония от температуры в альфа-области

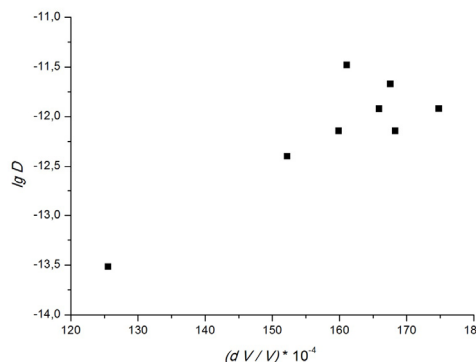


Рис. 9. Зависимость коэффициента самодиффузии циркония от изменения атомного объема

При переходе на микроструктурный уровень иерархии структур в цирконии и его сплавах, на уровень размеров зерен поликристаллических материалов (рис. 12), применяя методы оценки структур [8], получаем более высокие значения коэффициентов подобия (до 3 - 3,5). Ранее для самоподобных структур на поверхности графита [17] и циркония [18] были получены значительно большие значения коэффициентов подобия при переходе от нано - до макроструктуры ($10^2 - 10^3$).

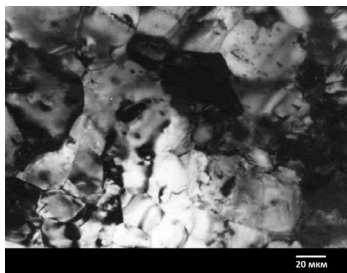


Рис. 10. Структура сплава Zr-0,31%Fe-0,51%Nb после отжига при 770 К, 15 ч.

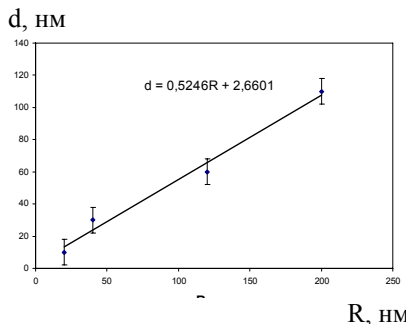


Рис. 11. Взаимосвязь среднего размера включений и средних расстояний между включениями для сплава Zr-0,31%Fe-0,51%Nb

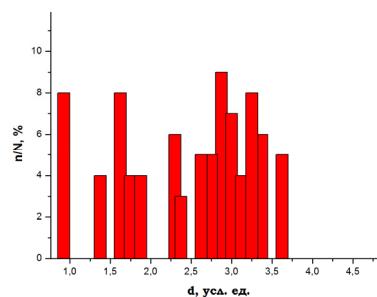


Рис. 12. Распределение среднего размера зерен в альфа-Zr в диапазоне 10-50 мкм

ВЫВОДЫ

В работе исследованы параметры иерархических структур формирующихся в цирконии и его сплавах в отсутствие внешнего воздействия. В результате анализа поведения структурных параметров в предпереходной области при полиморфном превращении определены коэффициенты подобия структур. При переходе на микроструктурный и, далее, на макроструктурный уровень наблюдается тенденция роста коэффициентов подобия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vysotskii M.S., Vityaz' P.A., Sosnovskii L.A. Mekhanotermodinamicheskaya sistema kak novyi ob'ekt issledovaniya // Mekhan. mashin, mekhan. mater. - 2011. - No.2. - S.1-8.
2. Barkalin A.V., Miklashevich I.A. Modeli deformirovaniya tverdykh tel ikh opisanie // Mikromekhanika razrusheniya v obobshchennykh prostranstvakh. - Minsk.: «Loginov», 2003. - S.1-28.
3. Panin V.E., Egorushkin V.E. Fizicheskaya mezomekhanika izmel'cheniya kristallicheskoj struktury pri intensivnoi plasticheskoj deformatsii // Fizich. Mezomekhan. - 2008. - T.11, vyp.5. - S.5-16.
4. Sadovskii M.A. Estestvennaya kuskovatost' gornoj porody // DAN SSSR. - 1979. - T.247. - No.4. - S.823-831.
5. Makarov P.V. Nagruzhaemyi material kak nelineinaya dinamicheskaya sistema. Problemy modelirovaniya // Fiz. Mezomekh. - 2005. - T.8. - No.4. - S.33-56.
6. Kornev V.M. Ierarkhiya kriteriev pochnosti strukturirovannykh khрупkikh sred // Prikladnaya mekhanika i tekhn. Fizika. -2000. - T.411. - No.2. - S.177-187.
7. Domrachev G.A. Prilozhenie teorii algebraicheskikh sistem dlya sozdaniya ierarkhicheskikh struktur tverdykh tel, obrazuyushchikhsya pri ravnoesnykh i naravnoesnykh usloviyakh // FTT. - 1999. - T.41. - Vyp.5. - S.799-804.
8. Makarov P.V. Evolyutsionnaya priroda destruktсии tverdykh tel sred // Fiz. mezomekh. - 2007. - T.10. - No.3. - S.23-38.
9. Olemskoi A.I. Theory of Structure Transformations in Non-equilibrium Condensed Matter. - N.-Y.: NOVA. - 1999, 280r.
10. Kirichenko V.G., Kovalenko T.V. Ionnoe i lazernoe obлучение spлавov tsirkoniya // The Journal of Kharkiv National University, physical series "Nuclei, Particles, Fields". - 2013. - №1060. - Iss.4(60). - S.49-57.
11. Khmelevskaya V.S.; Nakin A.V., Malynkin V.G. Nano cluster structures in irradiated metallic materials <http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/Public/32/068/32068667.pdf> - Text Version.

12. Duglas D. Metallovedenie tsirkoniya. – M.: Atomizdat, 1975. – 360 s.
13. Grigorovich V.K. Metallicheskaya svyaz' i struktura metallov. - M.: Nauka, 1988. – 296 s.
14. Kirichenko V.G., Azarenkov N.A. Yaderno-fizicheskoe metallovedenie splavov tsirkoniya. – Kh.: KhNU imeni V.N. Karazina, 2012. – 336 s.
15. Minina N.A. K voprosu o diffuzii v tsirkonii // Teplofizicheskie svoystva veshchestv i materialov. – 1983, No.19.– S.68– 81.
16. Hood G.M. The vacancy properties of α -Zr // J.Nucl.Mater. - 1981. - Vol.96. - P.372-374.
17. Babaskin A.A., Kamenskii Yu.V., Kirichenko V.G. Formirovanie raspredelennykh defektov na poverkhnosti kristallov // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2000. - №496. – Iss.4. - S.25-28.
18. Kirichenko V.G., Kuklin V.M. Osobennosti transformatsii struktury kristallov pri fazovykh prevrashcheniyakh // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2001. - №510. – Iss.1(13). - S.73-75.

PACS: 05.40.-a, 05.60.-k, 02.60.Cb

ENHANCED SURFACE DIFFUSION OF PARTICLES UNDER THE ACTION OF AN EXTERNAL TIME-PERIODIC FIELDS

I.G. Marchenko^{1,2}, I.I. Marchenko³

¹National Scientific Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"
1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine

²V.N. Karazin Kharkov National University
4 Svobody Sq., Kharkov, 61022, Ukraine

³NTU "Kharkov Polytechnic Institute"
21 Frunze St., Kharkov, 61145, Ukraine

E-mail: march@kipt.kharkov.ua

Received January 23, 2014

This paper delves into the abnormal surface diffusion of particles in external time-periodic field. The relationship of surface diffusion enhancement as a function of amplitude and frequency of external fields has been studied. It has been shown that the diffusion coefficient can significantly be increased (by several orders of magnitude) by applying external time-periodic fields. The diffusion gain ratio considerably depends on the surface temperature, external field amplitude and frequency.

KEY WORDS: diffusion, computer simulation, Langevin equation, periodic fields

ПРИСКОРЕНА ПОВЕРХНЕВА ДИФУЗИЯ ПІД ДІЄЮ ЗОВНІШНІХ ПЕРІОДИЧНИХ ПОЛІВ

I.G. Марченко^{1,2}, I.I. Марченко³

¹Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»
вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна

²Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
пл. Свободи 4, м. Харків, 61022, Україна

³НТУ «Харківський політехнічний інститут»
вул. Фрунзе 21, м. Харків 61145, Україна

У роботі методами комп'ютерного моделювання досліджується аномальна поверхнева дифузія частинок у зовнішньому періодичному у часі полі. Вивчено посилення поверхневої дифузії в залежності від амплітуди та частоти зовнішнього поля. Показано що коефіцієнт дифузії може зростати на порядки під впливом зовнішнього поля. Ступень посилення дифузії суттєво залежить від температури поверхні, амплітуди та частоти зовнішнього поля.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: дифузія, комп'ютерне моделювання, рівняння Ланжевена, періодичні поля

УСКОРЕННАЯ ПОВЕРХНОСТНАЯ ДИФФУЗИЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНИХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

I.G. Марченко^{1,2}, I.I. Марченко³, К.А. Кондратюк²

¹Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина

²Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
пл. Свободы 4, г. Харьков, 61022, Украина

³НТУ «Харьковский политехнический институт»
ул. Фрунзе 21, г. Харьков 61145, Украина

В работе методами компьютерного моделирования исследована аномальная поверхностная диффузия частиц во внешнем периодическом во времени поле. Изучено усиление поверхностной диффузии в зависимости от амплитуды и частоты внешнего поля. Показано, что коэффициент диффузии может возрастать на порядки при приложении внешнего поля. Степень усиления диффузии существенным образом зависит от температуры поверхности, амплитуды и частоты внешнего поля.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: диффузия, компьютерное моделирование, уравнения Ланжевена, периодические поля

Развитие нанofизики, интенсивные исследования в области создания микросистем с заданными свойствами вызывает повышенный интерес к исследованию направленного движения частиц по поверхности твердого тела [1,2]. Транспортировка атомов и кластеров под воздействием внешней силы, вызванной воздействием магнитных и электрических полей, лазерного облучения, внешними напряжениями и т.д. требует изучения процессов диффузии в системах с периодическим потенциалом. Поверхностная диффузия, как правило, характеризуется малыми значениями активационных барьеров и низким коэффициентом трения [3-5]. Ранее в исследованиях различных авторов было показано, что в системах, характеризующихся низким уровнем диссипации энергии, возможно возникновение особых режимов диффузии: так называемой субдиффузии и гипердиффузии [6,7]. Обычная диффузия характеризуется линейной зависимостью среднеквадратичного отклонения от времени $\langle x^2 \rangle \sim t$. В случае реализации особых режимов диффузии эта зависимость

изменяется: $\langle x^2 \rangle \sim t^n$. При $n < 1$ говорят о субдиффузии, при $1 < n < 2$ - о супердиффузии, а при $n > 2$ - о гипердиффузии. В случае $n = 2$ реализуется особый случай баллистической диффузии. Эти аномальные режимы наблюдаются только в некотором временном интервале, определяемом температурой и свойствами системы. Со временем устанавливается режим нормальной диффузии, и пространственная дисперсия в распределении частиц описывается стандартным выражением $\langle x^2 \rangle \sim t$. Однако, ограничение процессов транспорта во времени может приводить к тому, что движение частиц будет происходить в условиях сильной неравновесности, характеризующихся аномальными режимами диффузии [8]. Воздействуя на систему периодическим полем можно “законсервировать” особые режимы диффузии. Ранее в работе [9] было показано, что возможно аномальное возрастание диффузии с уменьшением температуры среды. Однако не была исследована зависимость этого явления от амплитуды действующей силы и частоты.

Целью данной статьи являлось подробное исследование этих зависимостей методами компьютерного моделирования. Возможность усиления поверхностной диффузии вдоль выбранного направления без увеличения температуры имеет огромную практическую значимость и позволяет создавать поверхностные структуры, состоящие из кластеров требуемых форм, размеров и плотности.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Движение частиц по поверхности можно описать следующей системой уравнений Ланжевена [10]:

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial}{\partial x} U(x_1, x_2) - \gamma\dot{x}_i + F_i + \xi_i(t), \quad (1)$$

где x_i – компоненты декартовых координат частицы на плоскости, t - время, m - ее масса, F_i – компоненты внешней постоянной силы, действующей на частицу, $U(x_1, x_2)$ - потенциальная энергия частицы на плоскости, γ - коэффициент трения. Член $\xi_i(t)$ описывает термические флуктуации. Точка сверху означает дифференцирование по времени. Предполагается, что шум является гауссовым белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение:

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\gamma kT \delta(t-t') \delta_{ij}, \quad (2)$$

где k - постоянная Больцмана, T - температура.

Под частицей в дальнейшем будем понимать адатом или кластер, состоящий из многих атомов, который может двигаться в периодическом потенциале. Потенциальная энергия частицы на кристаллической поверхности определяется симметрией поверхности и ее атомным составом. В простейшем случае одноатомного материала и простой прямоугольной поверхностной решетки потенциальная энергия может быть записана следующим образом [10]:

$$U = -\frac{U_0}{2} \left[\cos\left(\frac{2\pi}{a} x_1\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{b} x_2\right) \right], \quad (3)$$

где a и b - постоянные решетки вдоль осей x_1 и x_2 , а величина активационного барьера равна U_0 .

Как было показано ранее [11] в этом случае переменные x и y слабо связаны, а кинетика движения частиц определяется компонентой силы действующей вдоль данного направления. Соответственно, для упрощения вычислений можно перейти к случаю одномерного движения частицы в периодическом поле $U(x)$, которое описывает воздействие на частицу со стороны поверхности:

$$U(x) = -\frac{U_0}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{a} x\right), \quad (4)$$

где a - постоянная одномерной решетки.

На движущуюся частицу действует периодическая в пространстве сила со стороны кристаллической решетки F_{lat} :

$$F^{Lat} = -\frac{\partial U}{\partial x} = F_{cr} \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right). \quad (5)$$

Величина $F_{cr} = \frac{\pi}{a} U_0$, называемая критической силой [10], соответствует минимальной действующей силе, необходимой для преодоления энергетического барьера, разделяющего два соседних положения частицы на одномерной решетке. Параметры используемого периодического потенциала были теми же, что и в работах [8,9].

Внешнее периодическое во времени поле задавалось следующим выражением:

$$F_t(t) = F_0 \sin(\omega t), \tag{6}$$

где ω - угловая частота внешней силы, а F_0 - ее амплитуда.

Стохастические уравнения (1)-(2) для каждой частицы решались численно с шагом по времени $\Delta t \approx 0,1$ фс, что составляет менее 1/100 периода собственных колебаний. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю с количеством частиц $N = 4 \cdot 10^4$. Для проверки полученных результатов отдельные вычисления проводились с $N = 4 \cdot 10^6$. Начальные условия задавались следующим образом. Частица помещалась в начале координат и ей случайным образом сообщалась скорость, имеющая Максвелловское распределение по температуре. Затем проводилась термализация системы в течение 10^4 временных шагов. После чего частица с имеющейся скоростью перемещалась в первую элементарную ячейку.

При анализе результатов моделирования удобно перейти к безразмерным величинам времени t' , расстояния x' и температуры T' [4,6]:

$$t' = t \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{m}}; \quad x' = \frac{x}{a}; \quad T' = \frac{kT}{U_0}. \tag{7}$$

Для сопоставления данных, полученных в данной работе, с данными других авторов использовались безразмерные величины температуры T' и трения γ' [2,7].

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma' = \frac{\gamma a}{(mU_0)^{1/2}}. \tag{8}$$

Поскольку в работе изучалось недодемпфированное движение частиц, то рассматривался только случай $\gamma' < 1$.

Коэффициент диффузии вычислялся традиционным образом:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 \rangle}{2t}, \tag{9}$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по ансамблю.

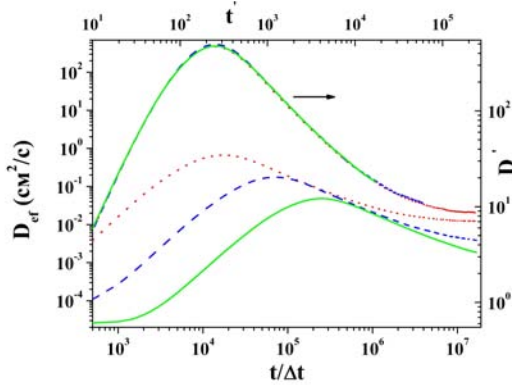


Рис. 1. Зависимость коэффициент диффузии $D_{ef}(t)$ для Pt, C, H от времени t и масштабированные зависимости D' от безразмерного времени t' . H – пунктирная линия, C – штриховая линия, Pt – сплошная линия. $T' = 0,13$, $\gamma' = 0,2$, $F = 0,15F_{cr}$.

Чтобы продемонстрировать удобство безразмерных величин нами были произведены компьютерные расчеты диффузии для атомов различных элементов. На рис. 1 приведены временные зависимости коэффициентов диффузии $D(t)$ для Pt, C, H и соответствующие безразмерные коэффициенты диффузии $D'(t')$ для температуры $T' = 0,5$. Как видно из рисунка, после соответствующих масштабных преобразований коэффициенты диффузии $D(t)$ ложатся на одну кривую диффузии $D'(t')$. Таким образом, для исследования процессов транспорта частиц под действием внешней силы достаточно получить решение для частицы только одного типа. Зависимости $D(t)$ для частиц другой массы могут быть получены путем масштабных преобразований. Поэтому в данной статье был исследован только водород. Величина U_0 составляла 80 мэВ – величину характерную для диффузии по плотноупакованным поверхностям металлов. Постоянная одномерной решетки a была выбрана равной 2 \AA .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Под воздействием постоянной силы ($\omega = 0$), в зависимости от величины $F' = F/F_{cr}$, реализуются различные режимы движения частиц. На рис. 2 приведены зависимости безразмерной дисперсии распределения частиц $\sigma^2 = \langle (x'(t) - \langle x'(t) \rangle)^2 \rangle$ от времени для различных величин внешней силы F при температуре 120 К ($T' \approx 0,13$). Как видно из рисунка, в отсутствии внешней силы, наблюдается обычная диффузия, которая описывается выражением $\langle x^2 \rangle \sim t$.

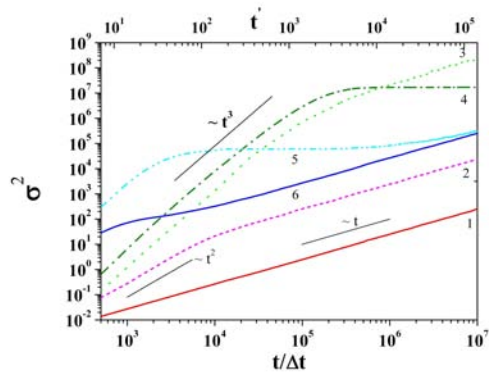


Рис. 2. Зависимость безразмерной дисперсии распределения частиц от времени для различных величин постоянно действующей силы $F' = F/F_{cr}$. Температура $T=120$ К ($T' \approx 0,13$). Кривая 1 - $F' = 0$, 2 - $F' = 0,05$, 3 - $F' = 0,09$, 4 - $F' = 0,15$, 5 - $F' = 0,4$, 6 - $F' = 0,8$, $F' = 1,0$. Отрезками сплошной линии нанесены зависимости $\sim t$, $\sim t^2$, $\sim t^3$.

силы до значения $F' = 0,8$ область гипердиффузии сокращается на порядок ($t/\Delta t < 2 \cdot 10^3$), а интервал бездиффузионного транспорта уменьшается. На больших временах ($t/\Delta t > 10^6$) на графике виден переход к режиму обычной диффузии. Когда внешняя сила достигает критического значения (кривая 7), переходные режимы диффузии практически исчезают. Как видно из графиков, кривая 7 на временах $t/\Delta t > 5 \cdot 10^3$ параллельна кривой 1, однако сдвинута относительно нее более чем на два порядка величины по оси ординат. Последующее увеличение величины F' приводит к восстановлению режима обычной диффузии во всем рассматриваемом интервале времени. Приведенные результаты хорошо коррелируют с результатами других исследователей [6-7].

Эти аномальные режимы наблюдаются только в некотором временном интервале, определяемом температурой и свойствами системы. По прошествии времени устанавливается стационарное состояние, и пространственная дисперсия в распределении частиц описывается стандартным выражением $\langle x^2 \rangle \sim t$. Приложение внешнего, периодического во времени поля, приводит к ограничению во времени аномальных режимов диффузии. В результате реализуются аномальные режимы диффузии ограниченные периодом колебания внешнего поля.

На рис. 3 показано изменение зависимостей коэффициента диффузии от частоты ω приложенного поля для различных значений амплитуды силы F_0 при постоянной температуре $T' = 0,26$. Штриховой линией нанесен уровень, соответствующий диффузии при $F' = 0$. Как видно из рисунка, воздействие внешнего периодического поля приводит к существенному усилению диффузии по сравнению с равновесным случаем. При этом степень усиления зависит от частоты приложенного поля и амплитуды силы.

Все графики на рис. 3 имеют локальный максимум вблизи собственной частоты $\omega_0 = 2\pi/\tau_0$, где τ_0 - период собственных колебаний. Однако изменение амплитуды внешней силы приводит к изменению вида графиков в низкочастотной области. Так увеличение F_0' до значения 0,10 (кривые 1-3) сопровождается усилением диффузии с ростом силы. При этом значение D' достигает насыщения и слабо изменяется при низких частотах внешнего поля. Дальнейшее увеличение силы (кривые 4-5) изменяет функциональный вид кривых. На графиках появляется низкочастотный максимум. Его величина D'_{mx} существенно выше максимума на частоте $\omega = \omega_0$, соответствующей частоте собственных колебаний частицы. Для всех графиков на рис. 3 в высокочастотной области большему значению F_0' соответствует и большая величина D' . Однако при низких частотах при $F_0' > 0,10$ меньшей силе соответствует более интенсивная диффузия. Увеличение амплитуды силы приводит к сдвигу максимума D'_{mx} в сторону более высоких частот.

Теперь рассмотрим влияние температуры на частотные зависимости диффузии. На рис. 4 приведены графики этих зависимостей при фиксированном значении $F_0' = 0,15$ для различных температур. Усиление диффузии при этом может достигать многих порядков. Как видно из рис. 4, при $T = 120$ К ($T' = 0,13$) диффузия

Увеличение силы до значения $F' = 0,05$ (кривая 2) приводит к появлению короткого участка баллистической диффузии, характеризуемого зависимостью $\sigma^2 \sim t^2$. Этот переходной режим диффузии наблюдается только на малых временах ($t/\Delta t < 5 \cdot 10^3$) и в дальнейшем диффузия по-прежнему описывается выражением (1). При дальнейшем росте силы (кривая 3) возникает участок гипердиффузии, характеризуемый кубической зависимостью дисперсии от времени. На больших временах ($t/\Delta t > 10^6$) дисперсия зависит от времени линейно. Последующее увеличение внешней силы до значения $F' = 0,15$ приводит к появлению нового типа движения частиц, характеризующегося отсутствием зависимости σ^2 от времени. Этот режим, как видно из графика, наступает после фазы гипердиффузии. Дальнейшее возрастание F' (кривая 5) расширяет область бездиффузионного транспорта. При этом фаза гипердиффузии сокращается ($t/\Delta t < 2 \cdot 10^4$). При увеличении внешней

силы до значения $F' = 0,8$ область гипердиффузии сокращается на порядок ($t/\Delta t < 2 \cdot 10^3$), а интервал бездиффузионного транспорта уменьшается. На больших временах ($t/\Delta t > 10^6$) на графике виден переход к режиму обычной диффузии. Когда внешняя сила достигает критического значения (кривая 7), переходные режимы диффузии практически исчезают. Как видно из графиков, кривая 7 на временах $t/\Delta t > 5 \cdot 10^3$ параллельна кривой 1, однако сдвинута относительно нее более чем на два порядка величины по оси ординат. Последующее увеличение величины F' приводит к восстановлению режима обычной диффузии во всем рассматриваемом интервале времени. Приведенные результаты хорошо коррелируют с результатами других исследователей [6-7].

Все графики на рис. 3 имеют локальный максимум вблизи собственной частоты $\omega_0 = 2\pi/\tau_0$, где τ_0 - период собственных колебаний. Однако изменение амплитуды внешней силы приводит к изменению вида графиков в низкочастотной области. Так увеличение F_0' до значения 0,10 (кривые 1-3) сопровождается усилением диффузии с ростом силы. При этом значение D' достигает насыщения и слабо изменяется при низких частотах внешнего поля. Дальнейшее увеличение силы (кривые 4-5) изменяет функциональный вид кривых. На графиках появляется низкочастотный максимум. Его величина D'_{mx} существенно выше максимума на частоте $\omega = \omega_0$, соответствующей частоте собственных колебаний частицы. Для всех графиков на рис. 3 в высокочастотной области большему значению F_0' соответствует и большая величина D' . Однако при низких частотах при $F_0' > 0,10$ меньшей силе соответствует более интенсивная диффузия. Увеличение амплитуды силы приводит к сдвигу максимума D'_{mx} в сторону более высоких частот.

Теперь рассмотрим влияние температуры на частотные зависимости диффузии. На рис. 4 приведены графики этих зависимостей при фиксированном значении $F_0' = 0,15$ для различных температур. Усиление диффузии при этом может достигать многих порядков. Как видно из рис. 4, при $T = 120$ К ($T' = 0,13$) диффузия

увеличивается более чем на семь порядков. Чем ниже температура, тем больше значение D'_{mx} . Уменьшение температуры так же приводит к сдвигу максимума в область низких частот. Так же как и на рис. 3 все частотные кривые на рис. 4 имеют два максимума. Высокочастотный локальный максимум соответствует значению $\omega \approx \omega_0$. Однако значение коэффициента диффузии в низкочастотном максимуме D'_{mx} отличается на несколько порядков от высокочастотного $D'(\omega_0)$. При этом, чем меньше температура, тем больше максимальное значение D'_{mx} . Такое anomальное поведение диффузии имеет иную природу, чем исследованное ранее в работе [9], поведение диффузии частиц под воздействием постоянной силы. Экспоненциальный рост D' с уменьшением температуры под воздействием постоянной силы определялся экспоненциальным увеличением времени релаксации. При этом выход на стационарную зависимость $\langle \sigma^2 \rangle \sim t$ происходил через значительный промежуток времени t_{stc} . Однако, при воздействии периодической силы имеется естественное ограничение на время установления распределения, определяемое периодом колебаний внешнего поля τ . В этом случае anomальная температурная зависимость ускоренной диффузии связана с существованием ограниченных во времени режимов гипердиффузии. При этом степень усиления диффузии зависит от соотношения между t_{stc} и периодом колебаний τ .

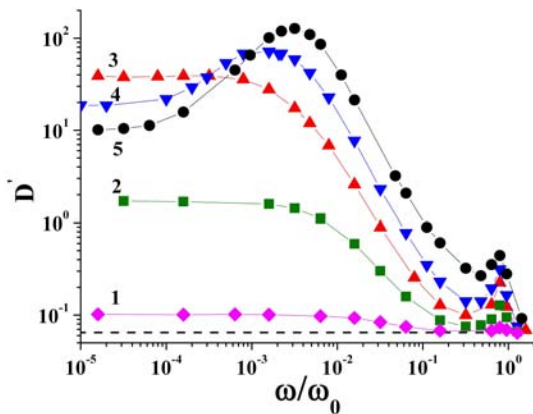


Рис. 3. Зависимость коэффициента диффузии D' от частоты внешнего поля для различных значений амплитуд внешнего поля F' . $T=240\text{K}$ ($T' = 0,26$). Кривая 1 - $F' = 0,02$, 2 - $F' = 0,06$, 3 - $F' = 0,1$, 4 - $F' = 0,15$, 5 - $F' = 0,25$.

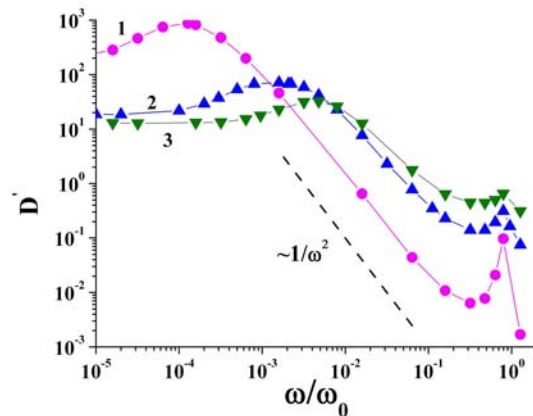


Рис. 4. Зависимость коэффициента диффузии D' от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля $F' = 0,15$. 1 - $T=120\text{K}$ ($T' = 0,13$), 2 - $T=240\text{K}$ ($T' = 0,26$), 3 - $T=360\text{K}$ ($T' = 0,53$).

На рис. 5 приведена зависимость безразмерной дисперсии распределения частиц от времени при действии на них постоянной силы $F' = 0,25$. Как следует из верхнего графика, фаза гипердиффузии ограничена временем $t_{hpr} < 200\tau_0$. В нижней части рис. 5 показано изменение безразмерной кинетической температуры $T^* = \frac{m}{U_0} \langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle$ со временем. Из графиков на рис. 5 следует, что окончание “всплеска” T^* совпадает с завершением фазы гипердиффузии. Таким образом, по изменению динамической температуры можно восстанавливать интервалы фаз гипердиффузии.

На рис. 6 приведено изменение T^* для одного периода внешних колебаний, соответствующего различным частотам внешнего поля. В верхней части рисунка приведен график для высокой частоты $\omega/\omega_0 = 3,2 \cdot 10^{-1}$, посредине – для $\omega/\omega_0 = 3,2 \cdot 10^{-3}$, а внизу – для низкой частоты $\omega/\omega_0 = 1,6 \cdot 10^{-5}$. Как следует из верхнего графика, для частоты $\omega/\omega_0 = 3,2 \cdot 10^{-1}$ кинетическая температура в максимуме не превышает 0,5. При частоте, соответствующей максимальному коэффициенту диффузии D'_{mx} для данной температуры теплового резервуара T , кинетическая температура T^* достигает 6,0. Дальнейшее уменьшение частоты поля приводит к снижению T^* . При этом вид кривой на нижнем графике отличается от среднего и верхнего. Видно, что в течение одного периода колебаний наблюдается четыре резких всплеска T^* . В остальное время $T^* \approx T$. Дальнейшее уменьшение частоты не изменяет характер нижнего графика, а лишь приводит к увеличению интервала между пиками. Таким образом, увеличение D' происходит лишь в интервалах времени связанных с фазой гипердиффузии.

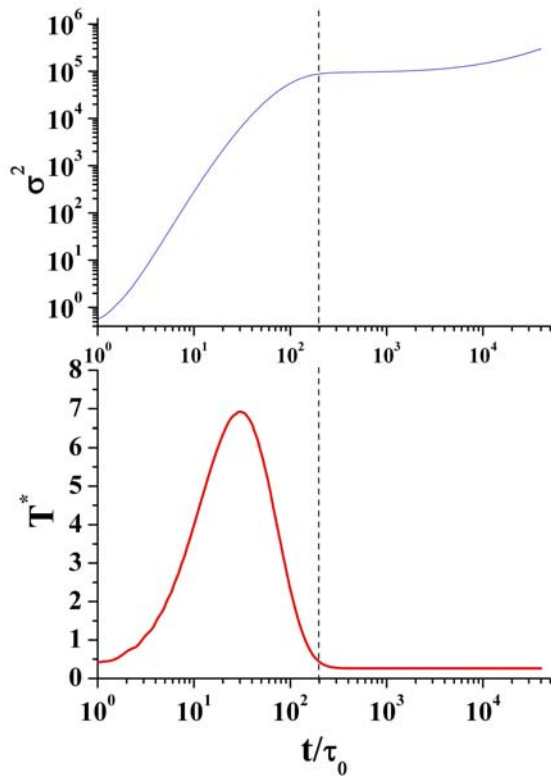


Рис. 5. Зависимость безразмерной дисперсии и динамической температуры частиц от времени. Пунктиром показано окончание фазы гипердиффузии. $F' = 0,25$. $T=240K$ ($T' = 0,26$).

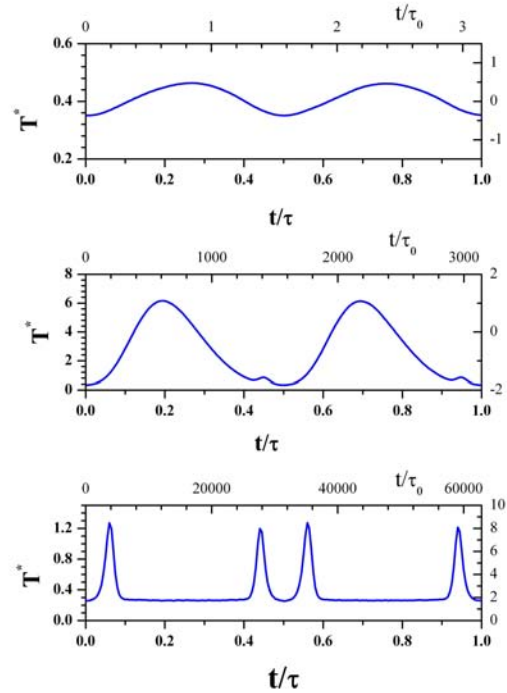


Рис. 6. Зависимость безразмерной динамической температуры от времени для различных частот внешнего поля ω . Вверху $\omega / \omega_0 = 3,2 \cdot 10^{-1}$, посередине - $\omega / \omega_0 = 3,2 \cdot 10^{-3}$, внизу - $\omega / \omega_0 = 1,6 \cdot 10^{-5}$ $F' = 0,15$. $F' = 0,25$, $T=240K$ ($T' = 0,26$). τ - период внешних колебаний, τ_0 - период собственных колебаний.

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод о том, что при стремлении частоты к нулю коэффициент диффузии должен стремиться к величине $D(\omega = 0)$, соответствующей действию постоянной силы. Учитывая взаимосвязь между кинетической температурой и режимом гипердиффузии, зависимость коэффициента диффузии от частоты для случая низких частот ($\tau \gg t_{hpr}$) качественно можно представить в следующем виде:

$$D(\omega) = D(0) + \omega\beta(T), \quad \omega \rightarrow 0, \tag{10}$$

где β не зависит от частоты поля.

В случае высоких частот ($\tau < t_{hpr}$) режим гипердиффузии ограничен по времени не $t_{hpr}(T)$, а периодом колебания внешнего поля. Поскольку в режиме гипердиффузии $\sigma^2 \sim t^3$, то для высоких частот коэффициент диффузии будет уменьшаться с частотой как

$$D(\omega) = \frac{\alpha}{\omega^2}, \tag{11}$$

где α так же не зависит от частоты поля.

ВЫВОДЫ

В работе исследовано anomальное возрастание поверхностной диффузии с уменьшением температуры во внешнем периодическом поле. Показано что степень усиления диффузии существенным образом зависит от частоты и амплитуды поля.

Проведенные исследования открывают новые возможности для создания поверхностных микроструктур с требуемыми свойствами. Особенно это актуально для низкотемпературных методов чувствительных к термическому воздействию. Примером такой методики является рост кластеров на буферном слое (BLAG) [13].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Prakash S., Karacor M.B., Banerjee S. Surface modification in microsystems and nanosystems // Surf. Sci. Rep. – 2009.- Vol. 64.- P. 233-254.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys.- 2009. Vol. 81. - P. 337-442.
3. Bruch L.W., Diehl R.D., Venables J.A. Progress in the measurement and modeling of physisorbed layers // Rev. Mod. Phys. - 2007. - Vol. 79. - P.1381- 1454.
4. Antczak G., Ehrlich G. Jump processes in surface diffusion // Surf. Sci. Rep. - 2007. - Vol. 62. - P. 39–61.
5. Krim J. Friction and energy dissipation mechanisms in adsorbed molecules and molecularly thin films // Advances in Physics.- 2012. - Vol. 61, No. 3. - P. 155–323.
6. Lindenberg K., Sancho J.M., Lacasta A. M., Sokolov I.M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential // Phys. Rev. Let. - 2007. - Vol. 98. - P. 020602.
7. Sancho J.M., Lacasta A.M. The rich phenomenology of Brownian particles in nonlinear potential landscapes // Eur. Phys. J. Special Topics. - 2010. - Vol. 187. - P. 49–62.
8. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Diffusion in the systems with low dissipation: Exponential growth with temperature drop // Europhysics Letters. - 2012. - Vol. 100. - P. 5005.
9. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Anomalous temperature dependence of diffusion in crystals in time-periodic external fields // JETP Letters. - 2012. - Vol. 95, No. 3. - P. 137–142.
10. Lindenberg K., Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H. Transport and diffusion on crystalline surfaces under external forces // New Journal of Physics. - 2005. - Vol. 7. - P. 29.
11. Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H., Sokolov I.M., Lindenberg K. From subdiffusion to superdiffusion of particles on solid surfaces // Phys. Rev. – 2004. - Vol. E70. - P. 051104.
12. Zheng C.Z., Yeung C.K., Loy M.M.T., Xiao X. Quantum Diffusion of H on Pt(111): Step Effects // Phys. Rev. Let. - 2006. - Vol. 97. - P. 166101.
13. Huang L., Chey S.J., Weaver J.H. Buffer-Layer-Assisted Growth of Nanocrystals: Ag-Xe-Si(111) // Phys. Rev. Let. - 1998.- Vol. 80. - P. 4095–4098.

PACS: 28.20.Fc, 06.90.+v

NEUTRON-ABSORBING METHOD FOR CONCENTRATIONS MEASURING OF A BORON-10 ISOTOPE IN WATER SOLUTION OF BORIC ACID AND WATER SOLUTION OF BORIC ACID

A.N. Orobinskiy

National Scientific Centre «Institute of Metrology»

42, Mironosickaya Str., Kharkov, 61002, Ukraine

E-mail: orobin@mail.ru

Received November 20, 2013

Formulas for the concentrations calculation of a boron-10 isotope and boric acid in water solution; the equation of concentration measurements, dependences of concentration on quantity of atoms of a boron-10 isotope were received; the analysis of these dependences was made. Formulas for calculation of an error of the analyzer of solution neutron are given.

KEY WORDS: boron-10 isotope, boric acid, atomic fraction, molar mass, amount of atoms, concentration of boron-10 isotope in water solution of boric acid, concentration of boric acid in water solution, neutron analyzer of solution

ВИМІРЮВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙ ІЗОТОПУ БОР-10 ТА БОРНОЇ КИСЛОТИ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ НЕЙТРОННО-АБСОРБЦІЙНИМ МЕТОДОМ

А.М. Оробінський

Національний науковий центр «Інститут метрології»

вул. Мירוносицька 42, м. Харків, 61002, Україна

Отримано формули для розрахунку концентрацій ізоотопу бор-10 та борної кислоти у водному розчині, рівняння для вимірювання концентрацій, залежність концентрацій від кількості атомів ізоотопу бор-10, виконано аналіз цих залежностей. Наведено формули для розрахунку похибки нейтронного аналізатора розчину.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ізоотоп бор-10, борна кислота, атомна частка, молярна маса, кількість атомів, концентрація ізоотопу бор-10 у водному розчині борної кислоти, концентрація борної кислоти у водному розчині, нейтронний аналізатор розчину

ИЗМЕРЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ИЗОТОПА БОР-10 И БОРНОЙ КИСЛОТЫ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ НЕЙТРОННО-АБСОРБЦИОННЫМ МЕТОДОМ

А.Н. Оробинский

Национальный научный центр «Институт метрологии»

ул. Мироносицкая 42, г. Харьков, 61002, Украина

Получены формулы для расчета концентраций иотопа бор-10 и борной кислоты в водном растворе, уравнения измерений концентраций, зависимости концентраций от количества атомов иотопа бор-10, выполнен анализ этих зависимостей. Приведены формулы для расчета погрешности нейтронного анализатора раствора.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: иотопа бор-10, борная кислота, атомная доля, молярная масса, количество атомов, концентрация иотопа бор-10 в водном растворе борной кислоты, концентрация борной кислоты в водном растворе, нейтронный анализатор раствора

Для обеспечения ядерной безопасности атомных станций (АС) в контурах систем аварийного охлаждения активной зоны ядерного реактора применяют водный раствор борной кислоты, что позволяет компенсировать запас реактивности реактора, который необходим для поддержания реактора в критическом состоянии, что обеспечивает его работу на постоянном уровне мощности в течение всей кампании. При этом очень сильное влияние борной кислоты на реактивность позволяет использовать изменение её концентрации в нескольких системах безопасности, которые способны вводить в теплоноситель первого контура большие объёмы воды с высокой концентрацией борной кислоты для прекращения цепной реакции. Для компенсации выгорания ядерного топлива во время кампании концентрация борной кислоты плавно уменьшается путем водообмена.

При измерении концентраций иотопа бор-10 в водном растворе борной кислоты и борной кислоты в водном растворе применяют нейтронно-абсорбционный метод, который хорошо известен [1–4]. Но, несмотря на это, в литературе очень мало информации об измерении концентраций: не приведены формулы для расчета концентраций, зависимости концентраций от количества атомов иотопа бор-10, уравнения измерений концентраций, не определена погрешность нейтронного анализатора раствора.

Цель работы – получить формулы для расчета концентраций иотопа бор-10 в водном растворе борной кислоты и борной кислоты в водном растворе в зависимости от количества атомов иотопа бор-10 и атомной доли иотопа бор-10, выполнить анализ этих зависимостей; получить уравнения измерений концентраций; определить погрешность нейтронного анализатора раствора.

КОНЦЕНТРАЦИИ ИЗОТОПА БОР-10 И БОРНОЙ КИСЛОТЫ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

При измерении концентрации иотопа ^{10}B в водном растворе борной кислоты ($C_{10\text{B}}$) или борной кислоты в

водном растворе ($C_{H_3BO_3}$) нейтронно-абсорбционным методом, который основан на взаимодействии (поглощение и отражение) тепловых нейтронов с атомами изотопов ^{10}B и ^{11}B , применяют нейтронные анализаторы раствора (НАР) [3,4]; для регистрации тепловых нейтронов – газоразрядные счетчики нейтронов [5].

Под концентрацией понимаем массовую долю изотопа ^{10}B или H_3BO_3 в водном растворе [6]. Сечение взаимодействия тепловых нейтронов с энергией 0,0253 эВ с атомами изотопа ^{10}B равно $\sigma_{^{10}B} = 3820,5$ барн, с атомами изотопа ^{11}B – $\sigma_{^{11}B} = 0,05$ барн [7]. Поэтому считаем, что тепловые нейтроны взаимодействуют только с атомами изотопа ^{10}B . Скорость счета импульсов на выходе НАР зависит от количества атомов ^{10}B , следовательно, зависит от $C_{^{10}B}$ или $C_{H_3BO_3}$. Чем больше атомов изотопа ^{10}B , тем больше поглощение и меньше отражение тепловых нейтронов от атомов изотопа ^{10}B , следовательно, меньше скорость счета импульсов.

Концентрации $C_{^{10}B}$ и $C_{H_3BO_3}$ равны

$$C_{^{10}B} = \frac{m_{^{10}B}}{m_{\Sigma}}, \quad C_{H_3BO_3} = \frac{m_{H_3BO_3}}{m_{\Sigma}}, \quad (1)$$

где $m_{^{10}B}$ – масса изотопа ^{10}B ; $m_{H_3BO_3}$ – масса H_3BO_3 ; $m_{\Sigma} = m_{H_3BO_3} + m_{H_2O}$ – масса раствора; m_{H_2O} – масса дистиллированной воды.

На практике пользуются физической величиной «массовая концентрация» [6], которая равна $C_V^{^{10}B} = \frac{m_{^{10}B}}{V_{\Sigma}}$ или $C_{VH_3BO_3} = \frac{m_{H_3BO_3}}{V_{\Sigma}}$, где V_{Σ} – суммарный объем раствора. Объем вследствие расширения или сжатия зависит от температуры, следовательно, $C_V^{^{10}B}$ или $C_{VH_3BO_3}$ также зависят от температуры. Поэтому корректней применять физическую величину «концентрация или массовая доля», которая не зависит от температуры.

Соотношение между $C_{VH_3BO_3}$ и $C_{H_3BO_3}$ равно $C_{VH_3BO_3} = \rho_{\Sigma} \cdot C_{H_3BO_3}$, где ρ_{Σ} – плотность водного раствора борной кислоты.

Молекула H_3BO_3 состоит из 3 атомов водорода, 3 атомов кислорода и атома бора, который имеет два изотопа: ^{10}B и ^{11}B .

Приведем молярные массы химических компонент борной кислоты. Молярная масса (M) численно равна относительной атомной массе атома (A_r) или молекулы (M_r). Размерности: $[M] = \text{г/моль}$, $[A_r] = [M_r] = \text{а.е.м.}$ $M_B = \eta \cdot A_{r^{10}B} + (1-\eta) \cdot A_{r^{11}B}$, $M_{^{10}B} = \eta \cdot A_{r^{10}B}$, $M_{^{11}B} = (1-\eta) \cdot A_{r^{11}B}$ – молярные массы атомов бора, изотопов ^{10}B и ^{11}B , соответственно; η – атомная доля изотопа ^{10}B ; $M_{H_3BO_3} = 3 \cdot A_{rH} + 3 \cdot A_{rO} + M_B$ – молярная масса молекулы H_3BO_3 ; $A_{r^{10}B} = 10,0129$ и $A_{r^{11}B} = 11,0093$ – относительные атомные массы атомов ^{10}B и ^{11}B [8]; $A_{rH} = 1,00794$ и $A_{rO} = 15,9994$ – относительные атомные массы атомов водорода и кислорода [8].

С учетом значений $A_{r^{10}B}$ и $A_{r^{11}B}$ запишем $M_{^{10}B} = 10 \cdot \eta$, $M_{^{11}B} = 11 \cdot (1-\eta)$, $M_B = 11 - \eta$. Следовательно, $M_{H_3BO_3} = 62 - \eta$. Атомная доля (η) изотопа ^{10}B равна

$$\eta = \frac{N_{^{10}B}}{N_B} = \frac{N_{^{10}B}}{N_{^{10}B} + N_{^{11}B}}, \quad (2)$$

где N_B , $N_{^{10}B}$ и $N_{^{11}B}$ – количество атомов бора, изотопов ^{10}B и ^{11}B , соответственно.

Атомная доля изотопа ^{10}B в природном боре равна $\eta_0 = 0,198$ [9, с. 55]. Определим соотношение между $C_{^{10}B}$ и $C_{H_3BO_3}$ в водном растворе H_3BO_3 . С учетом (1) и значений $M_{H_3BO_3}$ и $M_{^{10}B}$ запишем

$$\beta = \frac{C_{H_3BO_3}}{C_{^{10}B}} = \frac{m_{H_3BO_3}}{m_{^{10}B}} = \frac{M_{H_3BO_3}}{M_{^{10}B}} = \frac{62 - \eta}{10 \cdot \eta}. \quad (3)$$

Количество атомов бора в борной кислоте с массой $m_{H_3BO_3}$ равно количеству молекул H_3BO_3 :

$N_B = N_{H_3BO_3} = \frac{N_A}{M_{H_3BO_3}} \cdot m_{H_3BO_3}$, где $N_A = 6,02214 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ – постоянная Авогадро. С учетом (2) количество

атомов изотопа ^{10}B представим в виде $N_{10\text{B}} = \frac{\eta \cdot N_A}{M_{\text{H}_3\text{BO}_3}} \cdot m_{\text{H}_3\text{BO}_3} = 0,1 \cdot N_A \cdot m_{10\text{B}}$, откуда найдем

$m_{10\text{B}} = \frac{10 \cdot N_{10\text{B}}}{N_A}$. Подставив $m_{10\text{B}}$ в (1) и учитывая (3), получим

$$\left. \begin{aligned} C_{10\text{B}} &= \frac{10 \cdot N_{10\text{B}}}{N_A \cdot m_{\Sigma}} \\ C_{\text{H}_3\text{BO}_3} &= \frac{(62 - \eta) \cdot N_{10\text{B}}}{\eta \cdot N_A \cdot m_{\Sigma}} \end{aligned} \right\}, \quad (4)$$

где размерность концентраций $[C] = \frac{\text{кг}^2}{\text{кг}^2} = \frac{\text{г}}{\text{г}}$, если $[m_{\Sigma}] = \text{г}$.

На АС с реакторами типа ВВЭР в системах борного регулирования диапазон изменения концентрации $C_{10\text{B}}$ ($C_{\text{H}_3\text{BO}_3}$) находится в диапазоне от 0 кг/кг до 0,0016 кг/кг (от 0 кг/кг до 0,05 кг/кг) или $C_{V^{10}\text{B}}$ ($C_{V\text{H}_3\text{BO}_3}$) – в диапазоне от 0 кг/м³ до 1,6 кг/м³ (от 0 кг/м³ до 50 кг/м³) [2]. Поэтому при построении зависимостей $C_{10\text{B}} = f(N_{10\text{B}})$ (рис. 1), $C_{\text{H}_3\text{BO}_3} = f(N_{10\text{B}})$ (рис. 2) и $C_{\text{H}_3\text{BO}_3} = f(\eta)$ (рис. 3) количество атомов изотопа ^{10}B выбрано таким образом, чтобы значения $C_{10\text{B}}$ и $C_{\text{H}_3\text{BO}_3}$ находились в вышеприведенных диапазонах.

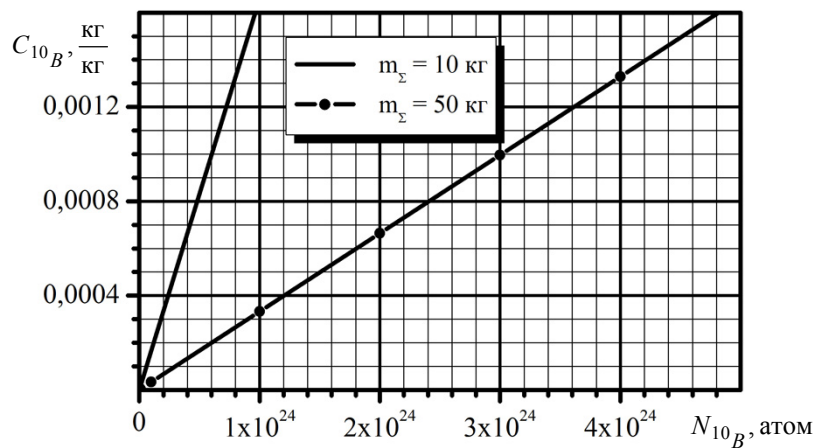


Рис. 1. Зависимости $C_{10\text{B}} = f(N_{10\text{B}})$.

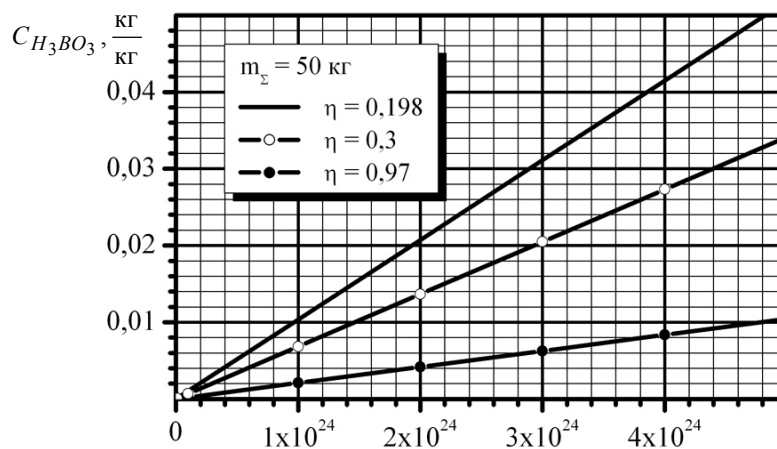


Рис. 2. Зависимости $C_{\text{H}_3\text{BO}_3} = f(N_{10\text{B}})$.

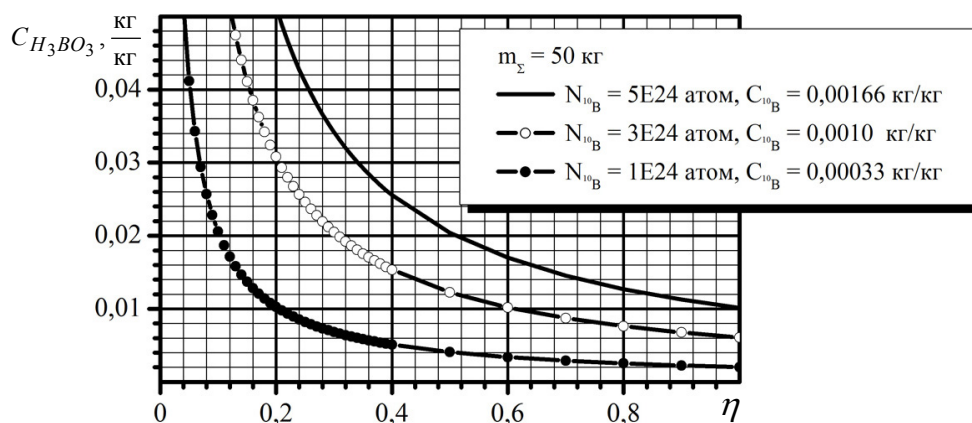


Рис. 3. Зависимости $C_{H_3BO_3} = f(\eta)$.

Выполним анализ зависимостей $C_{10B} = f(N_{10B})$ и $C_{H_3BO_3} = f(N_{10B})$. Массу раствора с учетом (3) представим в виде $m_{\Sigma} = \frac{(62 - \eta) \cdot N_{10B}}{\eta \cdot N_A} + m_{H_2O}$, где $m_{H_3BO_3} = \frac{(62 - \eta) \cdot N_{10B}}{\eta \cdot N_A}$.

1). C_{10B} и $C_{H_3BO_3}$ линейно зависят от N_{10B} и обратно пропорционально от m_{Σ} (рис. 1, рис. 2).

$$C_{10B} = f(N_{10B}) \Big|_{m_{\Sigma} = Const} = Const.$$

2). $C_{H_3BO_3}$ нелинейно зависит от η . $C_{H_3BO_3}$ уменьшается с ростом η (рис. 3), т.к. согласно (3) уменьшается

$$m_{H_3BO_3}. \text{ При } N_{10B} = Const \text{ (} K_{10B} = Const \text{) и } m_{\Sigma} = Const \text{ согласно второй формуле (4): } \frac{C_{1H_3BO_3}}{C_{2H_3BO_3}} = \frac{\eta_2 \cdot (62 - \eta_1)}{\eta_1 \cdot (62 - \eta_2)}.$$

3). N_{10B} можно изменить либо, изменяя массу H_3BO_3 при $\eta = Const$, либо применять H_3BO_3 с различными значениями η . Из (2) следует, что $N_{10B} = \frac{\eta}{1 - \eta} \cdot N_{11B}$.

4). $m_{\Sigma} = Const$ и $\eta = Const$. С ростом N_{10B} : C_{10B} и $m_{H_3BO_3}$ увеличиваются, следовательно, m_{H_2O} уменьшается.

5). $m_{\Sigma} = Const$ и $N_{10B} = Const$. С ростом η : $C_{10B} = Const$, $m_{H_3BO_3}$ уменьшаются, следовательно, m_{H_2O} увеличивается.

6). $N_{10B} = Const$ и $\eta = Const$. С ростом m_{Σ} : C_{10B} уменьшается, $m_{H_3BO_3} = Const$, следовательно, m_{H_2O} увеличивается.

7). $C_{10B} = Const$ и $\eta = Const$. С ростом N_{10B} : $m_{H_3BO_3}$ увеличивается, следовательно, $m_{H_2O} = Const$ и m_{Σ} увеличивается.

УРАВНЕНИЯ ИЗМЕРЕНИЙ C_{10B} И $C_{H_3BO_3}$

Зависимости $C_{10B} = f\left(\frac{1}{n}\right)$ или $C_{H_3BO_3} = f\left(\frac{1}{n}\right)$, где согласно (4) $C_{H_3BO_3} = \beta \cdot C_{10B}$, являются уравнениями измерений, которые аппроксимируют степенным полиномом [2], т.е.

$$C_{0j^{10B}} = a_n \cdot \left(\frac{n_{0max}}{n_{0j}}\right)^n + a_{n-1} \cdot \left(\frac{n_{0max}}{n_{0j}}\right)^{n-1} + \dots + a_1 \cdot \left(\frac{n_{0max}}{n_{0j}}\right) + a_0, \quad (5)$$

где a_i – коэффициенты полинома n-ой степени, $i = 0, 1, \dots, n$;

$j = 1, \dots, m$ – количество точек аппроксимации;

n_{0max} – максимальная скорость счета импульсов при $C_{0j^{10B}} = 0$ (дистиллированная вода);

n_{0j} – скорость счета импульсов при $C_{0j^{10B}}$.

Индекс «0» здесь и далее указывает на то, что значения $C_{0j,10B}$, n_{0max} и n_{0j} измерены при построении полинома аппроксимации $C_{0j,10B} = f(n_{0j})$.

Аппроксимацию выполним методом наименьших квадратов (МНК).

Получим систему условных уравнений

$$\begin{cases} C_{01} = a_n \cdot x_{01}^n + a_{n-1} \cdot x_{01}^{n-1} + \dots + a_1 \cdot x_{01} + a_0 \\ C_{02} = a_n \cdot x_{02}^n + a_{n-1} \cdot x_{02}^{n-1} + \dots + a_1 \cdot x_{02} + a_0 \\ \dots \\ C_{0m} = a_n \cdot x_{0m}^m + a_{n-1} \cdot x_{0m}^{n-1} + \dots + a_1 \cdot x_{0m} + a_0 \end{cases}, \tag{6}$$

где $x_{0j} = \frac{n_{0max}}{n_{0j}}$; j – строка; i – столбец; $C_{0j} = C_{0j,10B}$.

Система уравнений (6) имеет одно решение, если $m > n + 1$.

Разность между эталонной концентрацией (C_{0j}) и концентрацией, рассчитанной при помощи полинома n-ой степени, представим в виде

$$\delta_j = C_{0j} - (a_n \cdot x_{0j}^n + a_{n-1} \cdot x_{0j}^{n-1} + \dots + a_1 \cdot x_{0j} + a_0).$$

Согласно МНК сумма квадратов этих разностей должна быть минимальной, т.е.

$$S = \sum_{j=1}^m \delta_j^2 = \sum_{j=1}^m (C_{0j} - a_n \cdot x_{0j}^n - a_{n-1} \cdot x_{0j}^{n-1} - \dots - a_1 \cdot x_{0j} - a_0)^2 = \min. \tag{7}$$

Выражение (7) справедливо, если $\frac{\partial S}{\partial a_i} = 0$, $i = 0, \dots, n$.

Следует отметить, чем больше m, тем S меньше.

После дифференцирования (7) и математических преобразований получим систему нормальных уравнений

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^m C_{0j} \cdot x_{0j}^n = a_n \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{2n} + a_{n-1} \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{2n-1} + \dots + a_1 \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{n+1} + a_0 \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^n \\ \sum_{j=1}^m C_{0j} \cdot x_{0j}^{n-1} = a_n \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{2n-1} + a_{n-1} \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{2n-2} + \dots + a_1 \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^n + a_0 \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{n-1} \\ \dots \\ \sum_{j=1}^m C_j = a_n \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^n + a_{n-1} \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j}^{n-1} + \dots + a_1 \cdot \sum_{j=1}^m x_{0j} + m \cdot a_0 \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} c_n = a_n \cdot b_{nn} + a_{n-1} \cdot b_{n(n-1)} + \dots + a_1 \cdot b_{n1} + a_0 \cdot b_{n0} \\ c_{n-1} = a_n \cdot b_{(n-1)n} + a_{n-1} \cdot b_{(n-1)(n-1)} + \dots + a_1 \cdot b_{(n-1)1} + a_0 \cdot b_{(n-1)0} \\ \dots \\ c_0 = a_n \cdot b_{0n} + a_{n-1} \cdot b_{0(n-1)} + \dots + a_1 \cdot b_{01} + a_0 \cdot b_{00} \end{cases}, \tag{8}$$

где $b_{hi} = \sum_{j=1}^m x_{0j}^{h+i} - hi$ – элемент; $h = 0, 1, \dots, n$ – строка; i – столбец; $b_{hi} = b_{ih}$, $b_{00} = m$; $c_h = \sum_{j=1}^m K_{0j} \cdot x_{0j}^h$.

Определитель системы уравнений (8) равен

$$D = \begin{vmatrix} b_{nn} & b_{n(n-1)} & \dots & b_{n1} & b_{n0} \\ b_{(n-1)n} & b_{(n-1)(n-1)} & \dots & b_{(n-1)1} & b_{(n-1)0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{0n} & b_{0(n-1)} & \dots & b_{01} & b_{00} \end{vmatrix}.$$

Если $D \neq 0$, система определенная, имеет одно решение. Корни выражаются формулами Крамера

$$a_n = \frac{D_n}{D}; a_{n-1} = \frac{D_{n-1}}{D}; \dots; a_1 = \frac{D_1}{D}; a_0 = \frac{D_0}{D}, \tag{9}$$

$$\text{где } D_n = \begin{vmatrix} c_n & b_{n(n-1)} & \dots & b_{n1} & b_{n0} \\ c_{n-1} & b_{(n-1)(n-1)} & \dots & b_{(n-1)1} & b_{(n-1)0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_0 & b_{0(n-1)} & \dots & b_{01} & b_{00} \end{vmatrix}, \dots, D_0 = \begin{vmatrix} b_{nn} & b_{n(n-1)} & \dots & b_{n1} & c_n \\ b_{(n-1)n} & b_{(n-1)(n-1)} & \dots & b_{(n-1)1} & c_{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{0n} & b_{0(n-1)} & \dots & b_{01} & c_0 \end{vmatrix}.$$

С учетом того, что $n = 4$ [2], уравнение измерений (5) представим в виде

$$C_{10B} = A_4 \cdot \left(\frac{1}{n}\right)^4 + A_3 \cdot \left(\frac{1}{n}\right)^3 + A_2 \cdot \left(\frac{1}{n}\right)^2 + A_1 \cdot \left(\frac{1}{n}\right) + A_0, \text{ где } A_i = a_i \cdot (n_{max})^i. \quad (10)$$

или

$$C_{10B} = a_4 \cdot \left(\frac{n_{max}}{n}\right)^4 + a_3 \cdot \left(\frac{n_{max}}{n}\right)^3 + a_2 \cdot \left(\frac{n_{max}}{n}\right)^2 + a_1 \cdot \left(\frac{n_{max}}{n}\right) + a_0. \quad (11)$$

Согласно [3, 4]:

$$C_{10B} = B_4 \cdot \left(\frac{B_0}{n} - 1\right)^4 + B_3 \cdot \left(\frac{B_0}{n} - 1\right)^3 + B_2 \cdot \left(\frac{B_0}{n} - 1\right)^2 + B_1 \cdot \left(\frac{B_0}{n} - 1\right). \quad (12)$$

В таблице 1 приведено соотношение между коэффициентами A_i и B_i .

Таблица 1.

Соотношение между коэффициентами A_i и B_i .

$A_0 = -B_1 + B_2 - B_3 + B_4$	$B_0 = n_{max}$
$A_1 = B_0 \cdot (B_1 - 2B_2 + 3B_3 - 4B_4)$	$B_1 = (A_1 \cdot B_0^3 + A_2 \cdot B_0^2 + 3A_3 \cdot B_0 + 4A_4) \cdot B_0^{-4}$
$A_2 = B_0^2 \cdot (B_2 - 3B_3 + 6B_4)$	$B_2 = (A_2 \cdot B_0^2 + 3A_3 \cdot B_0 + 6A_4) \cdot B_0^{-4}$
$A_3 = B_0^3 \cdot (B_3 - 4B_4)$	$B_3 = (A_3 \cdot B_0 + 4A_4) \cdot B_0^{-4}$
$A_4 = B_0^4 \cdot B_4$	$B_4 = A_4 \cdot B_0^{-4}$

Уравнения измерений C_{10B} (11) и $C_{H_3BO_3} = \beta \cdot C_{10B}$ представлены на рис. 4 и рис. 5, соответственно; значения коэффициентов a_i и n_{max} , определенные по результатам экспериментальных исследований НАР [3], приведены в таблице 2.

Уравнения измерений (11) и (12) – нормированные к n_{max} уравнения. При расчете концентраций ими пользоваться удобнее, чем (10), т.к. коэффициенты a_i и $B_i \ll A_i$.

Таблица 2.

Значения n_{max} и коэффициентов a_i .

$m_\Sigma, \text{ кг}$	$n_{max}, \text{ с}^{-1}$	$a_0, 10^{-3}, \text{ с}^{-1}$	$a_1, 10^{-3}, \text{ кг/кг}$	$a_2, 10^{-3}, \text{ кг/кг}$	$a_3, 10^{-3}, \text{ кг/кг}$	$a_4, 10^{-3}, \text{ кг/кг}$
10	3647,4	- 0,0180	- 0,54580	0,85150	- 0,42520	0,13750
50	7165,4	- 0,05255	- 0,20044	0,29005	- 0,05719	0,02013

Анализ зависимостей (рис. 4 и рис. 5) позволяет сделать выводы.

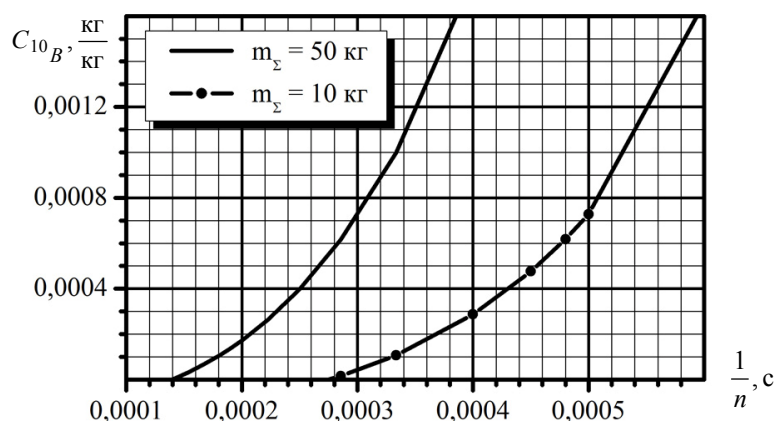
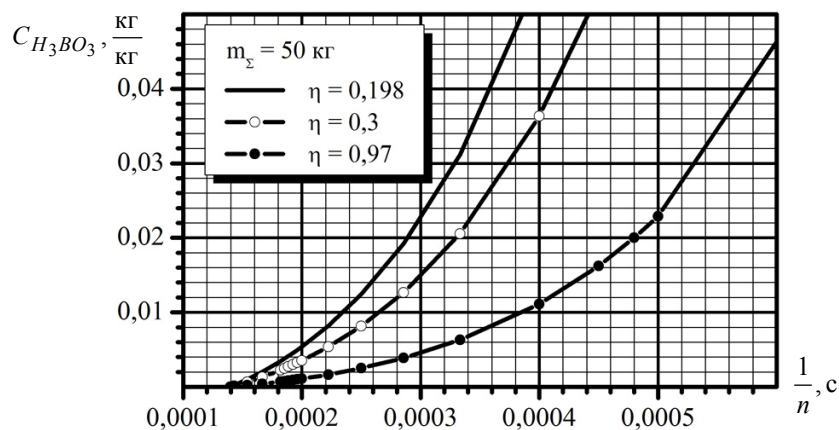
1). Скорость счета импульсов определяется N_{10B} согласно (4). N_{10B} обратно пропорционально n .

2). $C_{10B} = f\left(\frac{1}{n}\right) \Big|_{m_\Sigma = Const} = Const$ при постоянном потоке нейтронов, что следует из

$$C_{10B} = f(N_{10B}) \Big|_{m_\Sigma = Const} = Const.$$

3). Скорость счета импульсов пропорциональна m_Σ .

4). С ростом η скорость счета импульсов падает при $C_{H_3BO_3} = Const$, т.к. N_{10B} увеличивается (рис. 2).

Рис. 4. Зависимость $C_{10B} = f\left(\frac{1}{n}\right)$.Рис. 5. Зависимости $C_{H_3BO_3} = f\left(\frac{1}{n}\right)$.**ПОГРЕШНОСТИ НЕЙТРОННОГО АНАЛИЗАТОРА РАСТВОРА**

Погрешность при измерении концентрации H_3BO_3 в водном растворе должна быть, не более [10]:

- $\pm 0,0001$ кг/кг при $C_{H_3BO_3} \leq 0,01$ кг/кг;
- $\pm 1\%$ $C_{H_3BO_3} > 0,01$ кг/кг.

Следовательно, погрешность при измерении концентрации изотопа ^{10}B в водном растворе H_3BO_3 при $\eta_0 = 0,198$ ($\beta_0 = 31,21$) должна быть, не более:

- $\pm 3,2 \cdot 10^{-6}$ кг/кг при $C_{10B} \leq 3,2 \cdot 10^{-4}$ кг/кг;
- $\pm 1\%$ $C_{10B} > 3,2 \cdot 10^{-4}$ кг/кг.

Абсолютную погрешность нейтронного анализатора раствора при доверительной вероятности 0,95 представим в виде

$$\Delta C = 1,1 \cdot \sqrt{\frac{1}{3} \cdot [(\Delta_a)^2 + (\Delta_{\text{нест.}})^2 + (\Delta_0)^2]} + 2 \cdot \sigma_C,$$

где $\Delta_a = \sqrt{\sum_{j=1}^m \delta_{0j}^2} = \sqrt{\sum_{j=1}^m (C_{0j} - a_4 \cdot x_{0j}^4 - a_3 \cdot x_{0j}^3 - a_2 \cdot x_{0j}^2 - a_1 \cdot x_{0j} - a_0)^2}$ – погрешность аппроксимации с

учетом (7) при $n = 4$;

a_4, a_3, a_2, a_1 и a_0 – коэффициенты аппроксимации, рассчитанные по (9);

Δ_0 – погрешность приготовления эталонных водных растворов борной кислоты.

Среднее квадратическое отклонение (σ_C) при измерении C_{10B} ($C_{H_3BO_3}$) с учетом того, что

радиоактивный распад подчиняется распределению Пуассона, запишем в виде $\sigma_C = \sqrt{\langle N \rangle}$, где $N = n \cdot t$ – количество импульсов, измеренное за время t ; n – скорость счета импульсов при воздействии нейтронного излучения.

ВЫВОДЫ

1. Скорость счета импульсов при воздействии нейтронного излучения зависит от количества атомов изотопа бор-10 в водном растворе борной кислоты, которое определяется массой борной кислоты и атомной долей изотопа бор-10.

2. Скорость счета импульсов постоянна при постоянных значениях концентрации изотопа бор-10 в водном растворе борной кислоты, количества атомов изотопа бор-10, потока нейтронов и массы раствора.

3. При постоянной скорости счета концентрация борной кислоты в водном растворе обратно пропорционально зависит от атомной доли изотопа бор-10 при постоянной массе раствора.

4. Скорость счета импульсов пропорциональна массе раствора при постоянных значениях концентрации изотопа бор-10 в водном растворе борной кислоты или концентрации борной кислоты в водном растворе и атомной доли изотопа бор-10.

5. Погрешность нейтронного анализатора раствора определяется погрешностью аппроксимации уравнений измерений $C_{10B} = f\left(\frac{1}{n}\right)$ или $C_{H_3BO_3} = f\left(\frac{1}{n}\right)$, нестабильностью показаний, погрешностью приготовления эталонных водных растворов борной кислоты и средним квадратическим отклонением результата измерений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fadeev Ju.G., Sychev G.A. Neйтронnye analizatory veshhestvennogo sostava dlja himicheskoj promyshlennosti. – Jaderno-fizicheskie metody analiza veshhestva. Sbornik statej. – M.: Atomizdat, 1971. – S. 304-311.
2. Krasnov B.I., Minajkin E.P., Ponomarev E.G., Chuev A.G. K voprosu vybora metodiki opredelenija soderzhanija himicheskikh jelementov i ih izotopov pri nejtronno-absorcionnom analize tehnologicheskikh produktov / GUP VNII tehnichekoj fiziki i avtomatizacii, Moskva, Nauchnaja sessija MIFI. – Sbornik nauchnyh trudov. – 2002. – T. 5: Medicinskaja fizika i tehnika, biofizika. Matematicheskoe modelirovanie v geofizike. Ohrana okruzhajushhej sredy i racional'noe prirodopol'zovanie. Teoreticheskie problemy fiziki. – S. 187-188.
3. Kalashnik Ju.S., Matjunin A.V., Orobinskij A.N. Issledovanija analizatorov rastvorov nejtronnyh / Tr. XI Mezhd. nauchn.-prakt. konf. «Sovremennye informacionnye i jelektronnye tehnologii». – Odessa. – 2010. – T. 2 – S. 74.
4. Matjunin A.V., Orobinskij A.N. Metody i sredstva izmerenij atomnoj doli izotopa bor-10 i ego koncentracii v vodnom rastvore bornoj kisloty v teplonositele pervogo kontura na AJeS s reaktorami tipa VVJeR / Tr. VII Mezhd. nauchn.-tehn. konf. «Metrologija i izmeritel'naja tehnika». – Har'kov. – 2010. – T. 2.– S. 266 – 270.
5. Malyshev E.K., Zasadych Ju.B., Stabrovskij S.A. Gazorazrjadnye detektory dlja kontrolja jadernyh reaktorov. – M.: Jenergoatomizdat, 1991. – 160 s.
6. DSTU 3651.1-97. Metrologija. Edinicy fizicheskikh velichin. Proizvodnye edinic fizicheskikh velichin Mezhdunarodnoj sistemy edinic i vnesistemnye edinicy. Osnovnye ponjatija, naimenovanija i oboznachenija. – Vved. 01.01.1999. – Kiev: Gosstandart Ukrainy. – 1998. – 76 s.
7. Izotopy: svojstva, poluchenie, primenenie. V 2 t. T. 2 / Pod red. V.Ju. Baranova. – M.: Fizmatlit, 2005 – 728 s.
8. Elemental Data Index // <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Elements>.
9. Standard Reference Materials: Boric Acid; Isotopic and Assay Standard Reference Materials // National Bureau of Standards (U.S.). – 1970. – Special Publication 260-17. – 70 p.
10. GOST 24693-81. Reaktory jadernye jenergeticheskie korpusnye s vodoj pod davleniem. Obshhie trebovanija k sisteme bornogo regulirovanija. – Vved. 01.07.1982. – M.: Izd-vo standartov. – 1981. – 6 s. Izmenenie 1. – Vved. 01.08.1987. IUS № 6. – 1987.

PACS: 87.53.-j; 87.66.Jj

DEFINING THE ROLE OF RADIATION RISK FACTOR IN CANCER CAUSATION AMONG KIPT WORKERS: PROGNOSIS OF STOCHASTIC EFFECTS AND FORMING OF RISK GROUPS

A. Mazilov, I. Stadnyk

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

Academic str., 1, Kharkov, 61108, Ukraine

E-mail: mazilov@kipt.kharkov.ua

Received November 11, 2013

The UNSCEAR-94 methodology for estimating of the individual radiation risks has been described. The characteristic of KIPT staff in the terms of "dose-response matrix" has been done. The main results of the calculations of the relative, attributive and absolute radiation risks of the KIPT personnel for different locations and different risk groups have been shown. The distribution of the main characteristics of the personnel: age, length of service at the individual monitoring and the cumulative dose for different groups of the radiation risk has been described.

KEY WORDS: individual monitoring, radiation risk, risk group, KIPT staff, social protection

ВИЗНАЧЕННЯ РОЛІ РАДІАЦІЙНОГО ФАКТОРУ РИЗИКУ В ІНДУКЦІЇ ЗЛОЯКІСНИХ НОВОУТВОРЕНЬ СЕРЕД ПРАЦІВНИКІВ ННЦ ХФТІ: ПРОГНОЗ СТОХАСТИЧНИХ ЕФЕКТІВ ТА ФОРМУВАННЯ ГРУП РИЗИКУ

А.В. Мазилів, І.А. Стадник

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

вул. Академічна, 1, м. Харків, 61108, Україна

Описано методологію оцінки індивідуальних радіаційних ризиків для пролонгованого опромінення UNSCEAR-94. Дана характеристика персоналу ННЦ ХФТІ, що перебуває на ІДК, в термінах «дозової матриці». Наведено основні результати розрахунків відносного, атрибутивного й абсолютного радіаційних ризиків персоналу ННЦ ХФТІ для різних локалізацій і різних груп ризику. Показано розподіл основних характеристик персоналу: віку, стажу на ІДК і накопиченої дози для різних груп радіаційного ризику.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: індивідуальний дозиметричний контроль, радіаційний ризик, група ризику, персонал ННЦ ХФТІ, соціальний захист

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РОЛИ РАДИАЦИОННОГО ФАКТОРА РИСКА В ИНДУКЦИИ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ СРЕДИ РАБОТНИКОВ ННЦ ХФТИ: ПРОГНОЗ СТОХАСТИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ И ФОРМИРОВАНИЕ ГРУПП РИСКА

А.В. Мазилів, І.А. Стадник

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»

ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина

Описана методология оценки индивидуальных радиационных рисков для пролонгированного облучения UNSCEAR-94. Дана характеристика персонала ННЦ ХФТИ, состоящего на ИДК, в терминах «дозовой матрицы». Приведены основные результаты расчетов относительного, атрибутивного и абсолютного радиационных рисков персонала ННЦ ХФТИ для различных локализаций и различных групп риска. Показаны распределения основных характеристик персонала: возраста, стажа на ИДК и накопленной дозы для различных групп радиационного риска.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: индивидуальный дозиметрический контроль, радиационный риск, группа риска, персонал ННЦ ХФТИ, социальная защита

В качестве радиационного риска в международных стандартах рассматривается, в первую очередь, увеличение вероятности онкозаболевания – канцерогенный риск. Для доз равномерного облучения всего тела, превышающих порог в 200 мЗв, установлена однозначная связь между дозой и возникновением онкозаболевания. Такая связь носит название «детерминированный эффект радиационного воздействия», степень тяжести детерминированного эффекта прямо пропорциональна полученной дозе.

Для области малых доз (менее 200 мЗв) однозначная зависимость между облучением и онкозаболеваемостью не выявлена. Вместе с тем, существует вероятность того, что трансформация клеток в результате облучения малой дозой после некоторого латентного периода может вызывать у облученного лица онкозаболевание, если облученные клетки являются соматическими, либо привести к генетическим мутациям, если это зародышевые клетки. Такие эффекты носят название «стохастических». Предполагается, что вероятность возникновения стохастического эффекта пропорциональна полученной дозе, при этом порогового значения не существует [1].

Методология оценки радиационного риска определена в отчетах Научного комитета ООН по действию атомной радиации (НКДАР ООН), стандартах безопасности Международного агентства по атомной энергии (МАГАТЭ) и рекомендациях Международной комиссии по радиологической защите (МКРЗ), и реализована в модели UNSCEAR-94 НКДАР ООН [2, 3, 4]. Данная модель позволит оценивать индивидуальные

радиационные риски солидных раков и лейкозов с учетом индивидуальных характеристик облученного лица: пола, возраста на момент начала облучения, достигнутого возраста, динамики облучения.

Основной целью работы по оценке индивидуальных радиационных рисков является реализация концепции социально приемлемого риска: в соответствии с международной практикой и действующими Нормами радиационной безопасности Украины (НРБУ-97) приемлемый индивидуальный абсолютный радиационный риск при техногенном облучении персонала в штатном режиме работы не должен превышать значения 10^{-3} в год [5].

Важной характеристикой индивидуального профессионального риска является этиологическая доля или атрибутивный риск, т.е. риск, обусловленный профессиональной деятельностью (в данном случае – облучением), выраженный в процентах к суммарному риску. В ряде случаев онкозаболевание считается профессионально обусловленным уже при этиологической доле 20 – 40 % [6].

В работе представлены результаты расчетов относительных, атрибутивных и абсолютных индивидуальных радиационных рисков персонала ННЦ ХФТИ, состоящего на ИДК в 2013 году. Расчеты рисков проведены на 2013 год для сотрудников, имеющих стаж на ИДК не менее двух лет (средний латентный период возможного развития лейкоза). На основе значений абсолютных индивидуальных радиационных рисков персонала сформированы группы пренебрежимо малого, приемлемого и повышенного абсолютных радиационных рисков. На основе значений атрибутивных индивидуальных радиационных рисков сформированы группы пренебрежимо малого, потенциального и высокого потенциального атрибутивных радиационных рисков.

МОДЕЛЬ РАСЧЕТА РАДИАЦИОННЫХ РИСКОВ UNSCEAR-94

Модель UNSCEAR-94 оценки индивидуального радиационного риска была разработана Научным комитетом по действию атомной радиации при ООН (НКДАР ООН) по данным исследований, проведенных среди облученного в результате бомбардировок населения японских городов (когорты Life Span Study - LSS).

В данной модели используются следующие термины:

EAR – избыточный абсолютный риск (*Excess Absolute Risk*) – вероятность заболевания радиационно-обусловленным раком;

ERR – избыточный относительный риск (*Excess Relative Risk*) – обусловленный облучением прирост вероятности онкозаболевания относительно фоновой вероятности онкозаболевания данной локализации в данном возрасте лица данного пола;

AR – атрибутивный риск (*Attributable Risk*) – доля фактора облучения (избыточного абсолютного риска) в суммарной вероятности онкозаболевания у облученного лица (которая складывается из фоновой вероятности ракового заболевания и *EAR*). В случае исследования облученной когорты или популяции атрибутивный риск показывает, какая доля от всех случаев заболеваний в когорте обусловлена радиационным воздействием.

Согласно модели UNSCEAR-94, если m_0 – фоновая онкозаболеваемость для лиц определенного возраста и пола, а m – наблюдаемое число заболеваний в группе облученных лиц того же пола и той же возрастной категории, то наблюдаемое количество заболеваний среди облученных людей можно выразить через фоновое в аддитивной форме:

$$m = m_0 + EAR, \quad (1)$$

где *EAR* – превышение количества наблюдаемых случаев заболеваний над ожидаемым, вызванное облучением, либо для одного индивидуума – вероятность онкозаболевания, обусловленная облучением.

Взаимосвязь m и m_0 может быть выражена и через значение избыточного относительного риска *ERR* или в мультипликативной форме:

$$m = m_0(1 + ERR). \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует, что:

$$EAR = m - m_0, \quad (3)$$

$$ERR = (m - m_0) / m_0. \quad (4)$$

Из (3) и (4) следует связь между величинами, характеризующими превышение фонового уровня заболеваемости:

$$EAR = m_0 \cdot ERR. \quad (5)$$

Согласно определению атрибутивный риск представляет собой долю радиационно-обусловленной вероятности онкозаболевания в суммарной вероятности онкозаболевания для лица данного возраста и пола:

$$AR = EAR / m. \quad (6)$$

Из (3), (5) и (6) атрибутивный риск можно выразить через относительный следующим образом:

$$AR = ERR / (1 + ERR). \quad (7)$$

Согласно модели UNSCEAR-94 радиационно-обусловленная заболеваемость солидными раками различной локализации при остром кратковременном облучении представляется в виде избыточного

относительного риска ERR и имеет вид:

$$ERR_{SOL}(s, l, g) = a_{s,l} \times D_g \times \exp(b_l \times (g - 25)). \quad (8)$$

где D_g – доза облучения (в Зв) в возрасте g . Параметры a и b , зависящие от пола s и локализации онкозаболевания l приведены в табл. 1.

Величина $|b^{-1}| = \tau$ (табл. 1) – характерное время, в течение которого эффективность воздействия облучения изменяется примерно в 3 раза. После облучения риск онкозаболевания органов дыхания, мочевого пузыря, пищевода увеличивается с возрастом, для других локализаций – падает.

Таблица 1.

Значения параметров модели UNSCEAR-94 избыточного относительного риска для солидных раков различной локализации

Локализация	МКБ-10	Параметр a , Зв ⁻¹		Параметр b , год ⁻¹	Характерное время $\tau = b^{-1} $, год
		муж.	жен.		
Органы дыхания	C33, C34	0,37	1,06	0,021	47,6
Желудок	C16	0,16	0,62	-0,035	28,6
Мочевой пузырь	C67	1,00	1,19	0,012	83,3
Печень	C22	0,97	0,32	-0,027	37,0
Пищевод	C15	0,23	1,59	0,015	66,7
Ободочная кишка	C18	0,54	1,00	-0,033	30,3
Молочная железа	C50	–	1,95	-0,079	12,6
Остальные	–	0,59	0,39	-0,059	16,9
Все солидные	C00–C80	0,45	0,77	-0,026	38,5

Статистический анализ данных наблюдений когорты LSS показал, что облучение приводит к увеличению заболеваемости солидными раками только спустя примерно 5–15 лет после облучения. Это так называемый латентный период действия радиации.

Согласно [7], для пролонгированного облучения относительный избыточный риск солидных раков будет:

$$ERR_{SOL}(u) = a_{s,l} \times \sum_{g=g_0}^{g=u-10} D_g \times \exp(b_l \times (g - 25)), \quad (9)$$

где u – возраст, на который рассчитывается риск заболевания солидным раком; $u-10$ означает, что в расчет берутся только дозы, полученные за 10 лет (средний латентный период для солидных раков) до расчетного возраста u и ранее.

Зная $ERR_{SOL}(u)$ и фоновую онкозаболеваемость данной локализации для данного пола и возраста $m_0(s, l, u)$, можно вычислить $AR_{SOL}(u)$, $EAR_{SOL}(u)$ и вероятность заболевания солидным раком в возрасте u для локализации l с учетом фактора облучения – $m_{SOL}(s, l, u)$:

$$AR_{SOL}(u) = \frac{ERR_{SOL}(u)}{1 + ERR_{SOL}(u)} \times 100\%, \quad (10)$$

$$EAR_{SOL}(u) = m_{0SOL}(s, l, u) \cdot ERR_{SOL}(u), \quad (11)$$

$$m_{SOL}(s, l, u) = m_{0SOL}(s, l, u) + EAR_{SOL}(u). \quad (12)$$

Для вычисления абсолютного избыточного риска возникновения радиационно-обусловленной лейкемии EAR_{LEU} в возрасте u после однократного облучения в возрасте g модель UNSCEAR-94 предлагает следующую формулу:

$$EAR_{LEU}(s, g, u) = a_{s,g} \times D_g \times (1 + 0.79 \cdot D_g) \times \exp(-b_{s,g} \times (u - g - 25)), \quad (13)$$

где, a и b – параметры, зависящие от возраста на момент облучения (g) и пола (s), их значения приведены в табл. 2.

Таблица 2.

Значения параметров модели UNSCEAR-94 избыточного абсолютного риска лейкемии (для расчета EAR_{LEU} на 100 000 человек в год)

Возраст, лет	Параметр a , Зв ⁻¹		Параметр b , год ⁻¹		Характерное время $\tau = b^{-1} $, год	
	муж.	жен.	муж.	жен.	муж.	жен.
0 – 19	3,3	6,6	0,17	0,07	5,9	14,3
20 – 39	4,8	9,7	0,13	0,03	7,7	33,3
40 –	13,1	26,4	0,07	0,03	14,3	33,3

Согласно [7], для пролонгированного облучения абсолютный избыточный риск лейкемии будет:

$$EAR_{LEU}(u) = \sum_{g=g_0}^{g=u-2} a_{s,g} \times D_g \left(1 + 1,58 \sum_{g=g_0}^g D_g \right) \times \exp(-b_{s,g} \times (u - g - 25)), \quad (14)$$

где u – возраст, на который рассчитывается риск заболевания лейкемией; $\sum_{g=g_0}^g D_g$ – накопленная доза к возрасту g ; $u-2$ также означает, что в расчет берутся только дозы, полученные за 2 года (средний латентный период для лейкемии) до расчетного возраста u и ранее.

Зная значение абсолютного риска лейкемии EAR_{LEU} и фоновую заболеваемость лейкемией в возрасте u для пола s – $m_{0LEU}(s,u)$, можно вычислить атрибутивный AR_{LEU} и относительный ERR_{LEU} избыточные риски лейкемии, а также вероятность заболевания лейкемией в возрасте u с учетом факта облучения – $m_{LEU}(s,u)$:

$$AR_{LEU}(u) = \frac{EAR_{LEU}(u)}{m_{0LEU}(s,u) + EAR_{LEU}(u)} \times 100\%, \quad (15)$$

$$ERR_{LEU}(u) = \frac{EAR_{SOL}(u)}{m_{0LEU}(s,u)}, \quad (16)$$

$$m_{LEU}(s,u) = m_{0LEU}(s,u) + EAR_{LEU}(u). \quad (17)$$

ГРУППЫ РАДИАЦИОННОГО РИСКА

По данным Международной организации труда ежегодно на 1 млн. работников происходит порядка 100-1000 случаев травматизма со смертельным исходом, поэтому Международной комиссией по радиологической защите был принят уровень социально приемлемого риска, равный 10^{-4} - 10^{-3} в год. Производственный риск, превышающий пороговое значение 10^{-3} , считается повышенным, а риск, не превосходящий пороговое значение 10^{-4} , считается пренебрежимо малым.

В соответствии с Нормами радиационной безопасности Украины (НРБУ-97), величина суммарного абсолютного радиационного риска EAR_{ALL} для штатного режима работы персонала не должна превышать 10^{-3} в год [5]. По величине абсолютного радиационного риска EAR_{ALL} персонал, работающий с источниками ионизирующего облучения (ИИИ), может быть отнесен к одной из следующих групп риска:

- пренебрежимо малого риска: $EAR_{ALL} < 10^{-4}$;
- приемлемого риска: $10^{-4} \leq EAR_{ALL} \leq 10^{-3}$;
- повышенного радиационного риска: $EAR_{ALL} > 10^{-3}$.

Атрибутивный радиационный риск является важным показателем при установлении связи онкозаболевания с профессиональным облучением, и в некоторых европейских странах персонал, работающий с ИИИ, может рассчитывать на компенсационные выплаты в случае онкозаболевания, если величина атрибутивного риска будет превышать установленные пороговые уровни [6, 8].

В зависимости от значений атрибутивных рисков солидных раков AR_{SOL} , лейкемии AR_{LEU} и органов дыхания AR_{RESP} , персонал, подвергшийся облучению, может быть отнесен к группе:

- пренебрежимо малого риска: $AR_{SOL} < 10\%$, $AR_{LEU} < 50\%$, $AR_{RESP} < 20\%$;
- потенциального риска: $AR_{SOL} \geq 10\%$, либо $AR_{LEU} \geq 50\%$, либо $AR_{RESP} \geq 20\%$;
- высокого потенциального риска: $AR_{SOL} \geq 20\%$, либо $AR_{LEU} \geq 75\%$, либо $AR_{RESP} \geq 30\%$.

ХАРАКТЕРИСТИКА ПЕРСОНАЛА ННЦ ХФТИ, СОСТОЯЩЕГО НА ИДК

В настоящее время на индивидуальном дозиметрическом контроле (ИДК) состоит 331 сотрудник ННЦ ХФТИ: 282 мужчины возрастом от 20 до 87 лет, со стажем работы с источниками ионизирующего облучения от 0 до 55 лет, и 49 женщин возрастом от 25 до 80 лет, со стажем работы с ИИИ от 0 до 50 лет. Средняя накопленная доза для мужчин составляет 61,44 мЗв у мужчин и 49,40 мЗв у женщин (табл. 3).

Распределения численности персонала, состоящего на ИДК, по полу, возрасту, стажу и накопленной дозе приведены в таблицах 4 – 6. Почти половина персонала на ИДК имеет возраст старше 60 лет и стаж работы с источниками ионизирующего излучения (ИИИ) более 20 лет, тем не менее, только 41% персонала имеет накопленную дозу более 50 мЗв, и из них только 16% – накопленную дозу более 150 мЗв. Зависимости накопленных доз персонала от возраста и стажа показаны на рис. 1.

Динамика изменения среднегодовой дозы за годы работы сотрудников, состоящих на ИДК в 2013 г. (рис. 2), показывает, что среднегодовая доза сотрудников за последние 20 лет не превышала 2 мЗв, что сравнимо со средним значением естественного радиационного фона Земли – 2,42 мЗв/год.

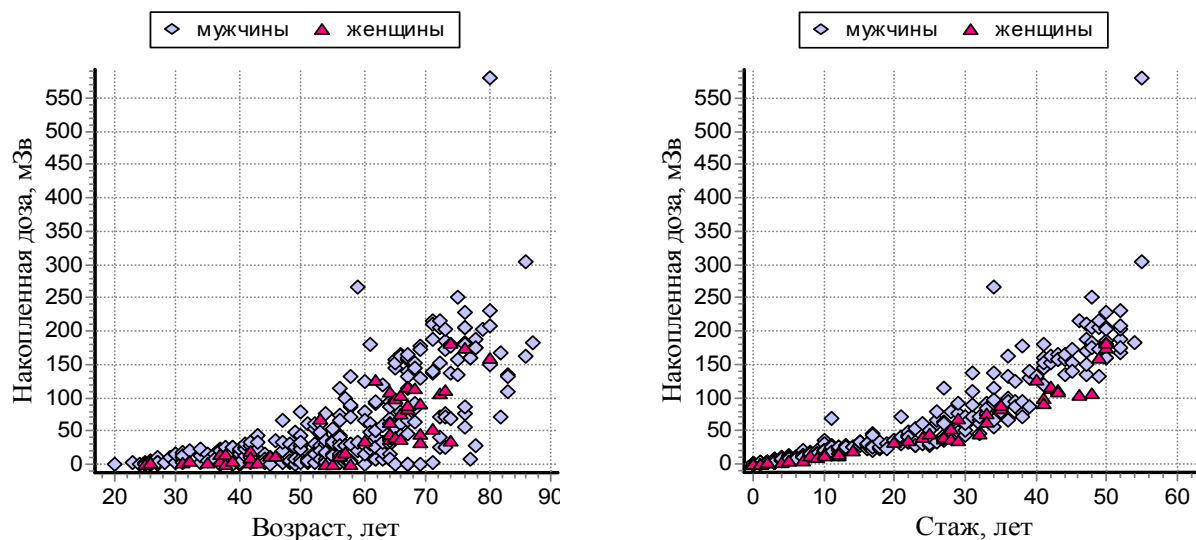


Рис. 1. Зависимости накопленной дозы от возраста и стажа

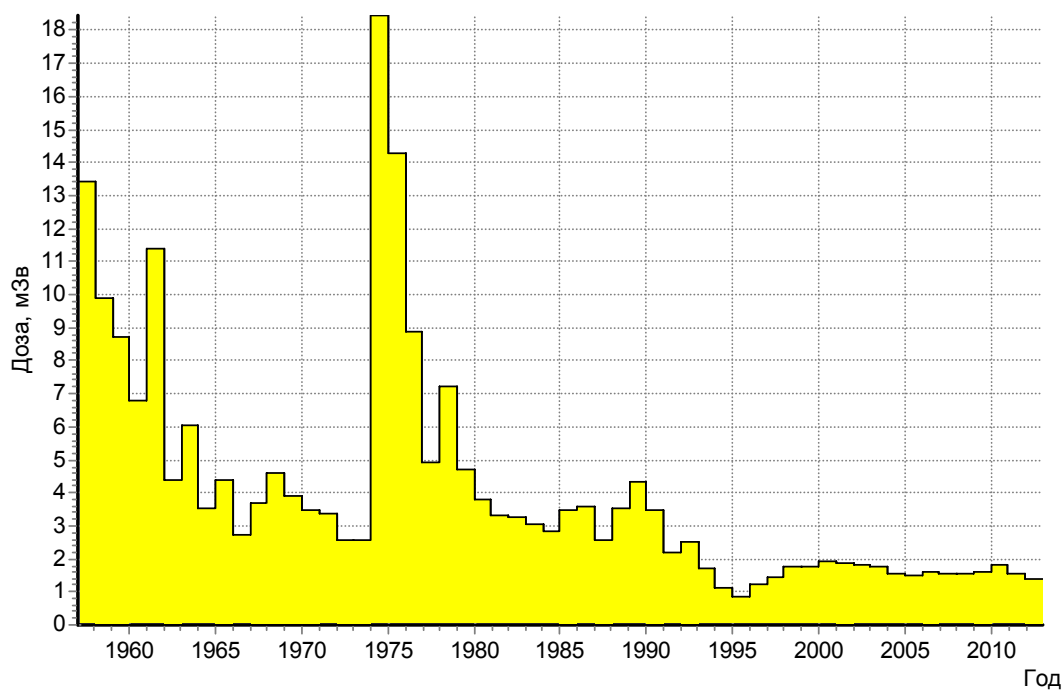


Рис. 2. Динамика среднегодовой дозы за годы работы сотрудников, состоящих на ИДК в 2013 г.

Таблица 3.

Основные характеристики персонала, состоящего на ИДК

Персонал	Численность		Возраст, лет			Стаж на ИДК, лет			Накопленная доза, мЗв		
	абс. ед.	%	мин.	средний	макс.	мин.	средний	макс.	мин.	средняя	макс.
Мужчины	282	85,2	20	56	87	0	21	55	0,07	61,44	580,04
Женщины	49	14,8	25	56	80	0	22	50	0,04	49,40	181,33
Весь	331	100,0	20	56	87	0	21	55	0,04	59,66	580,04

Таблица 4.

Распределение численности персонала по полу и возрасту

Возрастная группа, лет	Оба пола		Мужчины		Женщины	
	абс. ед.	%	абс. ед.	%	абс. ед.	%
<25	3	0,9	3	1,1	0	0,0
25-29	18	5,4	15	5,3	3	6,1
30-34	15	4,5	13	4,6	2	4,1
35-39	21	6,3	15	5,3	6	12,2
40-44	28	8,5	24	8,5	4	8,2
45-49	19	5,7	17	6,0	2	4,1
50-54	36	10,9	34	12,1	2	4,1
55-59	39	11,8	35	12,4	4	8,2
60-64	43	13,0	37	13,1	6	12,2
65-69	47	14,2	34	12,1	13	26,5
70-74	27	8,2	22	7,8	5	10,2
75-79	22	6,6	21	7,4	1	2,0
80-	13	3,9	12	4,3	1	2,0
Все	331	100,0	282	100,0	49	100,0

Таблица 5.

Распределение численности персонала по полу и стажу на ИДК

Стаж на ИДК, лет	Оба пола		Мужчины		Женщины	
	абс. ед.	%	абс. ед.	%	абс. ед.	%
<5	71	21,5	60	21,3	11	22,4
5-9	41	12,4	36	12,8	5	10,2
10-14	39	11,8	33	11,7	6	12,2
15-19	19	5,7	19	6,7	0	0,0
20-24	20	6,0	17	6,0	3	6,1
25-29	31	9,4	24	8,5	7	14,3
30-34	27	8,2	24	8,5	3	6,1
35-39	20	6,0	18	6,4	2	4,1
40-44	22	6,6	15	5,3	7	14,3
45-49	21	6,3	18	6,4	3	6,1
50-54	18	5,4	16	5,7	2	4,1
55-59	2	0,6	2	0,7	0	0,0
60-	0	0,0	0	0,0	0	0,0
Все	331	100,0	282	100,0	49	100,0

Таблица 6.

Распределение численности персонала по полу и накопленной дозе

Накопленная доза, мЗв	Оба пола		Мужчины		Женщины	
	абс. ед.	%	абс. ед.	%	абс. ед.	%
<5	60	18,1	48	17,0	12	24,5
5-	68	20,5	59	20,9	9	18,4
20-	76	23,0	66	23,4	10	20,4
50-	54	16,3	46	16,3	8	16,3

Накопленная доза, мЗв	Оба пола		Мужчины		Женщины	
	абс. ед.	%	абс. ед.	%	абс. ед.	%
100-	24	7,3	17	6,0	7	14,3
150-	34	10,3	31	11,0	3	6,1
200-	11	3,3	11	3,9	0	0,0
250-	2	0,6	2	0,7	0	0,0
300-	1	0,3	1	0,4	0	0,0
350-	0	0,0	0	0,0	0	0,0
400-	0	0,0	0	0,0	0	0,0
450-	0	0,0	0	0,0	0	0,0
500-	1	0,3	1	0,4	0	0,0
Все	331	100,0	282	100,0	49	100,0

ХАРАКТЕРИСТИКА ПЕРСОНАЛА ПО ГРУППАМ РАДИАЦИОННОГО РИСКА

Результаты расчетов радиационных рисков персонала ННЦ ХФТИ на 2013 г. приведены в табл. 7. В расчет вошли 305 человек: у 26 сотрудников стаж работы с ИИИ составляет менее двух лет, т.е. радиационные риски проявятся не ранее 2014 года. В расчет рисков лейкемии вошли накопленные дозы персонала, полученные вплоть до 2011 г., в расчет рисков солидных раков – дозы, полученные вплоть до 2003 г (т.к. средний период проявления рисков лейкемии и солидных раков составляет соответственно 2 года и 10 лет).

Данные фоновой по возрастной онкозаболеваемости для различных локализаций солидных раков и лейкемии были взяты за 2011 г. из Бюллетеня Национального канцер-регистра Украины № 14 [9].

В таблице 7 также приведены используемые в эпидемиологии значения стандартизированных отношений заболеваемости для различных локализаций *SIR* (*Standardized Incident Ratio*) – отношение наблюдаемого числа заболеваний в облученной группе *m* к фоновому значению заболеваемости в данной половозрастной группе *m₀*.

Таблица 7.

Избыточные радиационные риски персонала по различным локализациям

Локализация	ERR, %			AR, %			EAR, *10 ⁻³			SIR		
	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.
Все раки	0,00	1,97	18,41	0,00	1,89	15,55	0,000	0,260	3,240	1,00	1,02	1,18
Все солидные раки	0,00	1,81	18,45	0,00	1,72	15,58	0,000	0,250	3,200	1,00	1,02	1,18
Лейкемия	0,00	5,80	26,97	0,00	5,23	21,24	0,000	0,009	0,046	1,00	1,06	1,27
Мочевой пузырь	0,00	6,38	67,18	0,00	5,48	40,19	0,000	0,070	1,000	1,00	1,06	1,67
Органы дыхания	0,00	3,30	28,46	0,00	3,02	22,15	0,000	0,080	0,740	1,00	1,03	1,28
Молочная железа	0,00	1,40	17,58	0,00	1,27	14,95	0,000	0,030	0,370	1,00	1,01	1,18
Печень	0,00	3,25	39,33	0,00	2,97	28,23	0,000	0,010	0,090	1,00	1,03	1,39
Пищевод	0,00	2,62	34,15	0,00	2,37	25,45	0,000	0,000	0,040	1,00	1,03	1,34
Ободочная кишка	0,00	2,04	20,48	0,00	1,93	17,00	0,000	0,020	0,310	1,00	1,02	1,20
Желудок	0,00	0,72	6,95	0,00	0,71	6,50	0,000	0,010	0,090	1,00	1,01	1,07
Остальные солид. раки	0,00	1,48	17,28	0,00	1,42	14,74	0,000	0,110	1,680	1,00	1,01	1,17

По значениям суммарного абсолютного радиационного риска EAR_{ALL} были сформированы группы пренебрежимо малого ($EAR_{ALL} < 10^{-4}$), приемлемого ($10^{-4} \leq EAR_{ALL} \leq 10^{-3}$) и повышенного ($EAR_{ALL} > 10^{-3}$) радиационных рисков. Значения основных характеристик и рисков персонала по группам абсолютного радиационного риска приведены в табл. 8. В группу повышенного радиационного риска вошло 19 человек (6,2 % персонала, для которого были рассчитаны риски), в группу приемлемого радиационного риска вошло 116 чел. – 38,0 % персонала, в группу пренебрежимо малого риска вошло 170 чел. – 55,8 % персонала. В столбце «Накопленная доза» приведены значения накопленных доз персонала, используемых в расчете рисков на 2013 г. и полученных вплоть до 2011 г.

Таблица 8.

Значения основных характеристик и рисков персонала по группам суммарного абсолютного радиационного риска

Значение показателя	Возраст, лет	Стаж на ИДК, лет	Накопленная доза, мЗв	AR _{SOL} , %	AR _{LEU} , %	EAR _{ALL} , *10 ⁻³
Группа повышенного риска, 19 чел. (6,2 % персонала)						
Мин.	71	45	174,35	4,82	3,42	1,0077
Среднее	75	50	226,23	6,35	6,60	1,2380
Макс.	86	55	578,28	15,58	13,77	3,2442
Группа приемлемого риска, 116 чел. (38,0 % персонала)						
Мин.	50	11	34,42	0,54	0,26	0,1038
Среднее	67	36	104,31	3,14	4,89	0,4608
Макс.	87	54	262,67	7,83	20,01	0,9998
Группа пренебрежимо малого риска, 170 чел. (55,8 % персонала)						
Мин.	25	2	0,19	0,00	0,00	0,0000
Среднее	47	10	15,89	0,24	5,31	0,0168
Макс.	78	30	64,34	1,99	21,24	0,0984

В табл. 9 – 11 приведены распределения относительной численности персонала, для которого были рассчитаны радиационные риски на 2013 год, по группам абсолютного радиационного риска в возрастных группах, группах по стажу на ИДК и в группах по накопленной дозе, принимаемой в расчет рисков.

Весь персонал, имеющий возраст до 50 лет, стаж на ИДК до 10 лет и накопленную дозу до 20 мЗв, был отнесен к группе пренебрежимо малого риска, что говорит о достаточно высоком уровне радиационной защиты персонала, работающего с источниками ионизирующего излучения в ННЦ ХФТИ.

Весь персонал, имеющий стаж на ИДК более 55 лет и накопленную дозу от 300 мЗв и более, отнесен к группе повышенного абсолютного радиационного риска. Минимальный возраст персонала из группы повышенного абсолютного риска – 71 год.

Таблица 9.

Распределение относительной численности персонала по группам абсолютного радиационного риска в зависимости от пола и возраста

Возраст, лет	% от численности персонала заданной возрастной группы в группе радиационного риска								
	пренебрежимо малого			приемлемого			повышенного		
	Все	муж.	жен.	все	муж.	жен.	все	муж.	жен.
<25	-	-	-	-	-	-	-	-	-
25-29	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
30-34	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
35-39	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
40-44	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
45-49	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
50-54	91,4	94,1	0,0	8,6	5,9	100,0	0,0	0,0	0,0
55-59	75,0	73,5	100,0	25,0	26,5	0,0	0,0	0,0	0,0
60-64	42,9	47,2	16,7	57,1	52,8	83,3	0,0	0,0	0,0
65-69	2,3	0,0	7,7	97,7	100,0	92,3	0,0	0,0	0,0
70-74	11,1	13,6	0,0	63,0	59,1	80,0	25,9	27,3	20,0
75-79	9,1	9,5	0,0	50,0	52,4	0,0	40,9	38,1	100,0
80-	0,0	0,0	0,0	76,9	75,0	100,0	23,1	25,0	0,0

Таблица 10.

Распределение относительной численности персонала по группам абсолютного радиационного риска в зависимости от пола и стажа на ИДК

Стаж на ИДК, лет	% от численности персонала с заданным стажем на ИДК в группе радиационного риска								
	пренебрежимо малого			приемлемого			повышенного		
	все	муж.	жен.	все	муж.	жен.	все	муж.	жен.
<5	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
5-9	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
10-14	97,5	97,1	100,0	2,5	2,9	0,0	0,0	0,0	0,0
15-19	100,0	100,0	-	0,0	0,0	-	0,0	0,0	-
20-24	80,0	82,4	66,7	20,0	17,6	33,3	0,0	0,0	0,0
25-29	32,3	41,7	0,0	67,7	58,3	100,0	0,0	0,0	0,0
30-34	3,7	4,2	0,0	96,3	95,8	100,0	0,0	0,0	0,0
35-39	0,0	0,0	0,0	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0
40-44	0,0	0,0	0,0	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0
45-49	0,0	0,0	0,0	66,7	61,1	100,0	33,3	38,9	0,0
50-54	0,0	0,0	0,0	44,4	50,0	0,0	55,6	50,0	100,0
55-59	0,0	0,0	-	0,0	0,0	-	100,0	100,0	-
60-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Таблица 11.

Распределение относительной численности персонала по группам абсолютного радиационного риска в зависимости от пола и накопленной дозы

Накопленная доза, мЗв	% от численности персонала с заданной накопленной дозой в группе радиационного риска								
	пренебрежимо малого			приемлемого			повышенного		
	все	муж.	жен.	все	муж.	жен.	все	муж.	жен.
<5	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
5-	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
20-	77,3	86,0	22,2	22,7	14,0	77,8	0,0	0,0	0,0
50-	9,6	11,4	0,0	90,4	88,6	100,0	0,0	0,0	0,0
100-	0,0	0,0	0,0	100,0	100,0	100,0	0,0	0,0	0,0
150-	0,0	0,0	0,0	81,8	86,7	33,3	18,2	13,3	66,7
200-	0,0	0,0	-	8,3	8,3	-	91,7	91,7	-
250-	0,0	0,0	-	100,0	100,0	-	0,0	0,0	-
300-	0,0	0,0	-	0,0	0,0	-	100,0	100,0	-
350-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
500-	0,0	0,0	-	0,0	0,0	-	100,0	100,0	-

Результаты расчетов радиационных рисков персонала по локализациям для каждой из трех групп абсолютного радиационного риска приведены в табл. 12 – 14.

Таблица 12.

Избыточные радиационные риски персонала из группы повышенного суммарного абсолютного радиационного риска

Локализация	ERR, %			AR, %			EAR, *10 ⁻³			SIR		
	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.
Все раки	5,05	6,87	18,41	4,80	6,36	15,55	1,010	1,240	3,240	1,05	1,07	1,18
Все солидные раки	5,06	6,86	18,45	4,82	6,35	15,58	0,980	1,210	3,200	1,05	1,07	1,18
Лейкемия	3,55	7,16	15,97	3,42	6,60	13,77	0,016	0,027	0,046	1,04	1,07	1,16

Локализация	ERR, %			AR, %			EAR, *10 ⁻³			SIR		
	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.
Мочевой пузырь	20,05	26,22	67,18	16,70	20,34	40,19	0,050	0,380	1,000	1,20	1,26	1,67
Органы дыхания	8,55	12,91	28,46	7,88	11,21	22,15	0,200	0,360	0,740	1,09	1,13	1,28
Молочная железа	12,37	14,23	16,08	11,01	12,43	13,85	0,240	0,260	0,280	1,12	1,14	1,16
Печень	3,64	12,94	39,33	3,51	11,17	28,23	0,000	0,030	0,090	1,04	1,13	1,39
Пищевод	4,85	9,25	34,15	4,63	7,98	25,45	0,010	0,020	0,040	1,05	1,09	1,34
Ободочная кишка	5,50	7,60	20,48	5,21	6,98	17,00	0,090	0,120	0,310	1,06	1,08	1,20
Желудок	1,58	2,56	6,95	1,56	2,47	6,50	0,030	0,040	0,090	1,02	1,03	1,07
Остальные солид. раки	3,03	5,50	17,28	2,94	5,15	14,74	0,170	0,530	1,680	1,03	1,06	1,17

Таблица 13.

Избыточные радиационные риски персонала
 из группы приемлемого суммарного абсолютного радиационного риска

Локализация	ERR, %			AR, %			EAR, *10 ⁻³			SIR		
	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.
Все раки	0,59	3,32	8,73	0,59	3,18	8,03	0,100	0,460	1,000	1,01	1,03	1,09
Все солидные раки	0,54	3,27	8,50	0,54	3,14	7,83	0,090	0,450	0,980	1,01	1,03	1,09
Лейкемия	0,26	5,23	25,02	0,26	4,89	20,01	0,001	0,014	0,045	1,00	1,05	1,25
Мочевой пузырь	3,23	11,32	27,37	3,13	9,94	21,49	0,000	0,110	0,370	1,03	1,11	1,27
Органы дыхания	1,38	6,03	25,88	1,36	5,57	20,56	0,020	0,130	0,340	1,01	1,06	1,26
Молочная железа	0,61	5,58	17,58	0,61	5,13	14,95	0,010	0,110	0,370	1,01	1,06	1,18
Печень	0,40	5,70	18,14	0,40	5,27	15,36	0,000	0,010	0,030	1,00	1,06	1,18
Пищевод	0,78	5,01	33,53	0,77	4,54	25,11	0,000	0,010	0,030	1,01	1,05	1,34
Ободочная кишка	0,52	3,69	10,02	0,52	3,53	9,11	0,010	0,040	0,090	1,01	1,04	1,10
Желудок	0,15	1,35	6,17	0,15	1,32	5,81	0,000	0,010	0,040	1,00	1,01	1,06
Остальные солид. раки	0,21	2,63	8,25	0,21	2,53	7,62	0,010	0,190	0,500	1,00	1,03	1,08

Таблица 14.

Избыточные радиационные риски персонала
 из группы пренебрежимо малого суммарного абсолютного радиационного риска

Локализация	ERR, %			AR, %			EAR, *10 ⁻³			SIR		
	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.	Мин.	Средн.	Макс.
Все раки	0,00	0,51	2,57	0,00	0,50	2,50	0,000	0,020	0,100	1,00	1,01	1,03
Все солидные раки	0,00	0,25	2,03	0,00	0,24	1,99	0,000	0,010	0,090	1,00	1,00	1,02
Лейкемия	0,00	6,03	26,97	0,00	5,31	21,24	0,000	0,004	0,013	1,00	1,06	1,27
Мочевой пузырь	0,00	0,79	5,18	0,00	0,77	4,92	0,000	0,000	0,040	1,00	1,01	1,05
Органы дыхания	0,00	0,36	3,67	0,00	0,36	3,54	0,000	0,000	0,040	1,00	1,00	1,04
Молочная железа	0,00	0,05	1,92	0,00	0,05	1,88	0,000	0,000	0,020	1,00	1,00	1,02
Печень	0,00	0,50	4,37	0,00	0,49	4,19	0,000	0,000	0,000	1,00	1,01	1,04
Пищевод	0,00	0,26	4,60	0,00	0,25	4,40	0,000	0,000	0,000	1,00	1,00	1,05
Ободочная кишка	0,00	0,28	2,39	0,00	0,28	2,33	0,000	0,000	0,010	1,00	1,00	1,02
Желудок	0,00	0,09	0,70	0,00	0,09	0,70	0,000	0,000	0,000	1,00	1,00	1,01
Остальные солид. раки	0,00	0,24	2,44	0,00	0,24	2,38	0,000	0,010	0,050	1,00	1,00	1,02

Подробная характеристика персонала из группы повышенного абсолютного радиационного риска (ГПРР) – распределение по возрасту, стажу на ИДК и накопленной дозе – приведена в табл. 15 – 17. Из табл. 15 видно, что почти 50 % от численности персонала в ГПРР составляет возрастная группа от 75 до 79 лет; 40,9 % персонала на ИДК данной возрастной группы входит в ГПРР. Данные в табл. 16 показывают, что персонал со стажем на ИДК от 50 до 54 лет, составляет 52,6 % ГПРР; 55,6 % персонала, состоящего на ИДК с таким стажем, входит в ГПРР. Из табл. 17 видно, что около трети ГПРР составляет персонал, имеющий накопленную дозу от 150 до 200 мЗв; но только 17,6 % персонала на ИДК с накопленной дозой, лежащей в данном интервале, входит в ГПРР.

Таблица 15.

Распределение численности персонала ГПРР на 2013 г. по полу и возрасту

Возрастная группа, лет	Оба пола			Мужчины			Женщины		
	абс. ед.	% в ГПРР*	% от всего перс.**	абс. ед.	% в ГПРР*	% от всего перс.**	абс. ед.	% в ГПРР*	% от всего перс.**
<70	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
70-74	7	36,8	25,9	6	35,3	27,3	1	50,0	20,0
75-79	9	47,4	40,9	8	47,1	38,1	1	50,0	100,0
80-	3	15,8	23,1	3	17,6	25,0	0	0,0	0,0
Все	19	100,0	6,2	17	100,0	6,0	2	100,0	4,1

* % в ГПРР – процент от численности персонала данного пола в группе повышенного радиационного риска.

** % от всего перс. – процент от численности всего персонала данного пола данной возрастной группы, состоящего на ИДК.

Таблица 16.

Распределение численности персонала ГПРР на 2013 г. по полу и стажу на ИДК

Стаж на ИДК, лет	Оба пола			Мужчины			Женщины		
	абс. ед.	% в ГПРР	% от всего перс.	абс. ед.	% в ГПРР	% от всего перс.	абс. ед.	% в ГПРР	% от всего перс.
<45	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
45-49	7	36,8	33,3	7	41,2	38,9	0	0,0	0,0
50-54	10	52,6	55,6	8	47,1	50,0	2	100,0	100,0
55-59	2	10,5	100,0	2	11,8	100,0	0	0,0	0,0
60-	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
Все	19	100,0	6,2	17	100,0	6,0	2	100,0	4,1

Таблица 17.

Распределение численности персонала ГПРР по полу и накопленной дозе

Накопленная доза, мЗв	Оба пола			Мужчины			Женщины		
	абс. ед.	% в ГПРР	% от всего перс.	абс. ед.	% в ГПРР	% от всего перс.	абс. ед.	% в ГПРР	% от всего перс.
<150	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
150-	6	31,6	17,6	4	23,5	12,9	2	100,0	66,7
200-	11	57,9	100,0	11	64,7	100,0	0	0,0	0,0
250-	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
300-	1	5,3	100,0	1	5,9	100,0	0	0,0	0,0
350-	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
400-	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
450-	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0	0	0,0	0,0
500-	1	5,3	100,0	1	5,9	100,0	0	0,0	0,0
Все	19	100,0	6,2	17	100,0	6,0	2	100,0	4,1

По значениям атрибутивных радиационных рисков солидных раков (AR_{SOL}), лейкемии (AR_{LEU}) и органов

дыхания (AR_{RESP}) персонала были сформированы группы высокого потенциального ($AR_{SOL} \geq 20\%$, либо $AR_{LEU} \geq 75\%$, либо $AR_{RESP} \geq 30\%$), потенциального ($AR_{SOL} \geq 10\%$, либо $AR_{LEU} \geq 50\%$, либо $AR_{RESP} \geq 20\%$) и пренебрежимо малого ($AR_{SOL} < 10\%$, $AR_{LEU} < 50\%$, $AR_{RESP} < 20\%$) атрибутивных рисков.

Значения основных характеристик и рисков персонала по группам атрибутивного радиационного риска приведены в табл. 18.

Таблица 18.

Значения основных характеристик и рисков персонала по группам атрибутивного радиационного риска

Значение показателя	Возраст, лет	Стаж на ИДК, лет	Накопленная доза, мЗв	AR_{SOL} , %	AR_{LEU} , %	AR_{RESP} , %	EAR_{ALL} , $\cdot 10^{-3}$
Группа неонкологических заболеваний (инфаркты, инсульты), 1 чел. (0,3 % персонала)							
-	80	55	578,28	15,58	13,77	22,15	3,2442
Группа высокого потенциального риска, 0 чел. (0 % персонала)							
-	-	-	-	-	-	-	-
Группа потенциального риска, 3 чел. (0,9 % персонала)							
Мин.	74	49	158,64	6,16	11,15	20,19	0,6743
Среднее	78	51	305,61	9,96	14,97	20,96	1,6420
Макс.	80	55	578,28	15,58	20,01	22,15	3,2442
Группа пренебрежимо малого риска, 302 чел. (99,1 % персонала)							
Мин.	25	2	0,19	0,00	0,00	0	0,0000
Среднее	56	22	60,21	1,64	5,13	2,83	0,2481
Макс.	87	55	302,55	8,59	21,24	19,02	1,4233

В группу высокого потенциального атрибутивного риска не вошел ни один человек. В группу потенциального атрибутивного риска вошло 3 человека (0,9 % персонала). В группу пренебрежимо малого атрибутивного риска вошло 302 человека (99,1 % персонала). Отдельно была сформирована группа неонкологических заболеваний (инфаркты, инсульты) по значению накопленной дозы ($D_{нак} \geq 500$ мЗв), в нее вошел один сотрудник ННЦ ХФТИ в возрасте 80 лет, со стажем на ИДК 55 лет.

Распределения персонала ННЦ ХФТИ, состоящего на ИДК, по атрибутивному риску солидных раков, лейкемии и органов дыхания представлены на рис. 3 - 5. Атрибутивный риск показывает вероятность радиационной обусловленности данных онкозаболеваний. Как видно из рисунков, вероятность заболевания радиогенным солидным раком у 90 % персонала не превышает 5 %. У 86 % персонала вероятность заболевания лейкемией, обусловленной профессиональным облучением, не превышает 10%. У 94 % персонала вероятность онкозаболевания органов дыхания, вызванного облучением, не превышает 10%. Максимальные значения атрибутивных рисков не превышают пороговых для группы высокого потенциального риска, поэтому онкозаболевания персонала ННЦ ХФТИ не могут быть признаны профессиональными.

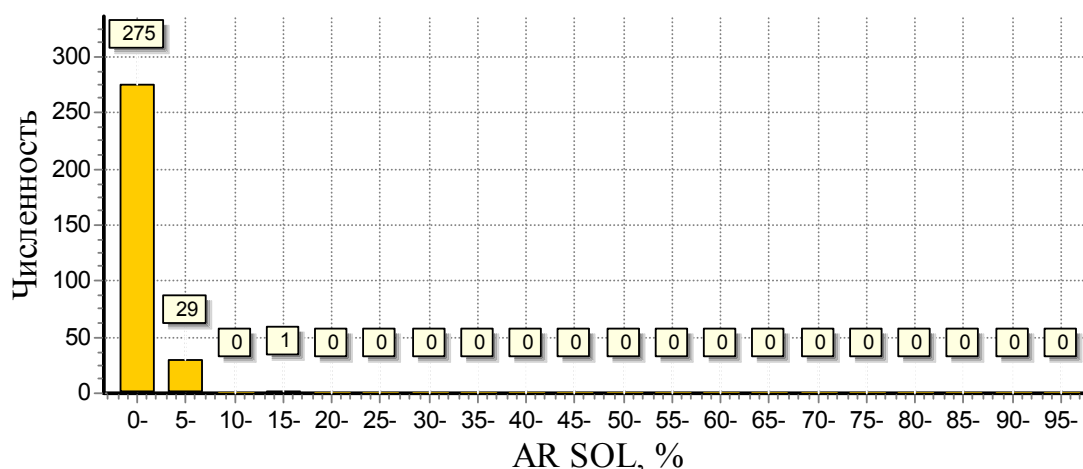


Рис. 3. Распределение персонала по атрибутивному риску солидных раков

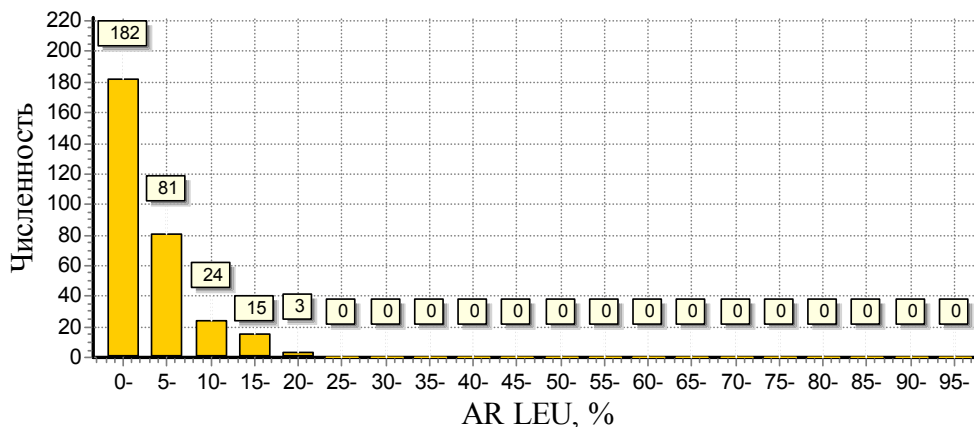


Рис. 4. Распределение персонала по атрибутивному риску лейкемии

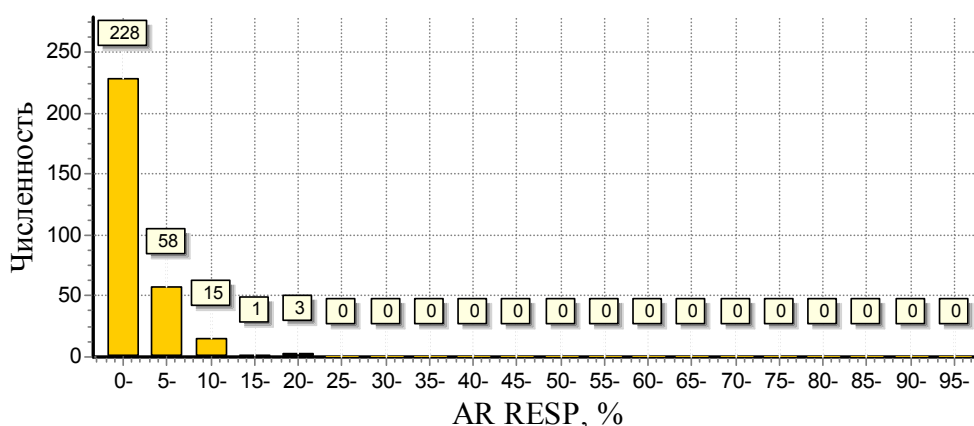


Рис. 5. Распределение персонала по атрибутивному риску органов дыхания

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Средний возраст персонала на ИДК в 2013 г. составил 56 лет. Средний стаж работы с ИИИ – 21 год. Средняя накопленная доза – 59,66 мЗв (табл. 3). Средняя годовая доза персонала в 2012 г. составила 1,38 мЗв, что сравнимо с окружающим радиационным фоном – 1,14 мЗв/год. Максимальная годовая доза персонала в 2012 г. составила 3,64 мЗв, что примерно в 5,5 раз меньше установленного международными стандартами годового предела дозы – 20 мЗв/год. За последние 20 лет уровень среднегодовой дозы персонала ННЦ ХФТИ не превышал 2 мЗв (рис. 2).

В группу повышенного абсолютного радиационного риска (индивидуальный радиационный риск больше социально приемлемого уровня риска – $1 \cdot 10^{-3}$ /год) на 2013 г. вошло 19 сотрудников (6,2 % персонала на ИДК). Средний возраст группы составил 75 лет, средний стаж на ИДК – 50 лет, средняя накопленная доза на 2011 г. (принимаемая в расчет рисков на 2013 г.) – 226,23 мЗв. Минимальный возраст в группе повышенного радиационного риска составил 71 год, минимальный стаж работы с ИИИ – 45 лет, минимальная накопленная доза на 2011 г. – 174,35 мЗв (табл. 8). Основной вклад в индивидуальный суммарный абсолютный радиационный риск сотрудников составил риск солидных раков (табл. 7), при этом максимальный атрибутивный риск солидных раков (вероятность онкозаболевания, обусловленного профессиональным облучением) равен 15,58 %, максимальный атрибутивный риск лейкемии – 21,24 %, максимальный атрибутивный риск органов дыхания – 22,15 %.

В группу потенциального риска по AR (имеет место превышение пороговых значений атрибутивных рисков: для солидных раков – 10 %, для лейкемии – 50 %, для органов дыхания – 20 %) на 2013 г. вошел 1 мужчина в возрасте 80 лет, со стажем на ИДК 55 лет и накопленной дозой 578,28 мЗв (AR солидных раков – 15,58 %, AR органов дыхания – 22,15 %), и 2 женщины в возрасте 74 и 80 лет, со стажем на ИДК 49 лет и накопленными дозами 179,93 мЗв и 158,64 мЗв соответственно (AR органов дыхания – 20,19 % и 20,56 % соответственно).

Атрибутивный риск рака печени на 2013 г. превышает 20 %-й уровень у одного сотрудника ННЦ ХФТИ – мужчины 80 лет, со стажем работы с ИИИ 55 лет – и составляет 28,23 %. При этом абсолютный радиационный риск индукции рака печени у данного сотрудника находится в диапазоне пренебрежимо малого риска и равен $0,8 \cdot 10^{-4}$.

В группу высокого потенциального риска индукции онкозаболевания на 2013 г. не вошел ни один сотрудник, состоящий на ИДК в ННЦ ХФТИ.

Полученные данные позволяют сделать выводы о том, что:

– за последние 20 лет персонал ННЦ ХФТИ, состоящий на ИДК, получал минимальные дополнительные к фоновым профессиональные дозовые нагрузки, которые не могут вызвать в будущем значимого увеличения вероятности онкозаболеваний;

– высокие абсолютные риски персонала из группы повышенного радиационного риска связаны с возрастом (высокими фоновыми значениями онкозаболеваемости) и высокими дозами, полученными до 1993 г.;

– по рассчитанным значениям атрибутивных радиационных рисков персонала на 2013 год, онкозаболевания не могут быть признаны радиационно обусловленными.

– в настоящее время уровень радиационной безопасности персонала ННЦ ХФТИ, работающего с источниками ионизирующего излучения, находится на достаточно высоком уровне.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Radiation Protection and Safety of Radiation Sources: International Basic Safety Standards. Intermediate edition. A series of IAEA safety standards, № GSR Part 3 (Interim). Vienna: IAEA, 2011.
2. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation, Sources and Effects of Ionizing Radiation: UNSCEAR 1994 Report to the General Assembly, with Scientific Annexes. 272 pages. No index. ISBN 92-1-142211-6. U.N. Sales No. E.94.IX.11. 1994.
3. Methods for estimating the probability of cancer from occupational radiation exposure // International Atomic Energy Agency (IAEA), April 1996, IAEA-TECDOC-870. Vienna: IAEA, 1996, p. 55.
4. ICRP, 2007. The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection. ICRP Publication 103. Ann. ICRP 37 (2-4).
5. Normy radiatsionnoi bezopasnosti Ukrainy (NRBU-97). Gosudarstvennye gigenicheskie normativy. - Kiev, 1998.
6. Rukovodstvo po otsenke professional'nogo riska dlya zdorov'ya rabotnikov. Organizatsionno-metodicheskie osnovy, printsipy i kriterii otsenki. Rukovodstvo. P 2.2.1766-03. Minzdrav Rossii. - Moskva, 2004.
7. Ivanov V.K., Tsyb A.F., Panfilov A.P., Agapov A.M. Optimizatsiya radiatsionnoi zashchity: «Dozovaya matritsa». - M.: «Meditsina», 2006. - 304 s.
8. Wakeford R., Antell B.A., Leigh W.J. A review of probability of causation and its use in a compensation scheme for nuclear workers in the United Kingdom // Health Phys. – 1998. - Vol. 74. - P. 1–9.
9. Byuleten' Natsional'nogo kantser-reyestru №14. - Rak v Ukrayini, 2011-2012. – 2013.

blank line)

(blank line)

PACS: Here you must specify PACS codes

(blank line)

INSTRUCTIONS FOR PREPARING MANUSCRIPT (TITLE)

(blank line)

N.N. Author¹, N.N. Co-author(s)²

¹*Affiliation*

²*Affiliation (if different from Authors affiliation)*

e-mail: corresponding_authors@mail.com

Received January 14, 2014

(blank line)

Each paper must begin with an abstract. The abstract should be typed in the same manner as the body text (see below). Please note that these Instructions are typed just like the manuscripts should be. The abstract must have at least 500 phonetic symbols, supplying general information about the achievements, and objectives of the paper, experimental technique, methods applied, significant results and conclusions. Page layout: the text should be printed on the paper A4 format, at least 3 pages, with margins of: Top - 3, Bottom, Left and Right - 2 cm. The abstract should be presented in English (only for foreign authors), Ukraine and Russian.

KEYWORDS: there, must, be, at least, 5 keywords

(blank line)

This is introduction section. This paper contains instructions for preparing the manuscripts. The text should be prepared in .doc format (using MS Word).

(blank line)

INSTRUCTIONS

The text should be typed as follows:

- title: Times New Roman, 12 pt, ALL CAPS, bold, 1 spacing, centered;
- authors: name, initials and family names; Times New Roman, 12 pt, bold, 1 spacing, centered;
- affiliation(s): Times New Roman, 9 pt, italic, 1 spacing, centered;
- abstract: Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, justified;
- body text: Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, justified; paragraphs in sections should be indented right (tabulated) for 0.75 cm;
- section titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering, one line should be left, blank above section title;
- subsection titles: Times New Roman, 10 pt, bold, 1 spacing, centered, without numbering in accordance to the section (see below), one line should be left blank above subsection title;
- figure captions: width of the figure should be 85 or 170 mm, figures should be numbered (Fig. 1) and titled below figures using sentence format, Times New Roman, 9 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line); one line should be left blank below figure captions;
- table captions: width of the table should be 85 or 170 mm, tables should be numbered (Table 1.) and titled above tables using sentence format, Times New Roman, 10 pt, 1 spacing, centered (if one line) or justified (if more than one line), tables should be formatted with a single-line box around the outside border and single ruling lines between rows and columns; one line should be left blank below tables;
- equations: place equations centered, numbered in Arabic (1), flush right, equations should be specially prepared in MathType; one line should be left blank below and above equation.

(blank line)

Additional instructions

Numerated figures and tables should be embedded in your text and placed after they are cited. Only black and white drawings and sharp photographs are acceptable. Letters in the figures should be 3 mm high. The figures should be presented in one of the following graphic formats: jpg, gif, pcx, bmp, tif.

(blank line)

REFERENCES

Titles of journals, articles and author names in references should be given in Roman script. References should be numbered in the order of referring in the text, e.g. [1], [2-5], etc. Do not superscript your reference numbers. Cite references as in journal format. The full references should be listed in numerical order of citation in the text at the end of the paper (justified), Times New Roman, 9 pt, 1 spacing. References should be given in the following form:

Journals

1. Holzwarth G., Eckart G. Fluid-dynamical approximation for finite Fermi systems // Nucl. Phys. - 1979. - Vol. A325. - P.1-30.

Books

2. Bertsch G.F., Broglia R.A. Oscillations in finite quantum systems. Ch. 6. - Cambridge: Cambridge University, 1994. - 150 p.

Chapters

3. Van der Woude A. The electric giant resonances // Electric and magnetic giant resonances in nuclei / Ed. by J. Speth. - Singapore: World Scientific P.C., 1991. - P. 99-232.

Conference or symposium proceedings

4. Smolanzuk R., Skalski J., Sobiczewski A. Masses and half-life of superheavy elements // Proc. of the International Workshop 24 on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations / Ed. by H. Feldmeier et al. - GSI, Darmstadt, 1996. - P.35-42.

Special Notes

1. Use International System of Units (SI system). 2. It is undesirable to use acronyms in the titles. Please define the acronym on its first use in the paper. 3. Refer to isotopes as ¹⁴C, ³H, ⁶⁰Co, etc.