

ISSN 2221-7754

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

# ВІСНИК

ХАРКІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ

імені В.Н. Каразіна

**№ 1069**

*серія: фізична*

**«Ядра, частинки, поля»**

Заснована у 1998 р.

Випуск **4 /60/**

**The Journal of Kharkiv National University**

**№ 1069**

*physical series*

**«Nuclei, Particles, Fields»**

Issue **4 /60/**

Харків

**2013**

## DESCRIPTION AND PURPOSE OF THE JOURNAL

The Journal of Kharkov National University (Physical series "Nuclei, Particles, Fields") is a journal covering elementary particles physics, nuclear physics, plasma physics and technologies, solid state physics and radiation physics. The Journal publishes research articles, short communications, review articles and scientific book reviews.

Issues per year – 4.

## EDITORIAL BOARD

**Editor-in-Chief** - Azarenkov N.A., Academician of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Deputy Chief Editor** - Girka I.A., D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Executive Secretary** - Girnyk S.A., PhD., V.N. Karazin Kharkiv National University

**Adamenko I.N.**, D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Barannik E.O.**, D.Sc., V.N. Karazin Kharkiv National University

**Berezhnoy Yu.A.**, D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Bizyukov A.A.**, D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Budagov Yu.A.**, D.Sc., Laboratory of nuclear problems, Joint Institute of Nuclear Research, Dubna, Russia

**Duplij S.A.**, D.Sc., V.N. Karazin Kharkiv National University

**Garkusha I.E.**, D.Sc., Professor, Director of Institute of Plasma Physics NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

**Grekov D.L.** – D.Sc., NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

**Khodusov V.D.**, D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Kondratenko A.N.**, D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University

**Lazurik V.T.**, D.Sc., V.N. Karazin Kharkiv National University

**Melnyk V.M.**, D.Sc., Institute of Radio Astronomy, Ukrainian National Academy of Science

**Merenkov M.P.**, D.Sc., NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

**Jean-Marie Noterdaeme**, PhD., Professor, Max Planck Institute for Plasma Physics, Germany and Universiteit Gent, Belgium

**Ostrikov K.**, D.Sc., Founding Leader, Plasma Nanoscience Centre Australia (PNCA), CEO Science Leader, CSIRO Materials Science and Engineering, Clayton, Australia

**Peletminsky S.V.**, Academician of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor, NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

**Slusarenko Yu.V.**, Corresponding member of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor, NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

**Smolyakov A.**, D.Sc., Professor, Department of Physics and Engineering Physics, University of Saskatchewan, Canada

**Shul'ga N.F.**, Academician of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor, NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

**Tkachenko V.I.**, D.Sc., Professor, Director "Renewable Energy Sources and Sustainable Technology" Science and Production Establishment, NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"

### Editorial office address

High Technology Institute

V.N. Karazin Kharkiv National University

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

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

E-mail: [visnyk.npf@univer.kharkov.ua](mailto:visnyk.npf@univer.kharkov.ua)

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

## ПРОФІЛЬ ЖУРНАЛУ ТА МЕТА ВИДАННЯ

"Вісник Харківського національного університету" (серія: фізична «Ядра, частинки, поля») є збірником наукових праць з фізики елементарних частинок, ядерної фізики, фізики плазми та плазмових технологій, фізики твердого тіла та радіаційної фізики. Збірник публікує наукові статті, короткі повідомлення, оглядові статті та рецензії на наукові видання.

Періодичність випуску збірника – 4 рази на рік.

*Затверджено до друку рішенням Вченої ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна (протокол № 11 від 27 вересня 2013 р.)*

## РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

**Головний редактор** – Азаренков М.О. – академік НАН України, д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Заступник головного редактора** – **Гірка І.О.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Відповідальний секретар** – Гірник С.А. – к. ф.-м. наук

**Адаменко І.М.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Баранник Є.О.** – д. ф.-м. наук, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Бережної Ю.А.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Бізоков О.А.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Будагов Ю.А.** – д. ф.-м. наук, професор, Лабораторія ядерних проблем ім. В.П. Дзержелова, ОІЯД м. Дубна, Росія

**Дуплій С.А.** – д. ф.-м. наук, член Американської і Європейської фізичної спілки, член Асоціації математичної фізики, ХНУ імені В.Н. Каразіна

**Гаркуша І.Є.** – д. ф.-м. наук, професор, директор Інституту фізики плазми ННЦ ХФТІ

**Греков Д.Л.** – д. ф.-м. наук, ННЦ ХФТІ

**Кондратенко А.М.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Лазурик В.Т.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Мельник В.М.** – д. ф.-м. наук, Радіоастрономічний інститут НАН України

**Меренков М.П.** – д. ф.-м. наук, ННЦ ХФТІ

**Жан-Марі Нотердам** – доктор, професор, Інститут фізики Макса-Планка Німеччина, Університет м. Гент, Бельгія

**Остриков К.** – д. ф.-м. наук, професор, Головний виконавчий директор та науковий співробітник Організації Співдружності з наукових і промислових досліджень (CSIRO), Клайтон, Австралія

**Пелетмінський С.В.** – акад. НАН України, д. ф.-м. наук, професор, ННЦ ХФТІ

**Слюсаренко Ю.В.** – чл.-кор. НАН України, д. ф.-м. наук, професор, ННЦ ХФТІ

**Смоляков А.** – д. ф.-м. наук, професор, факультет фізики та інженерної фізики, Саскачеванський університет, Канада

**Ткаченко В.І.** д. ф.-м. наук, професор, директор Науково-виробничого комплексу "Відновлювані джерела енергії та ресурсозберігаючі технології", ННЦ ХФТІ

**Ходусов В.Д.** – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна

**Шульга М.Ф.** – академік НАН України, д. ф.-м. наук, професор, ННЦ ХФТІ

### Адреса редакції

Інститут високих технологій

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

пр. Курчатова, 31, кімната 402, м. Харків, 61108, Україна

Телефон: +380-57-335-18-33

E-mail: [visnyk.npf@univer.kharkov.ua](mailto:visnyk.npf@univer.kharkov.ua)

Web-сторінка: <http://www-nuclear.univer.kharkov.ua>

Статті пройшли внутрішнє і зовнішнє рецензування.

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 11825-696 ПР від 4.10.2006.

CONTENTS

ЗМІСТ

Articles

<b>S.O. Nikolayenko, Yu.V. Slyusarenko</b> On the effect of external stochastic field on systems of particles interacting with multiplying and capturing hydrodynamic media	4
<b>I.G. Marchenko, I.I. Marchenko</b> Particle transport in space-periodic potentials in underdamped systems	22
<b>V.A. Kizka, A. Yu. Korchin, V.S. Trubnikov</b> Charged pion production in heavy ion collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 17.3$ GeV. Comparison to models	31
<b>V.N. Bondarenko, A.V. Goncharov, V.I. Sukhostavets</b> Measurement of 2D current distribution in the fast ion beam	35
<b>V.A. Rudakov, A.V. Georgiyevskiy</b> Method of determining coil misalignments in tokamak	41
<b>V.A. Lisovskiy</b> Electron transport coefficients for $NF_3$	46
<b>V.G. Kirichenko, Kovalenko T.O.</b> Ion and laser irradiation of zirconium alloys	58
<b>I.I. Papirov, P.I. Stoev</b> Acoustic emission effects at a plastic strain of steels in a magnetic field	66
<b>V.E. Semenenko, S.A. Kozionov</b> Formation features of electron compounds in composite materials	75
<b>O.E. Kozhevnikov, P.N. V'yugov, N.N. Pylypenko, V.D. Virich</b> The floating-zone refining of hafnium taking into account the impurity evaporation	81
<b>P.I. Stoev, A.A. Vasiliev, K.V. Kovtun</b> The features acoustic emission during plastic deformation of hafnium	87
<b>A.P. Shcherban', O.A. Datsenko</b> Analysis of the phase diagrams of binary metallic systems at low concentrations of the components	95

Personalities

<b>Igor Nikolayevich Adamenko</b> (to 75 anniversary of birth)	100
---	-----

Obituaries

<b>In memory of Vitalij Valentynovich Slezov</b>	102
--	-----

Статті

<b>С.О. Ніколаснко, Ю.В. Слюсаренко</b> Про вплив зовнішнього стохастичного поля на систему частинок, що взаємодіють з мультиплікуючими та поглинаючими гідродинамічними середовищами	4
<b>І.Г. Марченко, І.І. Марченко</b> Транспорт частинок у просторово-періодичних потенціалах у недодемпфированих системах	22
<b>В.А. Кізка, О.Ю. Корчін, В.С. Трубніков</b> Народження заряджених піонів в зіткненнях важких іонів при енергії $\sqrt{s_{nn}} = 17,3$ ГеВ. Порівняння з моделями	31
<b>В. Бондаренко, О.В. Гончаров, В.І. Сухостаєць</b> Вимірювання розподілу густини струму по поперечному перерізу пучка прискорених іонів	35
<b>В.А. Рудаков, А.В. Георгієвський</b> Метод визначення неточностей в котушках магнітної системи токамака	41
<b>В.О. Лісовський</b> Коефіцієнти переносу електронів в $NF_3$	46
<b>В.Г. Кіріченко, Коваленко Т.О.</b> Іонне та лазерне опромінення сплавів цирконію	58
<b>І.І. Папіров, П.І. Стоєв</b> Акустично-емісійні ефекти при пластичній деформації сталей у магнітному полі	66
<b>В.С. Семененко, С.А. Козіонов</b> Особливості утворення електронних сполук у конструкційних матеріалах	75
<b>О.Є. Кожевніков, П.М. В'югов, М.М. Пилипенко, В.Д. Вірич</b> Рафінування гафнію методом зонної перекристалізації з урахуванням випаровування домішок	81
<b>П.І. Стоєв, А.О. Васильєв, К.В. Ковтун</b> Особливості акустичної емісії при пластичній деформації гафнію	87
<b>О.П. Щербань, О.А. Даценко</b> Аналіз діаграм стану подвійних металічних систем в області низьких концентрацій компонентів	95

Персоналії

<b>Ігор Миколайович Адаменко</b> (до 75-річчя від дня народження)	100
--	-----

Некрологи

<b>Пам'яті Віталія Валентиновича Сльозова</b>	102
---	-----

УДК 538.9.

**О ВЛИЯНИИ ВНЕШНЕГО СТОХАСТИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СИСТЕМУ ЧАСТИЦ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С МУЛЬТИПЛИЦИРУЮЩИМИ И ПОГЛОЩАЮЩИМИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИМИ СРЕДАМИ****С.А. Николаенко<sup>\*</sup>, Ю.В. Слюсаренко<sup>\*,\*\*</sup>**<sup>\*</sup> *Институт теоретической физики им. А.И. Ахиезера НИЦ ХФТИ, Украина, Харьков 61108, ул. Академическая 1*<sup>\*\*</sup> *Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Украина, Харьков 61022, пл. Свободы 4**E-mail: [s\\_nikolayenko@kipt.kharkov.ua](mailto:s_nikolayenko@kipt.kharkov.ua)*

Received August 30, 2013, accepted September 19, 2013

В работе рассмотрена динамика длинноволновых неравновесных флуктуаций, обусловленных воздействием внешнего стохастического поля, в системах частиц, взаимодействующих с мультиплицирующими и поглощающими средами. Получены общие уравнения динамики длинноволновых флуктуаций в рамках метода усреднения уравнений эволюции параметров описания по внешней случайной силе. Подробно изучен случай воздействия на систему аддитивного гауссова шума. Показано, что при таком характере внешней случайной силы существует временной интервал, в течение которого при описании эволюции системы можно ограничиться учетом динамики только парных гидродинамических корреляций. Выведены линеаризованные уравнения динамики системы и проанализированы их общие решения в случае малых пространственных неоднородностей. Рассмотрены условия формирования стационарных состояний в такой системе и изучены вопросы их устойчивости. Обнаружено существенное влияние на устойчивость стационарных состояний особенностей динамики длинных неравновесных флуктуаций, которые развиваются в системе даже в том случае, если они отсутствовали в начальный момент времени.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** стохастические процессы, релаксация, длинноволновые флуктуации, внешняя случайная сила, размножающие и поглощающие среды

**ON THE EFFECT OF EXTERNAL STOCHASTIC FIELD ON SYSTEMS OF PARTICLES INTERACTING WITH MULTIPLYING AND CAPTURING HYDRODYNAMIC MEDIA****S.O. Nikolayenko<sup>\*</sup>, Yu.V. Slyusarenko<sup>\*\*\*</sup>**<sup>\*</sup> *Akhiezer Institute for Theoretical Physics NSC KIPT, Akademichna Str. 1, Kharkiv 61108, Ukraine*<sup>\*\*</sup> *V.N. Karazin Kharkov National University Ukraine, Kharkiv 61022, Svobody Square 4.*

This work considers dynamics of non-equilibrium long wave fluctuations in systems of particles interacting with multiplying and capturing media, generated by external stochastic field. General dynamic equations for long wave fluctuations are obtained using the method of averaging over external random force. The case of additive Gaussian noise is considered in detail. It is shown that in the case of such an external random force there exists a time interval during which the description of the evolution of the system can be limited to considering only the dynamics of the hydrodynamic pair correlations. Linearised dynamic equations for pair correlations are obtained, and their solutions in case of small spatial inhomogeneity are considered. The formation of stationary states and the problem of their stability is studied. It has been shown that long wave fluctuations can be generated by external random force and dramatically influence on stability of stationary states in some cases.

**KEY WORDS:** stochastic processes, relaxation, long wave fluctuations, external random force, multiplying and capturing media

**ПРО ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО СТОХАСТИЧНОГО ПОЛЯ НА СИСТЕМУ ЧАСТИНОК, ЩО ВЗАЄМОДІЮТЬ З МУЛЬТИПЛІКУЮЧИМИ ТА ПОГЛИНАЮЧИМИ ГІДРОДИНАМІЧНИМИ СЕРЕДОВИЩАМИ****С.О. Ніколаєнко<sup>\*</sup>, Ю.В. Слюсаренко<sup>\*\*\*</sup>**<sup>\*</sup> *Інститут теоретичної фізики ім. А.І. Ахієзера ННЦ ХФТИ, Україна, Харків 61108, вул. Академічна 1*<sup>\*\*</sup> *Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Україна, Харків 61022, майдан Свободи 4*

У роботі розглянута динаміка довгохвильових нерівноважних флуктуацій, обумовлених дією зовнішнього стохастичного поля у системах частинок, що взаємодіють з мультиплікуючими та поглинаючими середовищами. Отримані загальні рівняння динаміки довгохвильових флуктуацій у рамках методу усереднення рівнянь еволюції параметрів опису системи за зовнішньою випадковою силою. Детально вивчено випадок дії на систему адитивного Гаусового шуму. Показано, що при такому характері зовнішньої сили існує інтервал, у продовж якого при описі системи можна обмежитися врахуванням динаміки тільки парних гідродинамічних кореляцій. Виведено линеаризовані рівняння динаміки системи там проаналізовано їх загальні розв'язки у випадку малих просторових неоднорідностей. Розглянуто умови формування стаціонарних станів ц такій системі та вивчено питання їх стабільності. Знайдено істотний вплив на стійкість стаціонарних станів особливостей динаміки довгих нерівноважних флуктуацій, які виникають у системі, навіть якщо вони були відсутні у початковий момент часу.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** стохастичні процеси, релаксация, довгохвильові флуктуації, зовнішня випадкова сила, розмножуючі та поглинаючі середовища

Интерес к динамике крупномасштабных неравновесных флуктуаций имеет как академическую, так и прикладную составляющие. С точки зрения фундаментальной науки интерес к неравновесным флуктуациям обусловлен вопросами динамического обоснования статистической механики. Последовательное обоснование требует прояснения роли крупномасштабных флуктуаций в релаксационных процессах с установлением границ

применимости классической (нефлуктуационной) кинетической теории. Заметим в этой связи, что несколько десятилетий назад в численном эксперименте был обнаружен степенной характер затухания автокорреляционных функций для двух- и трехмерных моделей газов [1]. Первые попытки объяснить этот результат с помощью феноменологической теории "длинных гидродинамических хвостов" были изложены в работах [2,3]. Было показано, что наличие крупномасштабных корреляций (их еще называют длинноволновыми флуктуациями) оказывает существенное влияние на релаксацию системы к состоянию статистического равновесия. В частности, наличие неравновесных гидродинамических флуктуаций приводит к релаксации системы к равновесному состоянию по степенному закону. Из более поздних работ, в которых изучались длинноволновые флуктуации в феноменологическом подходе, следует отметить работы [4-6]. В [6] эволюция систем с большим радиусом корреляций рассматривалась в гиббсовском подходе. Впоследствии был предложен микроскопический подход к описанию неравновесных гидродинамических флуктуаций [7], основанный на методе сокращенного описания Боголюбова [8, 9].

Что касается прикладных аспектов теории длинноволновых неравновесных флуктуаций, то они связаны с определяющей ролью гидродинамических длинноволновых флуктуаций в широком классе задач теории турбулентности. Однако с точки зрения приложений к такого рода задачам при построении динамической теории флуктуаций необходимо учитывать влияние на систему внешних, в частности стохастических, сил. Возможность порождения крупномасштабных флуктуаций именно влиянием внешних стохастических сил существенным образом изменяет картину построения динамики этих флуктуаций, см., например, [10]. Отметим, что одними из первых работ, в которых отмечалась роль гидродинамических флуктуаций в теории турбулентности, были работы [11, 12]. С тех пор изучению роли длинноволновых флуктуаций в задачах теории турбулентности было посвящено огромное множество работ, число которых продолжает расти, см. в этой связи, например, [13] и имеющиеся там ссылки.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния длинноволновых флуктуаций, возникающих под действием внешней случайной силы, на релаксационные процессы в системах, состоящих из частиц одного сорта, слабо взаимодействующих с гидродинамическими средами, образованными частицами другого сорта. Будем учитывать при этом возможность размножения и поглощения частиц первого сорта гидродинамическими средами. Указанная система может служить в качестве модели описания распространения нейтронов в гидродинамических средах. Выбор именно такой системы для изучения обусловлен несколькими факторами, в том числе и возможной полезностью теории с точки зрения определенных приложений или рекомендаций. Во-первых, нейтроны используются исследователями как тонкий инструмент для экспериментального изучения внутреннего состояния конденсированных сред [14], вследствие чего могут быть использованы для обнаружения эффектов, связанных с наличием длинноволновых флуктуаций. Во-вторых, как увидим далее, длинноволновые флуктуации могут существенно влиять на развитие определенного вида неустойчивостей, присущих размножающим средам. Последнее обстоятельство необходимо дополнительно учитывать при планировании экспериментальных или инженерных установок, использующих физические свойства таких сред. Отметим, что настоящая работа продолжает наши исследования динамики длинноволновых флуктуаций в подобного рода системах, начатые несколькими годами ранее. Нами были рассмотрены кинетический и гидродинамический этапы эволюции систем частиц, взаимодействующих с гидродинамическими средами без учета процессов их размножения и поглощения средой, [15]. Была исследована динамика неравновесных гидродинамических флуктуаций, возникающих в таких системах из-за случайности истинных начальных условий для параметров описания, рассмотрено влияние этих флуктуаций на процессы релаксации. Была также построена теория длинных гидродинамических хвостов [16]. Однако до сих пор отсутствуют исследования, связанные с учетом воздействия на такие системы внешней случайной силы, порождающей крупномасштабные флуктуации. Не учитывались также возможности поглощения и размножения частиц гидродинамическими средами. Решить ряд проблем, связанных с учетом обоих отмеченных обстоятельств, призвана настоящая наша статья. А именно целью настоящей работы является вывод общих уравнений флуктуационной динамики для систем частиц, взаимодействующих с мультиплицирующими и поглощающими гидродинамическими средами, под воздействием внешней стохастической силы. Одной из главных задач является анализ влияния гидродинамических корреляций на установление стационарных состояний и их устойчивость в исследуемой системе на основе полученных общих уравнений.

### УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ, ПОРОЖДЕННЫХ ВНЕШНЕЙ СЛУЧАЙНОЙ СИЛОЙ

Для решения заявленных во Введении задач прежде всего необходимо получить уравнения эволюции неравновесных флуктуаций. Для этого используем стохастический подход, основанный на усреднении по внешней случайной силе известных уравнений эволюции для параметров описания исследуемой системы.

Будем считать, что изучаемая система может быть описана набором параметров  $\zeta_a(\mathbf{x}, t)$  (здесь индекс "a" нумерует компоненты набора) которые удовлетворяют следующим уравнениям движения

$$\frac{\partial \hat{\zeta}_a(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = L_a(\mathbf{x}, \hat{\zeta}(\mathbf{x}', t)) + \hat{\Phi}_a(\mathbf{x}, t, \hat{\zeta}(\mathbf{x}, t)). \quad (1)$$

Последнее слагаемое  $\hat{\Phi}_a$  в уравнении (1) представляет собой случайную внешнюю силу, действующую на систему. Знак "^" над  $\hat{\Phi}_a$  и  $\hat{\zeta}_a$  подчеркивает случайный характер этих величин, обусловленный случайностью внешней силы. В процессе вывода уравнений мы будем пытаться сохранить максимальную общность, не конкретизируя сразу набор параметров описания системы. Отметим, что среди параметров описания могут быть такие гидродинамические величины как плотность массы системы, плотности отдельных ее компонентов, плотность импульса и плотность энергии. Внешние силы в приведенных уравнениях также следует понимать в обобщенном смысле. Это могут быть как механические силы, действующие на систему со стороны некоторого внешнего поля, так и приток в систему или отток из нее энергии и массы отдельных компонентов за счет процессов, выходящих за рамки гидродинамического описания. В качестве последних могут рассматриваться поглощение и излучения света компонентами системы, захват пролетающих через систему частиц (например нейтронов), или другие процессы, связанные с обменом массой, энергией и импульсом с окружающей средой.

Воздействие на систему внешней случайной силы поднимает вопрос об усреднении уравнений (1) по заданному распределению этой силы. В результате такого усреднения мы и получим общие уравнения динамики флуктуаций для изучаемой системы. Однако для проведения указанного усреднения необходимо конкретизировать зависимость шума  $\hat{\Phi}_a(\mathbf{x}, t, \hat{\zeta}(\mathbf{x}, t))$  от параметров описания системы  $\zeta_a(\mathbf{x}, t)$ . Явный вид такой зависимости может быть достаточно сложным. Наиболее просто такая зависимость выглядит в тех случаях, когда система подвержена воздействию мультипликативного или аддитивного шумов. Процедура усреднения уравнений эволюции при воздействии на систему мультипликативного шума подробно изложена в [10]. В настоящей работе мы рассмотрим другой простой случай, когда внешняя сила входит в уравнения аддитивным образом:

$$\Phi_a(\mathbf{x}, t, \hat{\zeta}(\mathbf{x}, t)) = \hat{Y}_a(\mathbf{x}, t). \quad (2)$$

С целью усреднения уравнений (1) по аддитивному шуму введем в рассмотрение величины

$$\zeta_{a_1, \dots, a_s}^S(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, t) = \langle \zeta_{a_1}(\mathbf{x}_1, t) \dots \zeta_{a_s}(\mathbf{x}_s, t) \rangle, \quad (3)$$

где скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по плотности вероятности  $W[\hat{Y}]$  внешней случайной силы  $\hat{Y}$ :

$$\langle \dots \rangle \equiv \int \dots W[\hat{Y}, \hat{Z}] D\hat{Y}. \quad (4)$$

Введем далее производящий функционал средних  $\zeta_{a_1, \dots, a_s}^S(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, t)$  формулой:

$$F(u_a, \zeta_a) = \langle \exp \int dx \hat{\zeta}_a(x, t) u_a(x) \rangle. \quad (5)$$

Средние величины порядка  $\zeta_{a_1, \dots, a_s}^S(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, t)$  могут быть получены  $s$ -кратным дифференцированием производящего функционала  $F(u_a, \zeta_a)$  по функциональному аргументу  $u_a(x)$ :

$$\zeta_{a_1, \dots, a_s}^S(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, t) = \frac{\delta^s F(u_a, \zeta_a)}{\delta u_{a_1}(\mathbf{x}_1) \dots \delta u_{a_s}(\mathbf{x}_s)} \Big|_{u_a(\mathbf{x})=0}. \quad (6)$$

Введем теперь производящий функционал  $\mathcal{G}(u, \xi)$  корреляционных функций  $\xi_{a_1, \dots, a_s}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t)$ :

$$\mathcal{G}(u, \xi) = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int d\mathbf{x}_1 \dots \int d\mathbf{x}_s u_{a_1}(\mathbf{x}_1) \dots u_{a_s}(\mathbf{x}_s) \xi_{a_1, \dots, a_s}^{(s)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t), \quad (7)$$

связанный с функционалом  $F$  выражениями:

$$F(u, \zeta) = \exp G(u, \zeta), \quad G(u, \zeta) = G_0(u, \zeta) + \mathcal{G}(u, \xi), \quad G_0(u, \zeta) \equiv \int d\mathbf{x} \zeta_a(\mathbf{x}; t) u_a(\mathbf{x}), \quad (8)$$

где  $\zeta_a(\mathbf{x}; t) \equiv \langle \hat{\zeta}_a(\mathbf{x}; t) \rangle$ . Заметим, что корреляционные функции, как и средние величины, определенные в (4), инвариантны относительно одновременной перестановки индексов и соответствующих им аргументов:

$$\zeta_{a_1, \dots, a_i, \dots, a_j, \dots, a_n}^S(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_n, t) = \zeta_{a_1, \dots, a_j, \dots, a_i, \dots, a_n}^S(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_n, t). \quad (9)$$

Корреляционные функции порядка  $s$  могут быть получены  $s$ -кратным дифференцированием производящего функционала  $\mathcal{G}(u_a, \zeta_a)$  по функциональному аргументу  $u_a(x)$  аналогично (10).

Легко показать, что любой функционал  $A(\hat{\zeta})$ , усредненный по внешней случайной силе в соответствии с

(4), может быть записан как функционал корреляционных функций  $A(\zeta, \xi^{(2)}, \xi^{(3)}, \dots)$  [7]:

$$\langle A(\hat{\zeta}) \rangle = \exp\left(\mathcal{G}\left(\frac{\delta}{\delta\zeta}, \xi\right)\right) A(\zeta). \quad (11)$$

Далее, дифференцируя выражение (5) и используя (1), приходим к следующему уравнению эволюции для производящего функционала:

$$\frac{\partial F(u, \zeta_a)}{\partial t} = \int d\mathbf{x} u_a(\mathbf{x}) \langle \exp(\int u \hat{\zeta}) \hat{Y}_a(\mathbf{x}) \rangle + \int d\mathbf{x} u_a(\mathbf{x}) \langle \exp(\int u \hat{\zeta}) L_a(\mathbf{x}, \hat{\zeta}(\mathbf{x}', t)) \rangle. \quad (12)$$

Для сокращения последующих выражений мы ввели обозначение  $\exp(\int u \hat{\zeta}) = \exp(\int dy u_a(\mathbf{y}) \zeta_a(\mathbf{y}; t))$ . Первое слагаемое в выражении (12) учитывает действие внешней силы на систему, а второй член описывает процессы эволюции внутри системы. Чтобы получить замкнутое уравнение эволюции для производящего функционала, необходимо выразить оба слагаемых в этом уравнении через производящий функционал. После простых, но громоздких преобразований с учетом формул (8) для второго члена в (12) получим выражение:

$$\langle \exp(\int u \hat{\zeta}) L_a(\mathbf{x}, \hat{\zeta}(\mathbf{x}', t)) \rangle = \exp(G_0(u; \zeta)) \exp\left(\mathcal{G}\left(u + \frac{\delta}{\delta\zeta}; \xi\right)\right) L_a(\zeta). \quad (13)$$

Преобразование же первого члена в правой части (12) оказывается более сложным, поскольку приходится найти способ выразить величину  $\langle \exp(\int u \hat{\zeta}) \hat{Y}_a(\mathbf{x}) \rangle$  через функционал  $F(u, \zeta_a)$ . Для этого необходимо воспользоваться формулой Фуруцу - Новикова, доказанной в работе [17] для гауссового распределения случайных внешних полей. Эту формулу можно обобщить на случай произвольных случайных внешних полей (но таких, которые имеют моменты любого порядка, см. в этой связи [10]).

При проведении дальнейших вычислений нами вводились некоторые ограничения на характер случайной внешней силы, а именно, шум считался гауссовым. Более того, предполагалось, что парную корреляционную функцию внешней случайной силы можно представить в виде:

$$b_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t_1, t_2) = b_{ab}\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \frac{t_1 + t_2}{2}\right) g(t_1 - t_2), \quad (14)$$

где функция  $g(t_1 - t_2)$  считается четной относительно перестановки величин  $t_1, t_2$ ,  $g(t_1 - t_2) = g(t_2 - t_1)$ , и отличной от нуля только в интервале  $|t_1 - t_2| < \tau_0$ , где  $\tau_0$  — память случайного процесса. Будем далее также считать, что  $\tau_0 \rightarrow 0$  и потребуем, чтобы выполнялось условие  $\int_{-\infty}^{\infty} g(t) dt = 1$ , вследствие чего корреляционная функция  $g$  может рассматриваться как несколько размытая дельта функция. В терминах введенных определений величину  $\langle \exp(\int u \hat{\zeta}) \hat{Y}_a(\mathbf{x}) \rangle$ , следуя методике работы [10], можно представить в виде:

$$\langle \exp(\int u \hat{\zeta}) \hat{Y}_a(\mathbf{x}) \rangle = Y_a(\mathbf{x}, t) F(u, \zeta) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}' u_b(\mathbf{x}) b_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) F(u, \zeta). \quad (15)$$

Далее несложные преобразования уравнений (1) и (12) позволяют прийти к общим нелинейным уравнениям движения для параметров описания системы и производящего функционала корреляционных функций:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta_a(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \exp\left(\mathcal{G}\left(\frac{\delta}{\delta\zeta}; \xi\right)\right) L_a(\mathbf{x}, \hat{\zeta}(\mathbf{x}', t)) + Y_a(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}(u, \zeta) &= \left\{ \exp\left[\mathcal{G}\left(u + \frac{\delta}{\delta\zeta}; \xi\right) - \mathcal{G}(u; \xi)\right] - \exp\left[\mathcal{G}\left(\frac{\delta}{\delta\zeta}; \xi\right)\right] \right\} \int d\mathbf{x} u_a(\mathbf{x}) L_a(\mathbf{x}; \zeta) + \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'' u_a(\mathbf{x}') u_b(\mathbf{x}'') b_{ab}(\mathbf{x}', \mathbf{x}''; t) F(u, \zeta). \end{aligned} \quad (16)$$

Из уравнения движения (16) для производящего функционала легко получить уравнение динамики для корреляционных функций произвольного порядка  $s$  путем  $s$ -кратной вариацией его по  $u_a(\mathbf{x})$  с последующей

заменой  $u_a(\mathbf{x}) = 0$ . Так, для парных корреляций уравнение эволюции имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)}{\partial t} &= e^{g\left(\frac{\delta}{\delta \zeta_c; \xi}\right)} \int d\mathbf{x}' \xi_{ac}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}', t) \frac{\delta L_b(\mathbf{x}_2; \zeta)}{\delta \zeta_c(\mathbf{x}')} + e^{g\left(\frac{\delta}{\delta \zeta_c; \xi}\right)} \int d\mathbf{x}' \xi_{bc}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}', t) \frac{\delta L_a(\mathbf{x}_1; \zeta)}{\delta \zeta_c(\mathbf{x}')} + \\ &+ e^{g\left(\frac{\delta}{\delta \zeta_c; \xi}\right)} \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int d\mathbf{x}'_1 \dots d\mathbf{x}'_s \xi_{ac_1 \dots c_s}^{(s+1)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}'_1 \dots \mathbf{x}'_s, t) \frac{\delta^s L_b(\mathbf{x}_2; \zeta)}{\delta \zeta_{c_1}(\mathbf{x}'_1) \dots \delta \zeta_{c_s}(\mathbf{x}'_s)} + \\ &+ e^{g\left(\frac{\delta}{\delta \zeta_c; \xi}\right)} \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{s!} \int d\mathbf{x}'_1 \dots d\mathbf{x}'_s \xi_{bc_1 \dots c_s}^{(s+1)}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_1 \dots \mathbf{x}'_s, t) \frac{\delta^s L_a(\mathbf{x}_1; \zeta)}{\delta \zeta_{c_1}(\mathbf{x}'_1) \dots \delta \zeta_{c_s}(\mathbf{x}'_s)} + b_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t). \end{aligned} \quad (17)$$

Отметим, что правая часть уравнения содержит корреляционную функцию внешней силы  $b_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ . Следовательно, зарождение парных корреляций параметров описания может быть обусловлено непосредственно воздействием внешней силы. Выписать уравнения динамики корреляционных функций более высоких порядков, чем второй, принципиальных трудностей не составляет. Мы не будем их здесь выписывать из-за громоздкости. Отметим лишь то обстоятельство, что как следует из (16), уравнения эволюции для корреляционных функций параметров описания системы корреляционной функции внешней силы не содержат. Они содержат только нелинейные слагаемые, образованные корреляционными функциями второго и более высокого порядков. Следовательно, корреляционные функции порядков выше второго под воздействием внешней силы могут зарождаться лишь нелинейным образом через парные корреляции. Последнее обстоятельство позволяет в случае малых корреляций ограничиться рассмотрением динамики только парных корреляционных функций. Для этого достаточно использовать линейризованное уравнения их эволюции на начальных этапах эволюции этих флуктуаций. Такое уравнение может быть легко получено из (18) пренебрежением корреляционными функциями более высокого порядка, чем второй:

$$\frac{\partial \xi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)}{\partial t} = \int d\mathbf{x}' \xi_{ac}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}', t) \frac{\delta L_b(\mathbf{x}_2; \zeta)}{\delta \zeta_c(\mathbf{x}')} + \int d\mathbf{x}' \xi_{bc}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}', t) \frac{\delta L_a(\mathbf{x}_1; \zeta)}{\delta \zeta_c(\mathbf{x}')} + b_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t). \quad (18)$$

Отметим, что изложенная выше ситуация является следствием воздействия на систему аддитивного шума. В случае мультипликативного шума ситуация с зарождением корреляций более высокого порядка чем второй совершенно иная, в чем можно убедиться из [10].

### ВЛИЯНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НА УСТОЙЧИВОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ ЧАСТИЦ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ГИДРОДИНАМИЧЕСКИМИ СРЕДАМИ

В настоящем разделе мы рассмотрим с достаточно общих позиций некоторые вопросы, связанные с влиянием длинноволновых флуктуаций на устойчивость стационарных состояний и развитие неустойчивостей при воздействии стохастического внешнего поля на систему частиц, взаимодействующих с гидродинамическими средами.

Предположим, что существует такой набор не зависящих от времени значений параметров описания системы  $\zeta_a^0(\mathbf{x})$  и значений внешних сил  $Y_a^0(\mathbf{x})$ , которые удовлетворяют уравнению движения (1)

$$0 = \mathcal{L}_a(\mathbf{x}; \zeta_b^0(\mathbf{x})) + Y_a^0(\mathbf{x}). \quad (19)$$

Состояние, описываемое таким набором параметров, мы будем называть стационарным состоянием системы. Однако наличие формального стационарного решения уравнений динамики системы, как известно, еще не гарантирует реализации такого состояния в процессе эволюции системы. Существуют два аспекта возможности реализации стационарных состояний в некоторой физической системе. Один из них связан с приведением системы к стационарному состоянию, а второй — с устойчивостью системы в стационарном состоянии. На самом деле, эти аспекты связаны между собой, ибо если стационарное состояние устойчиво, то система может прийти к нему сама за счет диссипативных процессов. По этой причине в настоящей статье мы будем в основном касаться вопроса устойчивости стационарных состояний.

Вблизи стационарного состояния (19) параметры описания системы и внешние силы могут быть представлены в виде:

$$\zeta_a(\mathbf{x}, t) = \zeta_a^0(\mathbf{x}) + \delta \zeta_a(\mathbf{x}, t), \quad Y_a(\mathbf{x}, t) = Y_a^0(\mathbf{x}) + \delta Y_a(\mathbf{x}, t). \quad (20)$$

Формулы (20) позволяют линейризовать уравнения динамики системы (16), (19) по отклонениям параметров описания и внешней случайной силы от их стационарных значений. В результате получим линейризованные уравнения гидродинамики для параметров описания и их парных корреляционных функций:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta \zeta_a(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \int d\mathbf{x}' T_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta \zeta_b(\mathbf{x}') + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'' T_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'') \xi_{bc}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + \delta Y_a(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial \xi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)}{\partial t} &= \int d\mathbf{x}' \xi_{ac}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}', t) T_{bc}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}') + \int d\mathbf{x}' \xi_{bc}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}', t) T_{ac}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}') + g_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t), \end{aligned} \quad (21)$$

где введены следующие обозначения:

$$T_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \left. \frac{\delta L_a(\mathbf{x}; \zeta)}{\delta \zeta_b(\mathbf{x}')} \right|_{\zeta = \zeta^0}, \quad T_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'') \equiv \left. \frac{\delta^2 L_a(\mathbf{x}; \zeta)}{\delta \zeta_b(\mathbf{x}') \delta \zeta_c(\mathbf{x}'')} \right|_{\zeta = \zeta^0}. \quad (22)$$

Здесь необходимо сделать следующую оговорку. Выписанные уравнения учитывают эволюцию только парных корреляционных функций параметров описания системы. Данное приближение оправдывается приведенными несколько выше рассуждениями о том, что случайная сила порождает линейным образом только парные корреляции. В соответствии с этим, парные корреляции порождаются внешней силой непосредственно, а возникновение корреляций более высоких порядков обусловлено лишь взаимодействием парных корреляционных функций нелинейным образом. Благодаря этому можно полагать, что в состояниях, близких к стационарным, корреляции более высокого порядка будут развиваться очень медленно, в связи с чем их влиянием на динамику системы можно пренебречь. Необходимо отметить, что такое приближение, естественно, может оставаться справедливым только конечное время, определяющееся развитием корреляционных функций более высокого порядка за счет указанных выше нелинейных эффектов. Тем не менее, предлагаемая нами к рассмотрению задача вполне может иметь смысл. Например, в том случае, если время установления стационарного состояния (19) или время развития неустойчивостей за счет "линейных" эффектов намного меньше времени развития корреляционных функций параметров описания системы большего порядка, чем второй.

Отметим некоторые особенности уравнений (21). А именно заметим, что как собственная эволюция корреляционных функций, так и собственная эволюция отклонений гидродинамических параметров от равновесных значений определяется одной и той же величиной  $T_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ . Влияние корреляций на эволюцию гидродинамических величин определяется величиной  $T_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'')$ .

В дальнейшем в этой работе мы будем рассматривать в основном динамику системы в состояниях, близких к пространственно однородным. Для этого формально введем определения пространственно однородных состояний как состояний, инвариантных относительно преобразований трансляции, то есть пространственного переноса на постоянную величину:

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{R}, \quad \mathbf{R} = const. \quad (23)$$

Напомним, что для величин, зависящих от одной пространственной координаты  $A(\mathbf{x})$ , таких, например, как гидродинамические параметры системы и внешние силы, пространственная однородность означает, что они вовсе не зависят от координат. Величины же, зависящие от двух координат  $B_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ , такие как парные корреляционные функции параметров описания системы и внешних сил, в пространственно однородном случае будут зависеть только от разности своих аргументов,

$$B_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = B_{ab}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t). \quad (24)$$

В этой связи отметим, что реальные физические системы имеют конечный размер, поэтому формально не могут быть полностью пространственно однородными. По этой причине для реальных систем понятие пространственной однородности следует трактовать несколько по-другому. Мы будем считать систему пространственно однородной, если внутри системы вдали от границ параметры ее описания инвариантны относительно переноса на расстояния, не превосходящие некоего пространственного масштаба  $L_h$ ,  $|\mathbf{R}| \leq L_h$ , такого, что этот масштаб мал по сравнению с размером системы  $L$ ,  $L_h \ll L$ . В соответствии с изложенным в дальнейшем будем считать, что равновесное состояние  $\zeta_a^0$  и соответствующие ему силы  $Y_a^0$  в рассматриваемой нами области пространственно однородны, а корреляционные функции внешних сил и параметров описания зависят от разности своих координат.

Рассмотрим предварительно некоторые особенности вклада корреляций в эволюцию параметров описания системы, определяемого вторым членом первого уравнения системы (21). Как видно из уравнений, этот вклад характеризуется величиной

$$\delta \dot{\zeta}_a^{(cor)}(\mathbf{x}, t) \sim \frac{1}{2} \int \left. \frac{\delta^2 L_a(\mathbf{x}; \zeta)}{\delta \zeta_b(\mathbf{x}') \delta \zeta_c(\mathbf{x}'')} \right|_{\zeta = \zeta^0} \xi_{bc}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t). \quad (25)$$

Для вычисления этой величины необходимо знать явный вид уравнений эволюции системы, а именно величину  $L_a(\mathbf{x}; \zeta)$ . Конкретный вид уравнений эволюции может существенно отличаться в зависимости от рассматриваемой системы, однако существуют и некоторые общие закономерности. Так, если параметрами описания системы являются плотности аддитивных интегралов движения, такие, например, как плотности компонентов системы, плотность импульса и плотность энергии, то величины  $L_a(\mathbf{x}; \zeta)$  будут иметь градиентный вид

$$L_a(\mathbf{x}; \zeta) = \frac{\partial \zeta_{ak}(\mathbf{x}, \zeta)}{\partial x_k}. \quad (26)$$

Последний факт представляется очевидным, однако он строго следует из законов сохранения при выводе уравнений гидродинамики. В этом случае величины  $\zeta_{ak}(\mathbf{x}, \zeta)$  представляют собой плотности потоков соответствующих интегралов движения. Микроскопический вывод и свойства общих уравнений динамики многокомпонентной жидкости рассмотрены в книге [9]. Заметим, однако, что величины  $L_a(\mathbf{x}; \zeta)$  могут иметь и неградиентные слагаемые. Такие ситуации могут возникать при необходимости учета при описании, например, немеханических процессов, связанных с химическими или ядерными реакциями между компонентами системы, и сопутствующими им выделением энергии и изменением числа частиц. В случае же справедливости выражения (26) из уравнения (25) следует, что вклад корреляций в эволюцию параметров описания за счет градиентных членов в пространственно однородном случае равен нулю:

$$\delta \zeta_a^{(cor)}(\mathbf{x}, t) \sim \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \int \frac{\delta^2 \zeta_{ak}(\mathbf{x}, \zeta)}{\delta \zeta_b(\mathbf{x}') \delta \zeta_c(\mathbf{x}'')} \Big|_{\zeta=\zeta^0} \xi_{bc}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'', t) = 0. \quad (27)$$

Таким образом, мы получили важный результат - в пространственно однородном случае только неградиентные члены уравнений эволюции могут обеспечивать вклад корреляций в эволюцию параметров описания системы.

Вернемся к изучению уравнений эволюции (21) для корреляционных функций и отклонений параметров описания от их стационарных значений. В дальнейших вычислениях используем преобразования Фурье по координатам в соответствии с формулами:

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int d^3 q \exp(i\mathbf{q}\mathbf{x}) \phi(\mathbf{q}, t); \quad \phi(\mathbf{q}, t) = (2\pi)^{-3} \int d^3 q \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}, t), \quad (28)$$

где  $\phi$  — некая произвольная функция координаты  $x$ .

Чтобы перейти к фурье-образам в уравнениях (21), как легко видеть, необходимо уточнить вид величин  $L_a(\mathbf{x}, \zeta(\mathbf{x}', t))$ , определяющих эволюцию системы на изучаемом этапе. Конкретизация этих величин на данном этапе решения задачи понадобится минимальная. Во-первых, будем считать, что связь  $L_a(\mathbf{x}, \zeta(\mathbf{x}', t))$  с параметрами описания  $\zeta(\mathbf{x}', t)$  локальна, во-вторых, ограничимся рассмотрением разложения величины  $L_a(\mathbf{x}, \zeta(\mathbf{x}', t))$  до второго порядка по пространственным градиентам величин  $\zeta(\mathbf{x}, t)$ , как это имеет место в уравнениях обычной гидродинамики. Такие упрощения позволяют интегральные слагаемые в (21), содержащие величины  $T_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  и  $T_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'')$ , схематически представить в терминах линейных дифференциальных операторов  $\hat{T}_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  и  $\hat{T}_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'')$ :

$$\begin{aligned} \hat{T}_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \dots &= \int d\mathbf{x}' T_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \dots = \left( T_{ab}^{(0)}(\mathbf{x}) + T_{ab;i}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x'_i} + T_{ab;ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x'_j} \right) \Big|_{\mathbf{x}'=\mathbf{x}} \dots, \\ \hat{T}_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'') \dots &= \int d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'' T_{abc}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'') \dots = \left( T_{abc}^{(0)}(\mathbf{x}) + T_{abc;i}^{(1)}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x'_i} + T_{abc;i}^{(2)}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x'_i} + T_{abc;ij}^{(1)}(\mathbf{x}) \frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x'_j} + \right. \\ &\quad \left. + T_{abc;ij}^{(2)}(\mathbf{x}) \frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x'_j} + T_{abc;ij}^{(3)}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x'_i} \frac{\partial}{\partial x''_j} \right) \dots \Big|_{\mathbf{x}'=\mathbf{x}''=\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (29)$$

В последних выражениях явный вид величин  $T_{ab}^{(0)}(\mathbf{x})$ ,  $T_{ab;i}(\mathbf{x})$ ,  $T_{ab;ij}(\mathbf{x})$ ,  $T_{abc}^{(0)}(\mathbf{x})$ ,  $T_{abc;i}(\mathbf{x})$  и  $T_{abc;ij}(\mathbf{x})$  без особого труда может быть вычислен из (22), если известен явный вид  $L_a(\mathbf{x}, \zeta(\mathbf{x}', t))$ .

С учетом последних формул после элементарных преобразований придем к следующим уравнениям для фурье-образов отклонения параметров описания  $\delta \zeta_a(\mathbf{q}, t)$  от стационарных значений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta \zeta_a(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = & \int d\mathbf{k} \delta \zeta_b(\mathbf{k}, t) \frac{1}{(2\pi)^3} \left[ ik_i T_{ab;i}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) - k_i k_j T_{ab;j}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \right] + \delta Y_a(\mathbf{q}, t) + \frac{1}{2(2\pi)^6} \times \\ & \times \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \xi_{bc}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, t) \left\{ T_{abc}^{(0)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) + ik_{1i} T_{abc;i}^{(1)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) + ik_{2i} T_{abc;i}^{(2)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) - \right. \\ & \left. - k_{1i} k_{1j} T_{abc;j}^{(1)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) - k_{2i} k_{2j} T_{abc;j}^{(2)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) - k_{1i} k_{2j} T_{abc;j}^{(3)}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \right\}, \end{aligned} \quad (30)$$

и фурье-образов корреляционных функций  $\zeta_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t)}{\partial t} = & \int d\mathbf{k} \xi_{ac}(\mathbf{q}_1, \mathbf{k}, t) \frac{1}{(2\pi)^3} \left[ T_{bc;0}(\mathbf{q}_2 - \mathbf{k}) + ik_i T_{bc;i}(\mathbf{q}_2 - \mathbf{k}) - k_i k_j T_{bc;j}(\mathbf{q}_2 - \mathbf{k}) \right] + \\ & + \int d\mathbf{k} \xi_{bc}(\mathbf{q}_2, \mathbf{k}, t) \frac{1}{(2\pi)^3} \left[ T_{ac;0}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}) + ik_i T_{ac;i}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}) - k_i k_j T_{ac;j}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}) \right] + g_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t) \end{aligned} \quad (31)$$

В последних выражениях функции  $T_{ab;\dots}(\mathbf{q})$  и  $T_{ab;\dots}(\mathbf{q})$  являются Фурье-образами соответствующих функций координат, а верхние индексы 1, 2 и 3 в величинах  $T_{abc;j}^{(n)}$  и  $T_{abc;j}^{(n)}$  соответствуют нумерации, данной в определениях (29).

Отметим, что полученные уравнения справедливы для любых равновесных состояний  $\zeta_a^0(\mathbf{x})$  (см. (19)), удовлетворяющих уравнениям эволюции для параметров описания системы системы, в том числе и пространственно неоднородных.

Полученная система уравнений (30), (31) может быть использована для решения различных задач, связанных с влиянием длинноволновых флуктуаций на устойчивость системы. В отдельных важных случаях эта система допускает дальнейшее значительное упрощение. В частности, в случае пространственно однородных стационарных значений  $\zeta^0$  величины  $T_{ab;i}(\mathbf{x})$ ,  $T_{ab;j}(\mathbf{x})$ ,  $T_{abc;i}(\mathbf{x})$  и  $T_{abc;j}(\mathbf{x})$  не зависят от координат, а их Фурье-образы будут пропорциональны дельта-функции от  $\mathbf{q}$ :

$$T_{ab;\dots}(\mathbf{q}) = \delta(\mathbf{q}) T_{ab;\dots}^{(H)}, \quad T_{abc;\dots}(\mathbf{q}) = \delta(\mathbf{q}) T_{abc;\dots}^{(H)}. \quad (32)$$

Индекс  $(H)$  в последних выражениях и указывает на то обстоятельство, что мы имеем дело с пространственно однородным случаем.

Для упрощения дальнейших выкладок введем обозначения:

$$T_{ab}^{(H)}(\mathbf{k}) = T_{ab}^{(0)(H)} + ik_i T_{ab;i}^{(H)} - k_i k_j T_{ab;j}^{(H)}, \quad (33)$$

в терминах которых уравнение эволюции для корреляций (31) в случае пространственно однородного стационарного состояния примет вид:

$$\frac{\partial \xi_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t)}{\partial t} = \xi_{ac}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t) T_{bc}^{(H)}(\mathbf{q}_2) + \xi_{bc}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t) T_{ac}^{(H)}(\mathbf{q}_1) + g_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t). \quad (34)$$

Учтем далее, что в пространственно однородном случае величины  $g_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$  и  $\xi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$  зависят от разности своих координат

$$\xi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \xi_{ab}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t), \quad g_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = g_{ab}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \quad (35)$$

вследствие чего их Фурье-образы удовлетворяют соотношениям:

$$g_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) g_{ab}(\mathbf{q}_1, t), \quad \xi_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \xi_{ab}(\mathbf{q}_1, t). \quad (36)$$

С учетом (33), (36) уравнения (35) еще упрощаются:

$$\frac{\partial \xi_{ab}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \xi_{ac}(\mathbf{q}, t) T_{bc}^{(H)}(-\mathbf{q}) + \xi_{bc}(-\mathbf{q}, t) T_{ac}^{(H)}(\mathbf{q}) + g_{ab}(\mathbf{q}, t). \quad (37)$$

Отметим, что формальное решение уравнения (34) после несложных преобразований можно записать в виде:

$$\xi_{ab}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, t) = \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)T_{ac}^{(H)}(\mathbf{q}_1)} e^{(t-\tau)T_{bd}^{(H)}(\mathbf{q}_2)} g_{cd}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \tau) + e^{iT_{ac}^{(H)}(\mathbf{q}_1)} e^{iT_{bd}^{(H)}(\mathbf{q}_2)} \xi_{cd}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, 0), \quad (38)$$

где  $\xi_{cd}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, 0)$  — начальные значения парных корреляционных функций параметров описания, или, с использованием (36):

$$\xi_{ab}(\mathbf{q}, t) = \int_0^t d\tau e^{(t-\tau)T_{ac}^{(H)}(\mathbf{q})} e^{(t-\tau)T_{bd}^{(H)}(-\mathbf{q})} g_{cd}(\mathbf{q}, \tau) + e^{iT_{ac}^{(H)}(\mathbf{q})} e^{iT_{bd}^{(H)}(-\mathbf{q})} \xi_{cd}(\mathbf{q}, 0). \quad (39)$$

Для дальнейшего продвижения в вычислениях удобно найти собственные векторы  $V_a^{(\mu)}(\mathbf{q})$  и собственные значения  $\lambda^{(\mu)}(\mathbf{q})$  матрицы эволюции  $T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})$ , решая уравнение:

$$T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})V_b^{(\mu)}(\mathbf{q}) = \lambda^{(\mu)}(\mathbf{q})V_a^{(\mu)}(\mathbf{q}). \quad (40)$$

где индекс  $\mu$  нумерует весь набор возможных собственных векторов. Используя собственные векторы матрицы эволюции и соотношение

$$e^{iT_{ac}^{(H)}(\mathbf{q})} = \sum_{\mu} e^{i\lambda^{(\mu)}(\mathbf{q})} V_a^{(\mu)}(\mathbf{q}) P_a^{(\mu)}(\mathbf{q}), \quad (41)$$

в котором величина  $P_a^{(\mu)}(\mathbf{q})$  представляет собой оператор-проектор на подпространство векторов  $V_a^{(\mu)}(\mathbf{q})$ , можно построить решение уравнения эволюции для корреляционных функций с начальными условиями при  $t = 0$ :

$$\begin{aligned} \xi_{ab}(\mathbf{q}, t) = & \sum_{\mu} \sum_{\nu} \left[ 1 - e^{i(\lambda^{(\mu)}(\mathbf{q}) + \lambda^{(\nu)}(-\mathbf{q}))t} \right] \left[ \lambda^{(\mu)}(\mathbf{q}) + \lambda^{(\nu)}(-\mathbf{q}) \right]^{-1} V_a^{(\mu)}(\mathbf{q}) P_c^{(\mu)}(-\mathbf{q}) V_b^{(\nu)}(\mathbf{q}) P_d^{(\nu)}(-\mathbf{q}) g_{cd}(\mathbf{q}) + \\ & + \sum_{\mu} \sum_{\nu} e^{i(\lambda^{(\mu)}(\mathbf{q}) + \lambda^{(\nu)}(-\mathbf{q}))t} V_a^{(\mu)}(\mathbf{q}) P_c^{(\mu)}(-\mathbf{q}) V_b^{(\nu)}(\mathbf{q}) P_d^{(\nu)}(-\mathbf{q}) \xi_{cd}(\mathbf{q}, 0). \end{aligned} \quad (42)$$

Первый член в полученном выражении описывает развитие корреляций под воздействием внешней силы, второй член характеризует собственную эволюцию корреляций и полностью соответствует результатам, полученным нами ранее для задачи с эффективными начальными условиями, см. в этой связи [16]. Обратим внимание, что в решении (42) мы ограничились рассмотрением стационарной внешней силы, считая величину  $g_{cd}(\mathbf{q}, t)$  не зависящей от времени при  $t > 0$ .

Найденное решение (42) позволяет получить уравнение эволюции для параметров описания системы с учетом вклада в него динамики парных корреляций:

$$\frac{\partial \delta \zeta_a^c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{T}_{ab}^{(H)}(\mathbf{x}, t) \delta \zeta_b^c(\mathbf{x}, t) + \delta Y_a^c(\mathbf{x}, t) + X_a^{(corr)}(t). \quad (43)$$

Выписывая это уравнение, мы снова вернулись к координатной записи, подразумевая выполнение обратных преобразований Фурье. Оператор  $\hat{T}_{ab}^{(H)}(\mathbf{x}, t)$  представляет собой обратный Фурье-образ матрицы эволюции (33).

Последний член в правой части уравнения (43) и учитывает вклад корреляций в динамику параметров описания:

$$X_a^{(corr)}(t) = T_{abc}^{(0)} \int d^3 q \xi_{bc}^a(\mathbf{q}, t), \quad (44)$$

где схематическое определение величины  $T_{abc}^{(0)}$  см. в (29). Напомним, что как отмечалось выше, в пространственно однородном случае вклад корреляций в динамику параметров описания определяется только неградиентными слагаемыми в матрице эволюции  $\hat{T}_{ab}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , характеризуемыми величиной  $T_{abc}^{(0)}$ , что и нашло свое отражение в формуле (44).

Как видно из выражений (42)-(44), слагаемое  $X_a^{(corr)}(t)$  не только определяет вклад корреляций в динамику параметров описания, но и характеризует устойчивость самой системы. Причем устойчивость системы полностью определяется спектром матрицы эволюции  $T_{ac}^{(H)}(\mathbf{q})$ . Таким образом, если гидродинамическая матрица эволюции имеет собственные значения, удовлетворяющих соотношению  $\text{Re}(\lambda^{\sigma}(\mathbf{q})) < 0$  для всех  $\mathbf{q}$ , изучаемая система будет устойчивой, развитие корреляций под воздействием внешней силы достигнет некоторого стационарного предела, отклонения от равновесных состояний тоже достигнут равновесного значения, которое можно найти из уравнений (43). Тем самым наличие корреляций в системе будет эквивалентно воздействию некоторой постоянной пространственно однородной внешней силы, немного смещающей положение равновесия в системе. В случае же наличия собственных значений с  $\text{Re}(\lambda^{\sigma}(\mathbf{q})) > 0$  для всех  $\mathbf{q}$ , корреляции и отклонение от равновесного значения гидродинамических параметров будут нарастать. Кроме того, уже из общего выражения (39) видно, что в случае наличия неустойчивостей в системе, корреляции внешней силы служат лишь начальным толчком к развитию корреляций параметров описания в системе. То есть, если даже выйти за рамки описанных выше предположений и считать, что корреляции внешней силы будут существовать некоторое достаточно малое время, а потом снова обратятся в нуль, в неустойчивой системе корреляционные функции будут и дальше нарастать. Отметим также, что решение для корреляционных функций (42) содержит сумму двух собственных значений в показателе экспоненты, поэтому возможны ситуации, когда неустойчивость, обусловленная вкладом корреляций в динамику параметров описания будет превалировать над неустойчивостью, связанной с наличием в уравнениях эволюции параметров описания неградиентных слагаемых, о чем говорилось выше. Этот вопрос рассмотрен подробнее в следующем разделе.

## УСТОЙЧИВОСТЬ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С РАЗМНОЖАЮЩИМИ И ПОГЛОЩАЮЩИМИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИМИ СРЕДАМИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВНЕШНЕГО СТОХАСТИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В качестве приложения построенной в предыдущих разделах общей теории изучим вклад корреляционных функций параметров описания в динамику частиц, взаимодействующих с мультиплицирующими и поглощающими гидродинамическими средами, находящимися под воздействием внешнего стохастического поля. Как нами уже отмечалось, такая система может служить моделью для системы, распространяющихся в гидродинамической среде, в том числе и в размножающей [18-21]. Мы рассмотрим наиболее простой модельный случай, предполагающий малую плотность числа частиц, взаимодействующих со средой. Сама гидродинамическая среда в нашей модели будет считаться однородной по составу, даже однокомпонентной для упрощения выкладок и наглядности результатов. Заметим, что такое предположение является упрощением, поскольку процесс захвата и размножения частиц, взаимодействующих со средой, должен сопровождаться процессами превращения частиц среды из одного сорта в другой. Однако предположение о малой плотности частиц, взаимодействующих со средой, позволяет нам считать изменения состава самой среды пренебрежимо малыми, по крайней мере, на некотором ограниченном масштабе времени.

В качестве параметров описания системы выберем плотность энергии среды  $\zeta_0(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t)u^2(\mathbf{x}, t)/2$ , плотность импульса среды  $\zeta_i(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)u_i(\mathbf{x}, t)$ , плотность массы среды  $\zeta_4(\mathbf{x}, t) \equiv \rho(\mathbf{x}, t)$  и плотность числа частиц  $\zeta_5(\mathbf{x}, t) \equiv n(\mathbf{x}, t)$ , взаимодействующих со средой (встречающаяся в этих формулах величина  $u_i(\mathbf{x}, t)$  представляет собой среднюю скорость частиц гидродинамической среды).

Уравнения динамики для системы мы выпишем в полуфеноменологическом подходе. За основу мы возьмем уравнения динамики частиц, взаимодействующих с гидродинамической средой без поглощения и размножения частиц средой, полученные в микроскопическом подходе в работах [15,16] в рамках развитого там метода сокращенного описания (см. в этой связи также [9]). В эти уравнения будут добавлены члены, описывающие процессы захвата и размножения частиц, давно используемые в феноменологических теориях (см., например, [20,21]), а также включена внешняя случайная сила, действующая на компоненты системы.

С учетом сказанного уравнения эволюции для параметров системы можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta_0(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{0k}^{(0)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{0k}^{(1)}(\mathbf{x}, t) + En + Y_0(\mathbf{x}, t), & \frac{\partial \zeta_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{ik}^{(0)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{ik}^{(1)}(\mathbf{x}, t) + Y_i(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial \zeta_4(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{4k}^{(0)}(\mathbf{x}, t), & \frac{\partial \zeta_5(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{5k}^{(0)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial x_k} \zeta_{5k}^{(1)}(\mathbf{x}, t) + KN + Y_5(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (45)$$

где величины  $\zeta_{ak}^{(0)}(\mathbf{x}, t)$  представляют собой бездиссипативные потоки:

$$\begin{aligned} \zeta_{0k}^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= p(\mathbf{x}, t)u_k(\mathbf{x}, t) + n(\mathbf{x}, t)T(\mathbf{x}, t)u_k(\mathbf{x}, t) + \zeta_0(\mathbf{x}, t)u_k(\mathbf{x}, t), \\ \zeta_{ik}^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= p(\mathbf{x}, t)\delta_{ik} + n(\mathbf{x}, t)T(\mathbf{x}, t)\delta_{ik} + \rho(\mathbf{x}, t)u_i(\mathbf{x}, t)u_k(\mathbf{x}, t), \\ \zeta_{4k}^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= \zeta_k(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)u_k(\mathbf{x}, t), & \zeta_{5k}^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= n(\mathbf{x}, t)u_k(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (46)$$

а величины  $\zeta_{ak}^{(1)}(\mathbf{x}, t)$  являются диссипативными потоками:

$$\begin{aligned} \zeta_{0k}^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= u_i(\mathbf{x}, t)t_{ik}^{(1)}(\mathbf{x}, t) - \kappa \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial x_k}, \\ \zeta_{ik}^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= t_{ik}^{(1)}(\mathbf{x}, t) = -\eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) - \zeta \delta_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_j}, \\ \zeta_{4k}^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= 0, & \zeta_{5k}^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= -D_{eff} \frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad (47)$$

и  $Y_a(\mathbf{x}, t)$  - обобщенные в оговоренном выше смысле внешние случайные силы, действующие на систему. Величина в приведенных выше выражениях  $p(\mathbf{x}, t)$  представляет собой давление среды, а  $T(\mathbf{x}, t)$  - температуру среды. Параметр  $K$  описывает общий рост (когда  $K > 0$ ) или уменьшение (когда  $K < 0$ ) плотности частиц (иногда будем их называть также нейтронами), обусловленное размножением и поглощением их средой, а величина  $E$  описывает нагрев системы за счет выделения энергии при размножении и поглощении частиц ([18-21]). На эти величины стоит обратить особое внимание потому, что они входят в уравнения не градиентным образом. Выше уже отмечалась особая роль таких слагаемых в динамике параметров описания системы. Сделаем также следующую оговорку. Введенная нами плотность энергии гидродинамической среды  $\zeta_0(\mathbf{x}, t)$  учитывает только плотность ее внутренней (тепловой) энергии  $\varepsilon_0(\mathbf{x}, t)$  и кинетической энергии, и не учитывает энергию связи частиц (нейтронов) с частицами среды. Поэтому процессы поглощения и размножения

частиц, взаимодействующих с гидродинамической средой, сопровождаются переходом энергии связи в тепловую энергию среды, что отражается в уравнениях появлением неградиентных членов. Отметим также, что мы выписали уравнения в упрощенном виде, пренебрегая некоторыми слабыми эффектами, такими, например, как термодиффузия частиц. Величина  $D_{eff}$  представляет собой эффективный коэффициент диффузии частиц в гидродинамической среде. В работе [15] было показано, что наличие частиц, взаимодействующих со средой, порождает новые механизмы переноса импульса и тепла в системе и приводит к появлению поправок к кинетическим коэффициентам первой и второй вязкости  $\eta$  и  $\zeta_{visc}$ , а также теплопроводность  $\kappa$ , пропорциональных плотности нейтронов. По этой причине в настоящей работе предполагается, что все кинетические коэффициенты уже содержат эти поправки.

Особое внимание стоит уделить вопросу о соотношении плотности частиц и плотности гидродинамической среды. Как уже упоминалось выше, рассматриваемые нами уравнения справедливы только при малых плотностях частиц,  $(mn/\rho) \ll 1$ , то есть плотность массы частиц должна быть намного меньше плотности массы гидродинамической среды. Заметим, что учет процессов поглощения и размножения частиц накладывают дополнительные ограничения на плотность частиц. В самом деле, поглощающая и размножающая среда несомненно должна быть многокомпонентной, в которой процессы размножения и поглощения частиц связаны с переходом частиц--компонентов среды из одного сорта в другой. Поэтому существенные изменение состава среды могут сильно влиять на параметры, входящие в уравнения (45). По этой причине систему можно условно считать однокомпонентной только в том случае, если на рассматриваемых масштабах времен ее состав меняется слабо, что накладывает более строгие ограничения на плотность частиц. Фактически в реальных системах, в которых имеет место распространение нейтронов в различных средах, плотность нейтронов на много порядков меньше плотности среды. Поэтому в дальнейших вычислениях мы будем предполагать справедливость условий

$$\frac{mn}{\rho} \ll 1, \quad \frac{Mn}{\rho} \ll 1, \quad \frac{nT}{\rho S_0^2} \ll 1, \quad (48)$$

что и позволит считать гидродинамическую подсистему условно однокомпонентной. В последних выражениях величина  $M$  представляет собой среднюю массу частицы среды, а  $S_0$  - скорость звука в среде без учета влияния частиц.

Выписанные выше уравнения гидродинамики могут быть использованы для прояснения вопроса о влиянии парных корреляций на эволюцию всей исследуемой системы. Для этого необходимо вернуться к задаче на собственные значения, поставленной нами в предыдущем разделе, см. (40):

$$T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})V_b^{(\mu)}(\mathbf{q}) = \lambda^{(\mu)}(q)V_a^{(\mu)}(\mathbf{q}), \quad (49)$$

где  $\mu = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ , теперь уже с конкретной матрицей эволюции  $T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})$ , которая может быть получена путем линеаризации уравнений гидродинамики вблизи некоторого пространственно-однородного состояния  $\zeta^0$ . При этом можно убедиться в том, что матрица эволюции  $T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})$

$$T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q}) = T_{ab}^{(NG)}(\mathbf{q}) + T_{ab}^{(1)}(\mathbf{q}) + T_{ab}^{(2)}(\mathbf{q}) \quad (50)$$

содержит неградиентные члены, то есть, члены, не зависящие от  $\mathbf{q}$  и члены, пропорциональные  $q$ :

$$T_{ab}^{(NG)}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & E \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K \end{pmatrix}, \quad T_{ab}^{(1)}(\mathbf{q}) = -iq \begin{pmatrix} 0 & Bt_k & 0 & 0 \\ At_i & 0 & Ct_i & Tt_i \\ 0 & t_k & 0 & 0 \\ 0 & \frac{N}{\rho}t_k & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad t_i \equiv \frac{q_i}{q}, \quad (51)$$

а также члены, пропорциональные  $q^2$ :

$$T_{ab}^{(2)}(\mathbf{q}) = -q^2 \begin{pmatrix} \frac{\kappa}{\rho c_v} & 0 & -\frac{\kappa}{\rho c_v} \left( \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \rho} \right)_T & 0 \\ 0 & -\frac{\eta}{\rho} \delta_{ik} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{\eta}{3} + \zeta \right) t_i t_k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{eff} \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Отметим, что при линеаризации уравнений мы считали справедливым соотношение  $\zeta_i^0 = 0$ , то есть, что система покоится как целое в рассматриваемой нами системе отсчета. В уравнении (51) для сокращения

введены обозначения

$$A = \left( \frac{\partial p}{\partial \zeta_0} \right)_\rho, \quad B = \frac{p + \varepsilon_0}{\rho}, \quad C = \left( \frac{\partial \rho}{\partial \rho} \right)_{\zeta_0}. \quad (53)$$

Все характеристики системы стоящие в выражениях (51)-(53) вычисляются при параметрах среды, равных стационарным (см. (19)). Отметим еще одну важную особенность введенных нами обозначений. Исследуемая система имеет шесть параметров описания, относящихся к четырем категориям физических величин - плотности энергии  $\zeta_0$ , трем проекциям плотности импульса  $\zeta_i$ , плотности массы среды  $\zeta_4$  и плотности частиц, взаимодействующих со средой (нейтронов)  $\zeta_5$ . Однако для уменьшения громоздкости формул мы будем выписывать векторы состояния системы и матрицу эволюции, формально рассматривая только четыре компонента, нумеруемых индексами  $a = 0, i, 4, 5$  и  $b = 0, k, 4, 5$ , не забывая при этом, что величины, относящиеся к импульсу, имеют три проекции  $i, k = 1, 2, 3$ . Поэтому компоненты матриц в формулах (51)-(53), относящиеся к импульсу имеют, свои индексы  $i$  и  $k$ . Подчеркнем, что используемый в формулах (51) вектор

$$\mathbf{t} \equiv \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \text{ является ортом вектора } \mathbf{q}.$$

Наличие в матрице эволюции неградиентных членов (не зависящих от  $\mathbf{q}$ ) делает решение нашей задачи на собственные значения сложнее, чем аналогичное решение для однокомпонентной гидродинамической среды [6] или для частиц, взаимодействующих с гидродинамической средой, без их размножения и поглощения [16]. При наличии в уравнениях слагаемых, пропорциональных только первой и второй степени  $\mathbf{q}$  задача на собственные значения решалась методом теории возмущений в приближении малых  $|\mathbf{q}|$ . Такое решение справедливо в длинноволновом пределе  $|\mathbf{q}| \leq q_{\text{lim}}$  и отказывает на коротких пространственных масштабах. Тут стоит отметить тот факт, что и сами уравнения гидродинамики справедливы только на достаточно больших пространственных масштабах [9], то есть, ограничение на  $|\mathbf{q}|$  сверху содержится в самих уравнениях гидродинамики. Однако, ситуация еще более усложняется, когда уравнения содержат слагаемые, пропорциональные нулевой, первой и второй степени волнового вектора  $\mathbf{q}$ . Очевидно, что в этом случае при очень малых  $|\mathbf{q}|$  неградиентные члены будут играть определяющую роль в уравнениях. Однако с ростом величины  $|\mathbf{q}|$  вклад членов первого и второго порядка по градиентам в решение растет, и при достаточно больших  $|\mathbf{q}|$  построение классической теории возмущений, в которой первый порядок по градиентам будет лишь малыми поправками к нулевому, окажется невозможным. Не стоит забывать также, что поиск собственных значений для матрицы  $T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})$  нас интересует с точки зрения описания длинноволновых гидродинамических корреляций в системе. По этой причине нам прежде всего важен такой диапазон величин  $\mathbf{q}$ , в котором корреляционная функция внешней силы  $g_{ab}(\mathbf{q}, \tau)$  отлична от нуля и имеет физический смысл. Выше нами уже отмечалось, в каком смысле необходимо трактовать использованное нами в настоящей работе приближение пространственно однородного состояния. С учетом этого становится ясно, что интересующий нас диапазон значений  $|\mathbf{q}|$  ограничен снизу размером системы  $|\mathbf{q}| > L^{-1}$  и даже размером ее части, близкой к пространственно-однородному состоянию  $|\mathbf{q}| > L_h^{-1}$  (напомним, что величина  $L_h$  характеризует размеры рассматриваемой системы, на которых можно не учитывать влияния граничных эффектов). Это обстоятельство добавляет важное условие поиска интересующих нас решений - ограничение на величину  $|\mathbf{q}|$  снизу. Благодаря этому ограничению мы можем найти собственные векторы матрицы эволюции в приближении малых неградиентных членов. Заметим, что конкретный критерий малости компонентов матрицы  $T_{ab}^{(NG)}$  должна предоставить верификация, которую мы проведем после нахождения приближенных решений задачи на собственные значения, а для начала просто будем полагать эти нужные компоненты малыми. Схема построения теории возмущений будет практически аналогична схеме, использованной нами ранее в работах [16] и [22], поэтому тут мы изложим лишь основные ее шаги. В качестве начального приближения для матрицы  $T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})$  мы выберем слагаемое

$$T_{ab}^{(IN)}(\mathbf{q}) = T_{ab}^{(1)}(\mathbf{q}) \quad (54)$$

а в качестве поправок - величину

$$T_{ab}^{(Corr)}(\mathbf{q}) = T_{ab}^{(NG)} + T_{ab}^{(2)}(\mathbf{q}). \quad (55)$$

Отметим, что при этом выполняется соотношение

$$T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q}) = T_{ab}^{(IN)}(\mathbf{q}) + T_{ab}^{(Corr)}(\mathbf{q}). \quad (56)$$

Параллельно с задачей поиска собственных векторов матрицы  $T_{ab}^{(1)}(\mathbf{q})$  неизбежно возникнет вопрос их ортогонализации и доказательства условия их полноты. Предвидя это обстоятельство, определим скалярное произведение  $(U, V)$  в пространстве найденных векторов, введя в рассмотрение "нормировочную" матрицу  $G_{ab}$  скалярного произведения:

$$(U, V) = U_a^* G_{ab} V_b, \quad (57)$$

Мы сконструируем матрицу  $G_{ab}$  таким образом, чтобы ее структура была максимально простой, а матрица  $T_{ab}^{(IN)}(\mathbf{q})$  удовлетворяла условию антиэрмитовости во введенном скалярном произведении (57):

$$(U, T^{(1)}(\mathbf{q})V) = -(UT^{(1)}(\mathbf{q}), V). \quad (58)$$

Тогда найденные в соответствующем приближении собственные векторы, отвечающие разным собственным значениям, окажутся ортогональными автоматически.

Используя явное выражение (51) для матрицы эволюции  $T_{ab}^{(IN)}(\mathbf{q})$  и условие антиэрмитовости (58), удастся построить матрицу скалярного произведения, имеющую наиболее простой вид [16]:

$$G_{ab} = \begin{pmatrix} G_{11} & 0 & G_{04} & \\ 0 & G_{11}\delta_{ij} & 0 & 0 \\ G_{04} & 0 & G_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G_{55} \end{pmatrix}, \quad G_{00} = \frac{1}{T^2 \rho c_v}, \quad G_{11} = \frac{1}{T\rho}, \quad G_{04} = -\frac{1}{T^2 \rho c_v} \left( \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \rho} \right)_T, \quad G_{55} = \frac{1}{n}, \quad (59)$$

$$G_{44} = \frac{S_0^2}{\rho T} - \frac{1}{T^2 \rho c_v} \left( \frac{p + \varepsilon_0}{\rho} \right)^2 + \frac{2}{T^2 \rho c_v} \left( \frac{p + \varepsilon_0}{\rho} \right) \left( \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \rho} \right)_T,$$

где  $S_0 = \sqrt{AB+C}$  - скорость звука в гидродинамической среде без учета влияния частиц, взаимодействующих с этой средой, а  $c_v = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial T} \right)_\rho$  - теплоемкость среды при постоянном объеме.

Обратимся теперь к поиску решения задачи на собственные значения в первом приближении

$$T_{ab}^{(IN)}(\mathbf{q}) U_b^{(\mu)}(\mathbf{q}) = \lambda_1^{(\mu)}(q) U_a^{(\mu)}(\mathbf{q}). \quad (60)$$

В последнем уравнении функции  $U_a^{(\mu)}(\mathbf{q})$ , где индекс  $\mu$  пробегает значения  $\mu = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ , представляют собой собственные векторы матрицы  $T_{ab}^{(1)}(\mathbf{q})$ , а собственные значения, соответствующие этим собственным векторам, обозначены как  $\lambda_1^{(\mu)}(q)$ . Благодаря достаточно простой структуре матрицы  $T_{ab}^{(IN)}(\mathbf{q})$  уравнения (60) могут быть легко решены точно, и для величин  $\lambda_1^{(\mu)}(q)$  получим следующие значения:

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(0)}(q) &= 0, & U^{(0)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{\rho T (\gamma - 1)}{S_0^2}} \left( -\frac{C}{A}, 0, 1, 0 \right), \\ \lambda_1^{(1,2)}(q) &= \pm i q S, & U^{(1,2)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{\rho T}{2S^2}} \left( B, \mp S \mathbf{t}_k, 1, \frac{n}{\rho} \right), \\ \lambda_1^{(3,4)}(q) &= 0, & U^{(3,4)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\rho T} \left( 0, \mathbf{e}_k^{(1,2)}, 0, 0 \right), \\ \lambda_1^{(5)}(q) &= 0, & U^{(5)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{n} \left( \frac{-TB}{S^2}, 0, \frac{-T}{S^2}, 1 \right). \end{aligned} \quad (61)$$

В последнем выражении единичный вектор  $\mathbf{t} = \mathbf{q}/|\mathbf{q}|$  направлен вдоль вектора  $\mathbf{q}$ , а единичные векторы  $\mathbf{e}^{(1)}$  и  $\mathbf{e}^{(2)}$  перпендикулярны друг другу и вектору  $\mathbf{t}$ :

$$\mathbf{e}^{(1)} \perp \mathbf{t}, \quad \mathbf{e}^{(2)} \perp \mathbf{t}, \quad \mathbf{e}^{(2)} \perp \mathbf{e}^{(1)}, \quad |\mathbf{e}^{(1)}| = |\mathbf{e}^{(2)}| = 1. \quad (62)$$

Величина  $S$ , которая дается выражением

$$S^2 = AB + C + nT/\rho, \quad (63)$$

представляет собой скорость звука в гидродинамической среде с учетом влияния частиц, с этой средой взаимодействующих, а величина  $\gamma = c_p/c_v$  - отношение теплоемкости среды при постоянном давлении и при постоянном объеме.

Проанализируем теперь выражение (61). Шесть найденных собственных векторов  $U^{(\mu)}(\mathbf{q})$  матрицы  $T_{ab}^{(1)}(\mathbf{q})$  удовлетворяют условиям ортонормировки и полноты:

$$(U^{(\mu)}(\mathbf{q}), U^{(\nu)}(\mathbf{q})) = \delta_{\mu\nu}, \quad \sum_{\mu=0}^5 U_a^{(\mu)}(\mathbf{q}) U_b^{(\mu)}(\mathbf{q}) G_{bc} = \delta_{ac}. \quad (64)$$

Эти векторы соответствуют шести модам внутреннего движения системы, без учета процессов диссипации и размножения частиц средой. Моды  $U^{(1)}(\mathbf{q})$  и  $U^{(2)}(\mathbf{q})$  соответствуют распространению звуковых волн в системе. Остальные моды вырождены в бездиссипативном приближении. Однако по структуре векторов видно, что  $U^{(3)}(\mathbf{q})$  и  $U^{(4)}(\mathbf{q})$  соответствуют поперечным вязким волнам, а  $U^{(0)}(\mathbf{q})$  и  $U^{(5)}(\mathbf{q})$  соответствуют процессам переноса тепла и диффузии частиц в системе. Однако для их разделения и снятия вырождения следует найти поправки следующего порядка малости. Благодаря тому, что матрица  $T_{ab}^{(Corr)}(\mathbf{q})$  (69) содержит большое количество нулей, разделение вырожденных собственных векторов окажется относительно простым. Основной проблемой, как увидим далее, будет разделение мод  $U^{(0)}(\mathbf{q})$  и  $U^{(5)}(\mathbf{q})$ .

Обратимся теперь к задаче о поиске решений уравнения (49). Очевидно, что искомые решения  $V_a^{(\mu)}$  зависят от  $\mathbf{q}$  как от параметра. Однако в дальнейшем мы не будем подчеркивать эту зависимость, чтобы не загромождать выкладок. Имея ввиду условия полноты (64), можно искать решения  $V_a^{(\mu)}$  в виде разложения по полному набору векторов  $U_a^{(\mu)}$ :

$$V_a^{(\mu)} = U_a^{(\mu)} + \sum_{\sigma=0}^5 R_{\mu\sigma} U_a^{(\sigma)}. \quad (65)$$

Благодаря тому обстоятельству, что выбор нормировки нормировки векторов  $V_a^{(\mu)}$  пока не зафиксирован, мы можем потребовать, чтобы выполнялось условие

$$R_{\mu\mu} = 0. \quad (66)$$

Следует отметить, что величины  $R_{\mu\sigma}$ , определенные в (65), не обязательно малы по сравнению с единицей несмотря на предполагаемую малость матрицы  $T_{ab}^{(Corr)}$ . Помимо малых поправок к собственным векторам,  $R_{\mu\sigma}$  могут содержать элементы преобразования, обусловленного снятием вырождения собственных векторов  $U_a^{(\mu)}$ . Что касается собственных значений, для них можно ввести поправки

$$\lambda^{(\mu)} = \lambda_1^{(\mu)} + \lambda_2^{(\mu)}. \quad (67)$$

Подставляя определения (65)-(67) в уравнения (49) и воспользовавшись соотношением (60), после несложных преобразований перейдем к системе уравнений

$$\lambda_2^{(\mu)} = T^{\mu\mu} + \sum_{\sigma=0}^5 R_{\mu\nu} T^{\mu\nu}, \quad (\lambda_1^{(\mu)} - \lambda_1^{(\sigma)} + \lambda_2^{(\mu)}) R_{\mu\sigma} = T^{\sigma\mu} + \sum_{\sigma=0}^5 R_{\mu\nu} T^{\sigma\nu}, \quad (68)$$

в которой введено новое обозначение:

$$T^{\mu\nu} = (U_a^{(\mu)}, T_{ab}^{(2)} U_b^{(\nu)}). \quad (69)$$

Можно убедиться, что система (68) содержит 36 уравнений, в роли неизвестных выступают 30 величин  $R_{\mu\nu}$ ,  $\mu \neq \nu$  и 6 величин  $\lambda_2^{(\mu)}$ , вследствие чего непосредственный поиск и анализ ее решений затруднителен. Поэтому мы воспользуемся теорией возмущений [16], а именно предположением о малости  $T_{ab}^{(Corr)}$ , и соответственно,  $T^{\mu\nu}$ . С помощью теории возмущений мы расцепим систему (68) на отдельные независимые уравнения там, где это возможно.

Для начала рассмотрим собственный вектор  $U_a^{(\mu)}$  и соответствующее ему невырожденное собственное значение  $\lambda_1^{(\mu)}$ . В данном случае малость  $T_{ab}^{(Corr)}$  следует понимать именно как выполнение соотношения:

$$|\lambda_1^{(\mu)} - \lambda_1^{(\sigma)}| \gg |T^{\nu\nu}| \quad (70)$$

для всех значений  $\sigma \neq \mu$  и для любых значений индексов  $\nu$  и  $\nu$ . Тогда, используя систему (68), легко показать, что для выбранного  $\mu$  и любого  $\nu$  выполняется соотношение

$$R_{\mu\nu} \ll 1, \quad (71)$$

а поправка для собственного значения дается выражением

$$\lambda_2^{(\mu)} = T^{\mu\mu}. \quad (72)$$

В рассматриваемой нами задаче переход от (68) к (72) требует дополнительного анализа. Дело в том, что различные компоненты  $T^{\nu\nu}$  содержат различные малые параметры -  $K$ ,  $E$  и  $q^2$ , поэтому несмотря на малость

$R_{\mu\nu}$ , малость вклада слагаемого  $\sum_{\sigma=0}^5 R_{\mu\nu} T^{\mu\nu}$  в  $\lambda_2^{(\mu)}$  (см. (68)) следует проверить дополнительно. Так, для справедливости соотношения (72) для некоторого фиксированного  $\mu$  достаточно того, чтобы величины  $T^{\mu\mu}$  и  $T^{\mu\nu}$ ,  $\mu \neq \nu$  были одного порядка. Используя изложенные выше соображения и вычислив величины  $T^{\mu\nu}$ , найдем поправку для собственного значения звуковых мод:

$$\lambda_2^{(1)} = \lambda_2^{(2)} = -q^2 \Gamma_s + I_s, \quad \Gamma_s = \frac{1}{2\rho} \left\{ \frac{\kappa(\gamma-1)S_0^2}{\gamma c_v S^2} + \frac{4}{3} \eta + \zeta_{visc} + \frac{n_0 T}{S^2} D_{eff} \right\}, \quad I_s = \frac{1}{2} \left\{ \frac{AEn}{\rho S^2} + \frac{nTK}{\rho S^2} \right\}. \quad (73)$$

Первое слагаемое в формуле (73) описывает процессы затухания звуковых волн, связанные с диссипативными процессами в гидродинамической среде. Величина  $\Gamma_s$  содержит как слагаемые, связанные с вязкостью и теплопроводностью среды, хорошо известные из гидродинамики [23], так и слагаемое, связанное с диффузией частиц, взаимодействующих со средой [16]. Второе слагаемое в формуле (73) описывает процесс усиления звуковых волн за счет процессов размножения частиц, взаимодействующих со средой, упомянутый в работах [22] и [24].

Для поперечных вязких мод  $U_a^{(3)}$  и  $U_a^{(4)}$  нахождение собственных значений оказывается еще более простым. Непосредственными вычислениями легко убедиться, что выполняются соотношения:

$$T^{3\nu} = 0, \quad T^{\nu 3} = 0, \quad \nu \neq 3; \quad T^{3\mu} = 0, \quad T^{\mu 4} = 0, \quad \nu \neq 4; \quad T^{33} = T^{44} = -q^2 \frac{\eta}{\rho}, \quad (74)$$

что приводит к тривиальному решению части уравнений системы (68)

$$\lambda_2^{(3)} = \lambda_2^{(4)} = -q^2 \Gamma_{\perp}, \quad \Gamma_{\perp} \equiv (\eta/\rho), \quad R^{30} = R^{03} = 0, \quad R^{40} = R^{04} = 0. \quad (75)$$

Как видим, для поперечных вязких мод собственные значения находятся совершенно точно, и соответствующие им собственные векторы остаются ортогональными всем остальным собственным векторам и друг другу, несмотря на некоторый произвол выбора векторов  $U_a^{(3)}$  и  $U_a^{(4)}$ , обусловленный произволом выбора трехмерных векторов  $\mathbf{e}^{(1)}$  и  $\mathbf{e}^{(2)}$ . Собственные значения для поперечных вязких мод совпадают с известными значениями из обычной гидродинамики [23].

Остается наиболее сложный вопрос о поиске собственных значений и собственных векторов тепловой моды ( $\mu = 0$ ) и диффузионной моды ( $\mu = 5$ ). Используя предположение о малости  $T_{ab}^{(Corr)}$  в виде соотношения (70), можно пренебречь влиянием звуковых мод на тепловую и диффузионную, считая что

$$R^{01} = R^{02} = 0, \quad R^{51} = R^{52} = 0. \quad (76)$$

Теперь остается рассмотреть уравнения (68), когда  $\mu$  принимает только два значения:  $\mu = 0$  и  $\mu = 5$ . Для такой системы четырех уравнений несложно выписать точное решение:

$$\lambda_2^{(0)} = \frac{1}{2} \left( T^{00} + T^{55} + (T^{00} - T^{55}) \sqrt{1 + 4T^{05} T^{50} (T^{00} - T^{55})^{-2}} \right), \quad R^{05} = T^{50} (\lambda_2^{(0)} - T^{55})^{-1}, \quad (77)$$

$$\lambda_2^{(5)} = \frac{1}{2} \left( T^{55} + T^{00} + (T^{55} - T^{00}) \sqrt{1 + 4T^{05} T^{50} (T^{00} - T^{55})^{-2}} \right), \quad R^{50} = T^{05} (\lambda_2^{(5)} - T^{00})^{-1}.$$

Из последних соотношений видно, что тепловая и диффузионная моды хорошо разделяются, когда квадрат разности величин  $T^{00}$  и  $T^{55}$  велик по сравнению с произведением  $T^{50} * T^{05}$ . При выполнении условия

$$(T^{00} - T^{55})^2 \ll T^{50} T^{05} \quad (78)$$

величины  $R^{\mu\nu}$  будут малыми по сравнению с единицей, а решения для собственных значений будут близкими к  $\lambda_2^{(\mu)} = T^{\mu\mu}$ . Если же условие (78) не выполняется, добавки к собственным векторам будут большими и, следовательно, теория возмущений для решения такой задачи неприменима. В случае же справедливости равенства  $T^{00} = T^{55}$  разделение мод в нашем приближении вовсе невозможно.

Проведя далее несложные вычисления, придем к следующим выражениям:

$$T^{00} = \frac{-q^2 \kappa}{\gamma \rho c_v}, \quad T^{55} = K - \frac{AEn}{\rho S^2} - q^2 D_{eff} \frac{-q^2 \kappa (\gamma-1) n T}{\gamma \rho c_v \rho S^2}, \quad (79)$$

$$T^{50} = \frac{-q^2 \kappa}{\rho c_v} \sqrt{\frac{n(\gamma-1)T}{\rho S}}, \quad T^{05} = \frac{-q^2 \kappa}{\rho c_v} \sqrt{\frac{n(\gamma-1)T}{\rho S}} - \sqrt{\frac{\rho S^2}{(\gamma-1)nT}} \frac{AEn}{\rho S^2}.$$

Из последнего выражения видно что моды хорошо разделяются при больших коэффициентах диффузии  $D_{eff} \gg \frac{\kappa}{\rho c_v \gamma}$  и при выполнении условия  $K \leq 0$ . В изучаемом нами случае коэффициент диффузии частиц

оказывается большим благодаря малому взаимодействию их со средой и большой длине свободного пробега [15]. В случае положительных  $K$  существует некоторая область значений  $q$ , где моды сильно взаимодействуют. Однако эта область будет очень небольшой благодаря малости величин  $T^{05}$  и  $T^{50}$  из-за малой плотности частиц (48). Поэтому в дальнейшем мы будем считать что вырождение снято, величины  $R^{\mu\nu}$  малы по сравнению с единицей, и собственные векторы даются выражением

$$\lambda_2^{(0)}(q) = -q^2\Gamma_T, \quad \Gamma_T = \frac{\kappa}{\gamma\rho c_v}, \quad \lambda_2^{(5)}(q) = I_D - q^2\Gamma_D, \quad I_D = K - \frac{AE n}{\rho S^2}, \quad \Gamma_D = D_{eff}. \quad (80)$$

При этом стоит отметить, что оба выражения справедливы как при малых, так и при больших  $q$ . Тепловая мода  $\mu=0$  описывает затухающую тепловую волну, а мода  $\mu=5$  описывает процессы диффузии частиц и размножения их средой.

Таким образом, результат решения задачи на собственные значения определяется формулами:

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(0)}(q) &= -q^2\Gamma_T, & V^{(0)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{\rho T(\gamma-1)}{S_0^2}} \left( -\frac{C}{A}, 0, 1, 0 \right), \\ \lambda_1^{(1,2)}(q) &= I_s \pm iqS - q^2\Gamma_s, & V^{(1,2)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{\rho T}{2S^2}} \left( B, \mp \text{St}_k, 1, \frac{n}{\rho} \right), \\ \lambda_1^{(3,4)}(q) &= -q^2\Gamma_{\perp}, & V^{(3,4)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\rho T} \left( 0, \mathbf{e}_k^{(1,2)}, 0, 0 \right), \\ \lambda_1^{(5)}(q) &= I_D - q^2\Gamma_D, & V^{(5)}(\mathbf{q}) &= \sqrt{n} \left( \frac{-TB}{S^2}, 0, \frac{-T}{S^2}, 1 \right). \end{aligned} \quad (81)$$

Проанализируем полученные решения. Тепловая мода  $V^{(0)}$  имеет диффузионный характер, и соответствующее ей собственное значение  $\lambda^{(0)}(q)$  совпадает со значением, известным из обычной однокомпонентной гидродинамике [6]). Поперечные вязкие моды  $V^{(3)}$  и  $V^{(4)}$  тоже не демонстрируют нового поведения. Для звуковых мод  $V^{(1)}$  и  $V^{(2)}$  мы получили качественно новый результат. Выражения для скорости звука  $S$  и коэффициента затухания звука  $\Gamma_s$  совпадают с выражениями, полученными и проанализированным в работе [16]. Однако, появилось и дополнительное слагаемое  $I_s$ , который не зависит от  $q$  и может быть положительным при условии

$$K > -\frac{AE}{T}, \quad (82)$$

то есть даже при отрицательных коэффициентах размножения  $K$ . В случае своей положительности величина  $I_s$  выступает в роли инкремента нарастания соответствующих волн. Таким образом, для достаточно больших  $q$  процессы усиления звуковых волн, обусловленные размножением частиц в системе и ее нагревом будут доминировать над процессом поглощения звуковых волн за счет диссипативных процессов в среде. Иными словами, возможен процесс усиления звуковых волн размножающей средой, являющийся одной из возможных причин развития неустойчивостей в системе. К несколько иному результату придем для диффузионной моды  $V^{(5)}$ . В собственном значении  $\lambda^{(5)}$  тоже присутствует поправка, обусловленная размножением частиц. Однако эта мода оказывается неустойчивой только при условии  $K > \frac{AE n}{\rho S^2}$ .

Вернемся теперь к выражениям (43), (44), определяющие влияние корреляций на динамику параметров описания, в данном случае — гидродинамических параметров. Разложение матрицы  $T_{ab}^{(H)}(\mathbf{q})$  по собственным векторам, найденное выше, позволяет вычислять различные функции содержащие эту матрицу в качестве аргумента (см. в этой связи, например, (41), (42)). Используя определение скалярного произведения (57), общего решения для динамики корреляций (42) и выражения (44) найдем, что вклад корреляций в уравнения гидродинамики дается выражением:

$$X_a^{(corr)}(t) = T_{abc}^{(0)} \sum_{\mu=0}^5 \sum_{\nu=0}^{\infty} \int dq q^2 \left[ 1 - e^{i(\lambda^{(\mu)}(q) + \lambda^{(\nu)}(-q))} \right] \left[ \lambda^{(\mu)}(q) + \lambda^{(\nu)}(-q) \right]^{-1} \int_{4\pi} d\Omega F_{bc;de}^{\mu\nu}(\mathbf{t}) g_{de}(q\mathbf{t}), \quad (83)$$

где введено обозначение

$$F_{ab;cd}^{\mu\nu}(\mathbf{q}) = V_a^{(\mu)}(\mathbf{q}) V_b^{(\nu)}(-\mathbf{q}) V_{a'}^{*(\mu)}(\mathbf{q}) V_{b'}^{*(\nu)}(-\mathbf{q}) G_{a'c} G_{b'd}. \quad (84)$$

В выражении (83) разделено интегрирование по модулю вектора  $\mathbf{q}$  и по направлению его орта  $\mathbf{t}$ . Такое разделение упрощает анализ результатов благодаря тому обстоятельству, что собственные векторы  $V_a^{(\mu)}(\mathbf{q})$  зависят только от направления  $\mathbf{q}$ , тогда как собственные значения  $\lambda^{(\mu)}$  зависят только от его модуля. Отметим,

что собственные значения при  $\mu=1,2$  являются комплексными, однако, используя свойства симметрии собственных значений и векторов (81), а также величины  $g_{ab}(\mathbf{q})$  относительно замены  $\mathbf{q}$  на  $-\mathbf{q}$ , нетрудно показать, что результат суммирования по  $\mu$  и  $\nu$  и интегрирования в выражении (83) получится действительным. Величины  $T_{abc}^{(0)}$  представляют собой вторые производные от неградиентных членов уравнений динамики системы, и многие из них не являются нулевыми. Например, это касается элемента

$$T_{504;0} = \left( \frac{\partial^2 K}{\partial \zeta_0 \partial \rho} \right) \Big|_{\zeta=\zeta_0}. \quad (85)$$

Как легко видеть, вычисление величины  $X_a^{(corr)}(t)$  требует знания спектра корреляций внешней силы. Однако из самой структуры выражения (83) видно, что наличие достаточно крупномасштабных компонент в корреляционных функциях внешней силы, для которых реальная часть некоторых собственных значений положительна, могут породить экспоненциально нарастающие решения. Поскольку действительные части всех собственных значений  $Re(\lambda^{(\mu)}(q))$  убывают с ростом  $q$  максимально нарастающие решения будут давать длинноволновые компоненты внешнего шума. При этом благодаря тому, что в показателе экспоненты в (83) стоит сумма двух собственных значений, экспоненциальный рост величины  $X_a^{(corr)}(t)$  может происходить вдвое быстрее, чем нарастание соответствующих гидродинамических неустойчивостей, получающиеся из решения уравнений гидродинамики без учета корреляций. Наибольший интерес тут представляет неустойчивость звуковых мод, которая может реализовываться даже в том случае, когда коэффициент размножения  $K$  меньше нуля (см. формулы (73), (82)). Корреляции внешней силы, для которых выполняется условие

$$|\mathbf{q}| < (I_s / \Gamma_s), \quad (86)$$

приводят к появлению нарастающих решений для величины  $X_a^{(corr)}(t)$ . При этом, как видно из решения для звуковых мод, наличие корреляции для практически любых компонент  $g_{ab}$  может породить неустойчивые пространственно однородные нарастающие корреляционные функции, которые воздействуют на систему как некоторая однородная и нарастающая со временем внешняя сила, выводящая систему из стационарного состояния. Например, любая изотропная корреляция любых двух компонент внешней силы  $g_{ab}$ , соответствующих  $a, b = 0, 4, 5$ , порождает гидродинамические корреляционные функции через звуковые моды. В случае неустойчивости инкремент нарастания этих мод может достигать  $2I_s$ , что вдвое больше инкремента нарастания соответствующих неустойчивостей в обычных уравнениях гидродинамики. При этом неустойчивые звуковые решения в обычной гидродинамике представляют из себя быстро убегающие нарастающие волны, которые не могут развиваться в системе конечных размеров (как мы уже отмечали, приближение пространственной однородности возможно и для систем конечных размеров), а гидродинамические корреляции развиваются во всем объеме пространственно-однородной системы. Таким образом, мы показали, что корреляции внешней силы, воздействующей на неустойчивую систему в состоянии, близком к пространственно однородному, могут приводить к появлению нарастающих парных корреляционных функций. Последние, в свою очередь, в случае наличия в уравнениях динамики системы неградиентных членов, воздействуют на систему как некоторая пространственно однородная внешняя сила, которая со временем нарастает быстрее, чем неустойчивости, не связанные с учетом корреляций, и, тем самым, оказывают определяющее воздействие на выход системы из стационарного состояния. В случае устойчивой системы, парные корреляции развиваются до некоторого стационарного значения, воздействуя на систему как некоторая постоянная сила, немного смещающая положение равновесия.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, нами изучены особенности динамики системы частиц, взаимодействующих с мультиплицирующими и поглощающими гидродинамическими средами при воздействии внешнего стохастического поля. В частности, предложено рассматривать такую систему в качестве модели нейтронов, взаимодействующих с размножающей и поглощающей гидродинамической средой. Нами показано, что внешнее стохастическое поле порождает в системе флуктуации параметров описания, причем динамика этих флуктуаций может существенным образом влиять на эволюцию всей системы как целого. Для изучения этого влияния получены общие уравнения флуктуационной динамики в случае воздействия на систему внешнего аддитивного гауссового шума. Уравнения проанализированы с точки зрения возможности установления стационарных состояний в изучаемой системе и их устойчивости. Анализ уравнений дал возможность установить условия, при которых флуктуации параметров описания играют определяющую роль при развитии неустойчивостей возможных стационарных состояний системы.

Как отмечено в статье, существование описанных состояний в системе частиц, взаимодействующих с

мультиплицирующими и поглощающими средами под влиянием стохастической внешней силы может быть ограничено по времени развитием нелинейных явлений. После прохождения таких характерных времен становится необходимо учитывать нелинейности в уравнениях флуктуационной динамики и, следовательно, принимать во внимание динамику флуктуаций более высокого порядка, чем второй. Однако решение задачи учета нелинейных эффектов и динамики корреляций порядка более высокого порядка, чем второй, требует дополнительных исследований.

В заключение отметим, что изучение в работе случая воздействия на систему внешнего аддитивного шума не является принципиальным. Разработанный нами подход дает возможность описать влияние на динамику системы мультипликативного шума, или даже воздействие комбинации аддитивного и мультипликативного шумов. Такая система, возможно, будет демонстрировать наличие каких-либо новых эффектов по сравнению с изученными в настоящей статье. Но описание эволюции такой системы, несомненно, представляет и более сложную задачу, хотя бы из-за ее громоздкости и, по этой причине, также требует отдельного изучения.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Alder B., Wainright T. Decay of Velocity Autocorrelation Functions // *Phys.Rev A.*- 1970.- Vol. 1.-P. 18-21.
2. Dorfman J., Cohen E. Velocity Correlation Function in Two and Three Dimensions // *Phys. Rev. Lett.*- 1970.-Vol. 21.-P. 1257-1260.
3. Ernst M., Hauge E., van Leeuwen J. Asymptotic Time Behaviour of Correlation Functions // *Phys.Rev. Lett.* - 1970. -Vol. 24. - P. 1254-1256.
4. Zubaref D., Hazanov A. Boltzmann -Enskog equation and asymptotics of time autocorrelation functions // *Theoretical and mathematical physics.* - 1977. - Vol. 31, № 2. - P. 260-272.
5. Kawasaki K. Dynamical theory of fluctuations near the critical points // *Critical Phenomena* / Ed. by M. S. Green.- New York: Academic, 1971.-P. 342-379.
6. Peletminskii S., Plokhov S., Prikhod'ko V. On statistical theory of non-equilibrium fluctuations with large correlations radius (in Russian) // *Theoretical and mathematical physics.* - 1981. - Vol. 46, № 2. - P. 174-183.
7. Peletminskii S.V., Y. Slyusarenko Yu. V. On theory of long-wave nonequilibrium fluctuations // *Physica A.*- 1994.- Vol. 210, № 1-2. - P. 165-204.
8. Bogolyubov. N.N. Problems of a dynamical theory in statistical physics - Providence R.I.: Providence College, 1959.
9. Akhiezer A.I., Peletminskii. S.V. Methods of Statistical Physics - Oxford: Pergamon Press, 1981.
10. Peletminskii S., Slyusarenko Yu., Sokolovsky A. Kinetics and hydrodynamics of long-wave fluctuations under external random force // *Physica A.* - 2003. - Vol. 326, № 3-4. - P. 412-429.
11. Taylor G. Diffusion by continuous movements // *Proc. London Math. Soc.*(2). - 1921. - Vol. 20, № 2. - P. 196-211.
12. Keller L., A. Fridman A. Differentialgleichung für die turbulente bewegung einer kompressiblen flussigkeit // *Proc. Ist. intern. Congr. Appl. Mech.* - Delft. - 1924. - P. 395-406.
13. Branover H., Moiseyev S., Golbraikh E., Eidelman A. Turbulence and structures: chaos, fluctuations, and helical self-organization in nature and the laboratory, - London: Academic Press, 1999.
14. Bulavin L.A. et.al. Neutron Spectroscopy of condensed matter [in Ukrainian] - Kyiv: Akademperiodica, 2005.
15. Nikolyaenko S.O., Slyusarenko Yu.V. Microscopic theory of relaxation processes in systems of particles interacting with the hydrodynamic medium // *J. Math. Phys.* - 2009. - Vol. 50. - P. 083305.
16. Nikolyaenko S.O., Slyusarenko Yu.V. Theory of macroscopic fluctuations in systems of particles, interacting with hydrodynamic and gaslike media // *J. Math. Phys.* - 2010. - Vol. 51. - P. 113301.
17. Novikov S. Functional and method of random forces in turbulence theory // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* (in Russian). - 1964. - Vol. 47, № 5. - P. 1919-1926.
18. Davison B. Neutron Transport Theory - Oxford: Clarendon, 1957.
19. Stacey W.M. Nuclear Reactor Physics (second edition) -Wiley - VCH, 2007.
20. Anthony V. Nero JR. A Guidebook to nuclear reactors -Berkley/Los Angeles/London: University of California press, 1979.
21. Akhieser A.I., Pomeranchuk I.Ya. Introduction in the theory of multiplying systems (reactors) - Moscow: Izdat, 2002.
22. Nikolyaenko S.O., Slyusarenko Yu.V. On the long wave fluctuations in systems of particles interacting with hydrodynamic media // *Problems of Atomic Science and Technology.* - 2011. - № 1. - P. 198-202.
23. Landau L.D., Lifshitz E.M. Fluid Mechanics, Course of Theoretical Physics, vol. 6 - London: Pergamon Press, 1987.
24. Vodyanitskii A.A., Y. Slyusarenko Yu.V. The thermal neutron waves excitation in multiplied media bounded by absorber // *Problems of Atomic Science and Technology.* - 2007. - № 3. - P. 348-352.

УДК 539.216:519.876.5

## ТРАНСПОРТ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ В НЕДОДЕМПФИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

**И.Г. Марченко<sup>1,2</sup>, И.И. Марченко<sup>3</sup>**

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

<sup>2</sup>Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина  
пл. Свободы 4, г. Харьков, 61077, Украина

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

E-mail: march@kipt.kharkov.ua

Received July 12, 2013, accepted September 19, 2013

В работе методами компьютерного моделирования в широком диапазоне температур исследуется подвижность частиц под воздействием внешней силы в пространственно-периодических потенциалах. На основе предыдущих и полученных в настоящей статье данных показано, что недодемпфированное движение частиц в периодическом потенциале можно рассматривать как передемпфированное движение в пространстве скоростей в эффективном двухъямном потенциале. Сформулирована феноменологическая модель движения ансамбля частиц в недодемпфированном случае. Получены простые аналитические выражения для подвижности и динамической температуры частиц. Результаты аналитических расчетов согласуются с данными численного моделирования.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** диффузия, компьютерное моделирование, уравнения Ланжевена, периодические потенциалы, подвижность

## PARTICLE TRANSPORT IN SPACE-PERIODIC POTENTIALS IN UNDERDAMPED SYSTEMS

**I.G. Marchenko<sup>1,2</sup>, I.I. Marchenko<sup>3</sup>**

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

<sup>2</sup>V.N. Karazin Kharkov National University  
4 Svobody Sq., Kharkov, 61077, Ukraine

<sup>3</sup>NTU „Kharkov Polytechnic Institute”  
21 Frunze St., Kharkov, 61145, Ukraine

This scientific paper uses the methods of computer simulation to study the motion of particles in a washboard potentials in a wide temperature range. Using the previous data and the data obtained for this scientific paper we showed that the underdamped motion of particles in a spatial periodic potential can be considered as the overdamped motion in the velocity space in the effective double-well potential. A phenomenological model of the motion of the ensemble of underdamped particles has been formulated. Simple analytic expressions for the particle mobility and diffusion coefficient have been derived. The results of analytical computations match well with numerical simulation data.

**KEY WORDS:** diffusion, computer simulation, Langevin equation, space-periodic potentials, mobility

## ТРАНСПОРТ ЧАСТИНОК У ПРОСТОРОВО-ПЕРІОДИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛАХ У НЕДОДЕМПФІРОВАНІХ СИСТЕМАХ

**И.Г. Марченко<sup>1,2</sup>, И.И. Марченко<sup>3</sup>**

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

<sup>2</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
пл. Свободи 4, м. Харків, 61077, Україна

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

У роботі методами комп'ютерного моделювання у широкому діапазоні температур вивчається рухомість частинок під впливом зовнішньої сили у просторово періодичних потенціалах. На базі попередніх та отриманих у теперішній статті даних показано, що недодемпфований рух частинок у періодичному потенціалі можна розглядати як передемпфований рух у просторі швидкості в ефективному двох ямному потенціалі. Сформульована феноменологічна модель руху ансамбля частинок у недодемпфированому випадку. Отримані прості аналітичні вирази для рухомості та динамічної температури. Результати аналітичних розрахунків співпадають з даними численного моделювання.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** дифузія, комп'ютерне моделювання, рівняння Ланжевена, періодичні потенціали, рухливість

Несмотря на то, что транспорт и диффузия частиц в пространственно-периодических потенциалах изучаются продолжительное время [1,2], эти исследования по-прежнему продолжают приносить неожиданные результаты. Так, в частности, в работе [3] было показано, что в системах с малым трением коэффициент диффузии частиц может экспоненциально возрастать с уменьшением температуры. Такие исследования имеют не только общетеоретический, но и практический интерес. Они тесно связаны с физическими процессами,

протекающими в контактах Джозефсона, в системах фазовой автоподстройки частоты, в суперионных проводниках и пр. [1]. Особый интерес вызывает изучение, так называемых, Броуновских моторов [2,4]. Исследование особенностей транспорта атомов, а так же точечных и линейных дефектов кристаллической решетки во внешних полях представляются так же чрезвычайно важными для развития новых технологий в материаловедении.

Хотя были достигнуты значительные успехи в аналитических исследованиях диффузии и транспорта частиц в передемфированном случае [5], для систем с малой диссипацией энергии разработанные методы мало приемлемы.

Целью данной работы является построение простой феноменологической модели транспорта частиц в недодемфированных системах. Для этого мы продолжаем исследования, начатые в работе [3] и методом компьютерного моделирования изучаем изменение подвижности и диффузии частиц в широком температурном интервале. А затем, используя полученные данные, формулируем феноменологическую модель и сравниваем результаты аналитических вычислений и компьютерного моделирования.

### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим движение ансамбля частиц, находящихся в контакте с классическим тепловым резервуаром в периодическом потенциале. Для упрощения рассмотрен только случай одномерной диффузии в пространственно-периодическом потенциале  $U(x)$ . Движение частиц описывалось уравнениями Ланжевена:

$$m \ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x} U(x) - \gamma \dot{x} + F + \xi(t), \quad (1)$$

где  $x$  – координата частицы на плоскости,  $m$  – ее масса,  $F$  – постоянная сила, действующая на частицу,  $U(x)$  – потенциальная энергия частицы,  $\gamma$  – коэффициент трения. Член  $\xi(t)$  описывает термические флуктуации. Точка сверху означает дифференцирование по времени. Предполагается, что шум является гауссовым белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение:

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2\gamma k T \delta(t - t'), \quad (2)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура.

Потенциальная энергия частицы задавалась следующим выражением:

$$U(x) = -\frac{U_0}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{a} x\right), \quad (3)$$

где  $a$  – постоянная одномерной решетки.

На движущуюся частицу действует периодическая в пространстве сила со стороны кристаллической решетки  $F_{lat} = F_0 \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right)$ , где  $F_0 = \frac{\pi}{a} U_0$ .

Параметры используемого периодического потенциала были теми же что и в работах [3,6]. Величина активационного барьера составляла 80 мэВ, что является типичной величиной для диффузии адатомов по плотноупакованным плоскостям металлов с ГЦК и ГПУ структурой. Постоянная одномерной решетки  $a$  была выбрана равной 2 Å.

Уравнения движения (1) для каждой частицы решались численно с шагом по времени  $\Delta t \approx 0,1$  фмтс, 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 этого частица с имеющейся скоростью перемещалась в первую элементарную ячейку.

Для сопоставления данных полученных в данной работе с данными других авторов использовались безразмерные величины температуры  $T'$  и трения  $\gamma'$  [1,7].

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma' = \frac{\gamma a}{(mU_0)^{1/2}}. \quad (4)$$

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

В предыдущей работе [3] исследовались температурные зависимости коэффициентов диффузии ансамбля частиц, движущихся под воздействием внешней силы. В данной статье рассматривается направленный транспорт этих частиц. В качестве характеристики этого движения использовалась величина средней скорости ансамбля частиц:

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} VN(V)dV, \quad (5)$$

где  $N(V)$  - нормированная функция распределения частиц по скоростям.

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ЧАСТИЦ

На рис. 1 приведены зависимости подвижности  $\mu = \frac{\langle V \rangle}{F}$  умноженной на коэффициент трения от действующей силы для различных температур, полученные в результате компьютерного моделирования. Как известно, при малых значениях силы, величина  $\mu$  является постоянной, не зависящей от  $F$ . В этом случае  $\mu$  удовлетворяет соотношению Эйнштейна:  $\mu = \frac{D}{kT}$ . Эта зависимость приведена на вставке рис. 1 штриховой линией. В пространственно периодических структурах коэффициент диффузии  $D$  частиц в решетке, удовлетворяет соотношению Арениуса:  $D = D_0 \exp(-U_0/kT)$ . На вставке пунктирной линией так же представлена зависимость  $\langle V \rangle = \mu F$  для случая движения частиц в бесструктурной среде с трением. Как видно из рисунка, в области больших значений силы так же выполняется соотношение Эйнштейна. Однако коэффициент диффузии в этом случае соответствует движению частиц в среде с трением:  $D = kT/\gamma$ . Из рис. 1 следует, что подвижность при произвольном значении силы находится между двумя зависимостями, соответствующими соотношению Эйнштейна для периодической решетки и бесструктурной среды с трением. С уменьшением температуры происходит более резкий переход от одной функциональной зависимости к другой.

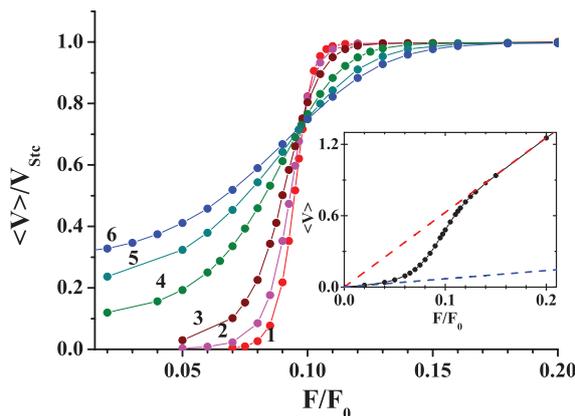


Рис. 1. Зависимость нормированной средней скорости  $\langle V \rangle / V_{Stc} = \gamma \mu$  от величины приложенной силы для различных температур.  $V_{Stc} = F/\gamma$ . Коэффициент трения  $\gamma' = 0,141$  1 –  $T' = 0,097$ , 2 –  $T' = 0,129$ , 3 –  $T' = 0,194$ , 4 –  $T' = 0,388$ , 5 –  $T' = 0,582$ , 6 –  $T' = 0,776$ .

Вставка: Зависимость средней скорости от силы при  $T' = 0.388$ . Нижняя штриховая линия - соотношение Эйнштейна для частиц в периодической решетке, верхняя - для частиц в бесструктурной среде с трением.

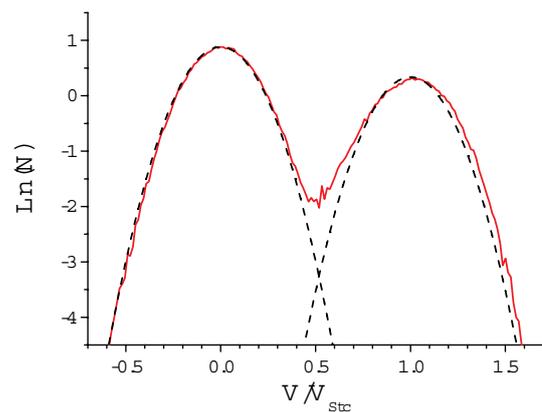


Рис. 2. Функция распределения частиц по скоростям для  $F = 0,09F_0$ .  $T' = 0,129$ ,  $\gamma' = 0,141$ . Аппроксимация двумя гауссианами с дисперсией  $(2kT/m)^{1/2}$  показана штриховой линией.

Качественно изменение подвижности частиц при малом трении описано в монографии Рискена [1]. В отсутствие тепловых флуктуаций, при последовательном увеличении силы, действующей на частицу, ее подвижность будет равна нулю вплоть до некоторого значения силы  $F_{03}$ . Это, так называемое, связанное решение. В точке  $F = F_{03}$  подвижность скачкообразно изменяется до значения  $\mu = 1/\gamma$ . Частица будет иметь энергию больше чем энергия связи с узлом одномерной решетки и, совершая колебания, будет продвигаться в направлении действующей силы. При этом усредненная по периоду колебаний скорость частицы будет равна  $\bar{V} = F/\gamma$ . Это - бегущее (running) решение [1]. Если затем уменьшать силу, то подвижность будет оставаться постоянной вплоть до значения  $F = F_{01}$ , где произойдет обратный скачок к нулевой подвижности. Эта качественная картина гистерезиса часто используется при интерпретации результатов моделирования. Впервые методом компьютерного моделирования диффузия и транспорт частиц в недодемпфированном случае были

исследованы Марчезони [8]. В работах [9-10] более подробно изучались зависимости  $\mu(F)$  для различных значений  $\gamma$ . В то же время, полученных данных недостаточно для установления функционального вида температурной зависимости подвижности частиц. В данной работе мы методами компьютерного моделирования подробно исследуем эту зависимость. Как видно из рис. 1, увеличение температуры приводит к тому, что кривые  $\mu\gamma$  становятся более пологими. Однако, все они пересекаются в одной точке, соответствующей значению  $F_{int} \approx 0,095F_0$ . Это величина силы соответствует значению  $F_{02}$  по классификации Рискена.

Для объяснения особенностей поведения  $\langle V \rangle$  рассмотрим, как изменяется функция распределения  $N(V)$  с увеличением силы. Хотя давно известно, что функция  $N(V)$  является бимодальной [1,9-10], необходимо знать ее вид и характер изменения с увеличением силы.

На рис. 2 приведено изменение  $N(V)$  с возрастанием  $F$  взятое из предыдущей нашей статьи [3]. Один максимум соответствует нулевому значению скорости, а второй –  $V = F/\gamma$ . Несмотря на то, что при увеличении силы происходит существенное перераспределение частиц между связанным и бегущим решением, качественный вид кривых не изменяется. Функция  $N(V)$  представляет собой сумму двух Гауссовых распределений с одинаковыми дисперсиями и разными средними, которые изображены пунктиром. Подгонка по методу наименьших квадратов показала, что во всем исследованном диапазоне действующих сил температурные зависимости  $N(V)$  с хорошей точностью могут быть описаны следующей функциональной зависимостью:

$$N(V) = A \exp(-mV^2/2kT) + B \exp(-m\left(V - \frac{F}{\gamma}\right)^2/2kT), \quad (6)$$

где величины  $A$  и  $B$  зависят от  $F$ .

### ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ ТРАНСПОРТ ЧАСТИЦ

Для объяснения температурных особенностей транспорта частиц качественная картина, описанная Рискеном [1], нуждается в уточнении. Вначале рассмотрим случай детерминированного движения частиц.

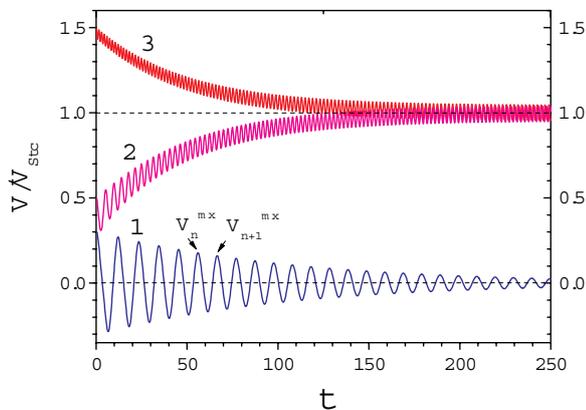


Рис. 3. Изменение во времени скорости частицы при различных начальных скоростях  $V_0$ .  $V_0 \cdot V_{Stc} = F/\gamma$ .

Частицы могут находиться в различных начальных условиях. В частности, обладать различной начальной скоростью. При фиксированных значениях  $F$  и  $\gamma$ , в зависимости от величины начальной скорости  $V_0$ , могут реализовываться различные решения уравнения движения. На рис. 3 приведены численные решения уравнений движения для различных начальных условий. Частица, на которую действовала постоянная во времени внешняя сила  $F$ , в момент времени  $t = 0$  находилась в точке с минимальной потенциальной энергией. В зависимости от величины начальной скорости  $V_0$ , частица с течением времени либо переходит в связанное состояние (кривая 1), либо совершает осциллирующее движение и движется со средней во времени скоростью  $\bar{V}_F = \frac{F}{\gamma}$  (кривые 2 и 3). Как видно из рисунка,

существует некоторое критическое значение начальной скорости  $V_{cr}$ . При  $V_0 < V_{cr}$  частица переходит в связанное состояние, а при  $V_0 > V_{cr}$  возникает устойчивое бегущее решение. Как следует из рис. 3 даже значительное отклонение  $V_0$  не влияет на величину  $\bar{V}$ , если не осуществляется переход через критическое значение  $V_{cr}$ .

Величина  $V_{cr}$  зависит от значений  $F$  и  $\gamma$ . На рис. 4 показана диаграмма существования связанных и бегущих решений в зависимости от величины действующей силы  $F$  при фиксированном значении  $\gamma' = 0,141$ . Если  $F$  меньше некоторого критического значения  $F_{cr1}$  в системе возможно только одно локализованное решение. При  $F > F_{cr1}$  возникают два устойчивых решения: локализованное и бегущее. Реализация того или иного решения зависит от начальной скорости  $V_0$ . При  $V_0 < V_{cr}$  - это локализованное решение, а при  $V_0 > V_{cr}$  - бегущее. Пунктирная линия, разделяющая решения, - это зависимость  $V_{cr}(F)$  для данного коэффициента

трения.

На рис. 5 приведена зависимость  $V_{cr}(F)$  для различных значений  $\gamma'$ . Как следует из рисунка, для всех исследованных значений  $\gamma'$  вблизи критической силы величина  $V_{cr}(F)$  изменяется линейно с увеличением силы. Анализ данных компьютерного моделирования так же показывает, что величина  $F_{cr}$  является линейной функцией  $\gamma'$  при малом трении.

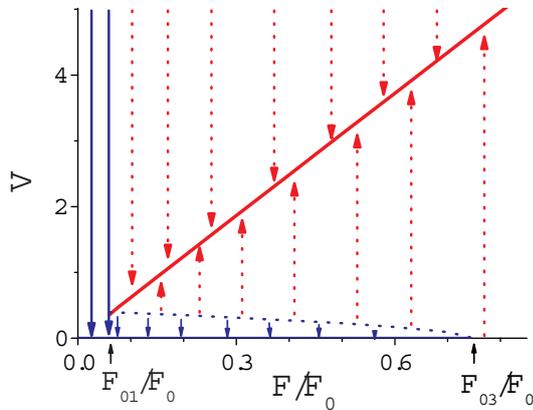


Рис. 4. Диаграмма существования связанных и локализованных решений в зависимости от величины действующей силы  $F$ .  $\gamma' = 0,141$

Стрелками на рисунке показано стремление частицы к стационарному во времени решению. Сплошные линии – бегущее решение, пунктирные линии – локализованное решение. При  $F < F_{01}$  существует только локализованное решение, а при  $F \geq F_{03}$  - только бегущее решение. При промежуточных значениях силы существуют оба решения: при начальных значениях скорости меньше критической частица стремится к точке минимума потенциальной энергии; при больших значениях скорости реализуется бегущее решение со средней скоростью  $F/\gamma$  (сплошная красная линия).  $\gamma' = 0,141$

значениям действующей силы. Каждый из графиков строился по совокупности данных, полученных для различных значений начальных скоростей частицы.

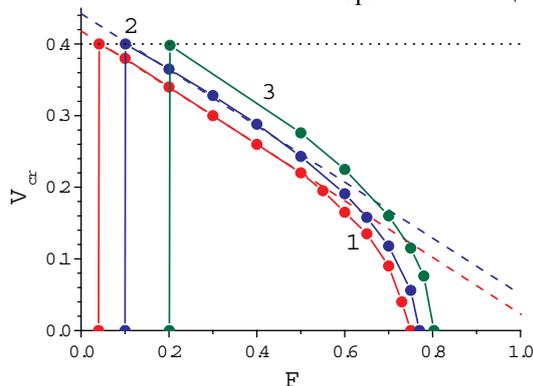


Рис. 5. Изменение критической скорости в зависимости от приложенной силы в отсутствие внешнего шума для различных коэффициентов трения. Штриховыми линиями показана линейная зависимость  $V_{cr}(F)$ . Кривая 1 соответствует  $\gamma' = 0,141$ , 2 –  $\gamma' = 0,354$ , 3 –  $\gamma' = 0,707$ .

Пунктирная линия –  $V_{cr} = V_{cr}^0$

Из рисунка видно, что вблизи стационарных значений  $V = 0$  и  $V = F/\gamma$  ускорение линейно зависит от

Рассмотрим к чему приведет контакт ансамбля частиц с тепловым резервуаром. Обычно при исследовании движения такого ансамбля под воздействием внешней силы основное внимание уделяется термическим флуктуациям этой силы. Классическое рассмотрение этой ситуации приведено в гл. 11 книги Рискена [2]. При контакте с тепловым резервуаром при медленном изменении силы образовывается, так называемая, петля гистерезиса и возникает еще одно критическое значение силы  $F = F_2$ . В точке  $F = F_2$  при стремлении температуры к нулю происходит скачок от нулевой подвижности к конечному значению.

Как было показано выше, не менее важны следующие вопросы. Если частица каким либо образом отклонилась от стационарного решения, к какому из двух стационарных решений она придет? Как быстро осуществляется этот переход? Для ответа на эти вопросы исследуем как происходит переход к стационарному решению в отсутствии теплового шума. На рис. 6 приведено изменение ускорения частиц в зависимости от скорости частицы. Дискретные значения  $\dot{V}_{n+1/2}^{mx}$  ускорения частиц рассчитывалось по разнице двух последовательных во времени максимальных значениях скорости:  $\dot{V}_{n+1/2}^{mx} = \frac{V_{n+1}^{mx} - V_n^{mx}}{t_{n+1} - t_n}$ , где индекс внизу показывает номер дискретных событий. Схематично значения  $V_n^{mx}$  показаны на рис. 3. Представленные кривые соответствуют различным

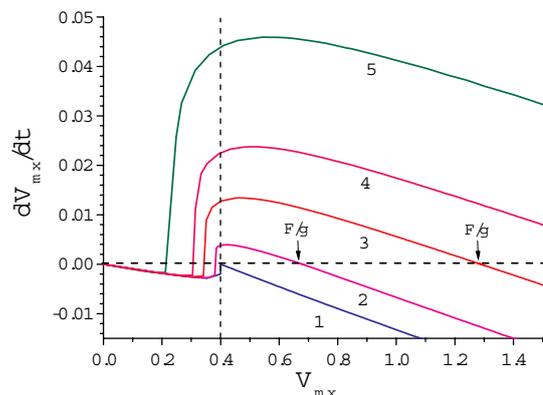


Рис. 6. Ускорения в зависимости от величины скорости для различных значений действующей силы. Стрелками показано точки с нулевым ускорением.

$T=0$ . 1 –  $F = 0,04F_0$ , 2 –  $F = 0,098F_0$ , 3 –  $F = 0,2F_0$ , 4 –  $F = 0,3F_0$ , 5 –  $F = 0,5F_0$ .

скорости. При отклонении скорости от стационарных значений возникает ускорение которое “подталкивает” частицу к стационарному решению. При  $V < V_{cr}$  ускорение пропорционально  $\gamma/2$ , а при  $V > V_{cr}$  –  $\gamma$ . При контакте с тепловым резервуаром частицы ансамбля находятся под воздействием случайной силы и могут приобретать скорости которые отличаются от двух возможных стационарных значений ( $V = 0$  или  $V = F/\gamma$ ). Изменение функции распределения частиц по скоростям зависит от начального их распределения и действующего ускорения.

### ЭВРИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ АНСАМБЛЯ ЧАСТИЦ В СИСТЕМАХ С МАЛОЙ ДИССИПАЦИЕЙ

Исходя из результатов компьютерного моделирования, сформулируем следующую эвристическую модель движения ансамбля частиц в системах с малой диссипацией. Будем считать, что частицы находятся в некотором эффективном потенциале скоростей  $W(V)$ , зависящем от величин  $\gamma$  и  $F$ . Внешне этот подход похож на метод, предложенный в книге [1]. Однако, вводимый потенциал имеет совсем другую размерность ( $[V]^2/[t]$ ). Как это будет показано далее, предлагаемый подход приводит к качественно другим результатам, чем в [1]. Данная модель скорее отвечает модели движения активных частиц для некоего частного вида потенциала [11].

Движение ансамбля частиц можно описать следующими уравнениями:

$$\begin{cases} \dot{x} = V \\ \dot{V} = -\frac{\partial W(V, F)}{\partial V} + \zeta(t) \end{cases}, \quad (7)$$

где флуктуации случайной величины удовлетворяют соотношению:

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2Q\delta(t-t') = 2\frac{\gamma kT}{m}\delta(t-t'). \quad (8)$$

Исходя из (6) и данных приведенных на рис. 2 и рис. 6 постулируем следующий вид эффективного потенциала:

$$W(V) = \begin{cases} \frac{\gamma}{2}V^2 + c; V < V_{cr} \\ \frac{\gamma}{2}\left(V - \frac{F}{\gamma}\right)^2 + d; V > V_{cr} \end{cases}, \quad (9)$$

где  $c$  и  $d$  некоторые константы, которые могут быть получены из следующих условий.

Из непрерывности потенциала в точке  $V_{cr}$  следует:

$$\frac{\gamma}{2}V_{cr}^2 + c = \frac{\gamma}{2}\left(V_{cr} - \frac{F}{\gamma}\right)^2 + d. \quad (10)$$

Исходя из данных рис. 5, полагая, что при  $V > V_{cr}$  существует два состояния с одним и тем же значением  $W$ , получаем условие нормировки функции распределения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} N(V)dV = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{V_{cr}} \exp\left(-\frac{m}{2kT}V^2 - c\frac{m}{\gamma kT}\right)dV + 2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \int_{-V_{cr}}^{\infty} \exp\left(-\frac{m}{2kT}\left(V - \frac{F}{\gamma}\right)^2 - d\frac{m}{\gamma kT}\right)dV = 1 \quad (11)$$

Это - второе условие для определения констант  $c$  и  $d$ . Проведя интегрирование, получаем:

$$\exp\left(-c\frac{m}{\gamma kT}\right) \left[1 + \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{m}{2kT}}V_{cr}\right)\right] + 2\exp\left(-d\frac{m}{\gamma kT}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{m}{2kT}}\left(V_{cr} - \frac{F}{\gamma}\right)\right)\right] = 1. \quad (12)$$

Совместив уравнения (10)- (11) можно получить величины  $c$  и  $d$ .

В выражения (10) и (12) входит величина  $V_{cr}$ , которую необходимо вычислить. Исходя из данных компьютерного моделирования (рис. 5), значение  $V_{cr}(F, \gamma)$  вблизи  $F_{01}$  можно аппроксимировать следующим

образом:

$$V_{cr}(F, \gamma) = V_{cr}^0 \cdot \left( \alpha + \beta \gamma' - \varepsilon \frac{F}{F_0} \right). \quad (13)$$

Величина  $V_{cr}^0$  соответствует скорости частицы, необходимой чтобы преодолеть потенциальный барьер в отсутствии трения:  $V_{cr}^0 = \left( \frac{2U_0}{m} \right)^{1/2}$ . Безразмерные константы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\varepsilon$  являются подгоночными параметрами модели. Подгонка констант осуществлялась методом наименьших квадратов только по одной зависимости  $\langle V \rangle(F)$  для температуры  $T' = 0,129$  и  $\gamma' = 0,141$ . В дальнейших расчетах эти константы не изменялись. Их значения равны:

$$\alpha = 0,88; \beta = 0,60; \varepsilon = 2,125. \quad (14)$$

Проведя интегрирование можно получить аналитические выражения для функции распределения по скоростям. Зная  $N(V)$  и используя (5) найдем среднюю скорость частиц. Выражения для средних скоростей можно получить как аналитически, проведя интегрирование, так и численно. Графики функций  $\langle V \rangle$  в зависимости от величины действующей силы приведены в нижней части рис. 7. Маркеры на рисунке соответствуют данным компьютерного моделирования уравнений Ланжевена (1)-(2), а непрерывные кривые – расчетам по формулам (10) –(13). Видно, что недодемпфированное движение частиц в пространственно периодическом потенциале может быть описано как передемпфированное движение в двухъямном потенциале скоростей (9). Результаты расчетов обоими методами дают практически не различающиеся друг от друга данные как для температуры  $T = 120\text{K}$  ( $T' = 0,129$ ), так и для температуры  $360\text{K}$  ( $T' = 0,388$ ).

Если пренебречь перекрытием гауссиан (заменив в уравнении (11)  $V_{cr}$  на  $\infty$ ), то выражение для расчета средней скорости существенно упростится. И для  $\langle V \rangle$  получаем:

$$\langle V \rangle = \frac{F}{\gamma} \frac{2}{2 + \exp\left(-\frac{m}{\gamma k T} F \left( \frac{F}{2\gamma} - V_{cr} \right)\right)}. \quad (15)$$

Аппроксимация по этой формуле приведена на рис. 7 штриховой линией. Видно, что результаты вычислений соответствуют данным компьютерного моделирования.

Предложенный вид эффективного потенциала не только описывает изменение  $\langle V \rangle(F)$  с температурой, но и с изменением коэффициента трения. На рис. 8 приведены расчеты температурной зависимости подвижности частиц для трех различных значений  $\gamma$ . Кривые 1 и 2 соответствуют значению  $\gamma = 0,02$ . Для кривой 3  $\gamma = 0,04$ , а для кривой 4 -  $\gamma = 0,01$ . Из рисунка видно, что предложенный метод хорошо описывает поведение  $\langle V \rangle(F)$  для различных значений  $\gamma$  в недодемпфированном случае.

Рассмотрим, как предложенная модель описывает особенности температурного поведения диффузии. Используя соотношение Кубо, коэффициент диффузии может быть найден как интеграл от автокорреляционной функции скорости, который может быть записан через дисперсию скорости  $\langle \Delta v^2 \rangle = \langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle$  и корреляционное время  $\tau_{corl}$  [11]:

$$D = \int_0^{\infty} d\tau \langle v(t)v(t+\tau) \rangle = \langle \Delta v^2 \rangle \tau_{corl} = \frac{k}{m} T^* \tau_{corl}. \quad (16)$$

В последнем выражении, аналогично работе [11], введена кинетическая температура  $T^* = \frac{m}{k} \langle \Delta v^2 \rangle$ .

Таким образом, зная кинетическую температуру и корреляционное время, можно получить коэффициент диффузии. Кинетическая температура находится следующим образом:

$$T^* = \frac{m}{k} \int_{-\infty}^{\infty} (V - \langle V \rangle)^2 N(V) dV. \quad (17)$$

Проводя численное интегрирование с полученной ранее функцией распределения  $N(V)$ , построим графики зависимости динамической температуры от действующей силы. Они приведены в верхней части рис. 7.

Проведя упрощение, такие же как и при расчете  $\langle V \rangle$ , для динамической температуры получим простое

аппроксимирующие выражение:

$$T^* = T + \frac{m}{k} \langle V \rangle \left( \frac{F}{\gamma} - \langle V \rangle \right) = T + \Delta T^*. \quad (18)$$

Расчеты по этой формуле приведены на рис. 7 штриховой линией. Как следует из рисунка, данные аналитических расчетов хорошо совпадают с численными решениями.

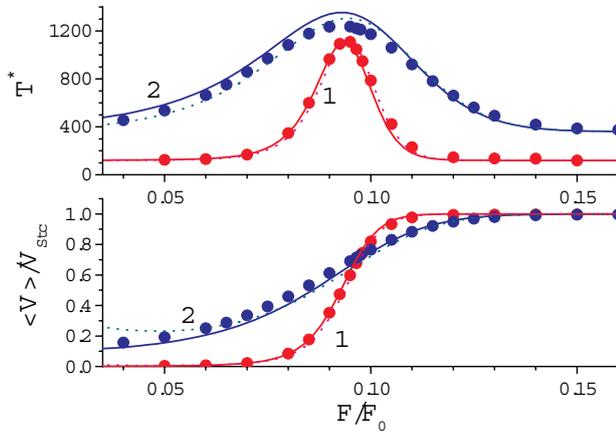


Рис. 7. Изменение кинетической температуры (верхний рисунок) и подвижности (нижний рисунок) в зависимости от приложенной силы. Маркеры – результаты моделирования, сплошные кривые – расчет по формулам (11) – (14), штриховая линия аппроксимация по формулам (15), (17). 1 –  $T' = 0,129$ , 2 –  $T' = 0,388$ .  $\gamma' = 0,141$ .

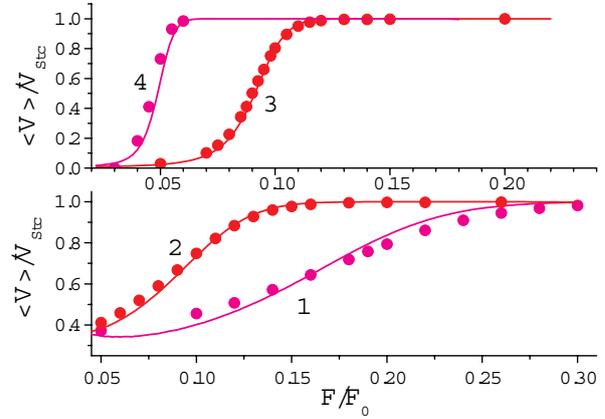


Рис. 8. Изменение средней скорости в зависимости от приложенной силы для различных коэффициентов трения. Кривые соответствуют вычислениям согласно (11)-(14), маркеры – результаты моделирования.

Верхний рисунок –  $T' = 0,194$ , нижний рисунок –  $T' = 0,776$ . кривая 1 –  $\gamma' = 0,282$ , 2 и 3 –  $\gamma' = 0,141$ , 4 –  $\gamma' = 0,071$ .

Анализ результатов свидетельствует о том, что максимальное значение добавки эффективной температуры  $\Delta T_{mx}^*$  приблизительно равно  $U_0/k$  и практически не зависит от величины  $T$ . Максимум  $\Delta T^*$  наблюдается при одном и том же значении  $F/F_0$ . Таким образом, в области низких температур ( $T \ll U_0/k$ ), при фиксированном корреляционном времени коэффициент диффузии должен мало изменяться с температурой. В то же время, в работе [3] был обнаружен экспоненциальный рост  $D$  с температурой. Для объяснения этого факта, оценим изменение величины  $\tau_{corl}$  при низких температурах ( $Q \ll \Delta W_{\pm}$ ). Для этого используем теорию скоростей реакции Крамера [12]. Скорости перехода между двумя состояниями  $V_-$  и  $V_+$

равны  $r_- = \frac{\varpi_{cr}\varpi_-}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta W_-}{Q}\right)$  и  $r_+ = \frac{\varpi_{cr}\varpi_+}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta W_+}{Q}\right)$ , где  $\varpi_-^2$  и  $\varpi_+^2$  кривизна потенциала  $W(V)$  в  $n$  точках  $V = 0$  и  $V = \frac{F}{\gamma}$ , а  $\varpi_{cr}^2$  – кривизна потенциала  $W(V)$  в  $V = V_{cr}$ .

Приближенное выражение (9) хорошо описывает эффективный потенциал вблизи его максимумов. Это позволило получить выражения для  $\langle V \rangle$  и  $T^*$ , которые воспроизводят данные моделирования. Однако, как следует из (9), производная потенциала  $W(V)$  вблизи  $V = V_{cr}$  имеет разрыв. Поэтому мы не можем напрямую использовать (9) для расчета  $\varpi_{cr}^2$ . Однако, считая  $\varpi_{cr}^2$  конечной величиной, мы можем выяснить вид температурной зависимости  $\tau_{corl}$ . Согласно [12] корреляционное время будет равно:  $\tau_{corl} = \frac{1}{r_- + r_+}$ .

Так как из вида потенциала  $W(V)$  (9) следует  $\varpi_-^2 = \varpi_+^2$  и для корреляционного времени получим:

$$\tau_{corl}^* = \tau_{corl} / \tau_0 = \exp\left(\frac{mV_{cr}^2}{2kT}\right) \left[ 1 + \exp\left(\frac{mF}{2\gamma kT} \left( V_{cr} - \frac{F}{2\gamma} \right) \right) \right], \quad (19)$$

где  $\tau_0 = \frac{\varpi_+ \varpi_{cr}}{2\pi}$ .

На рис 9. приведены графики величины  $\tau_{corl}^*$  в зависимости от  $F$  для различных температур. Как следует из (19) в точке максимума величина  $\tau_{corl}$  экспоненциально растет с уменьшением температуры.

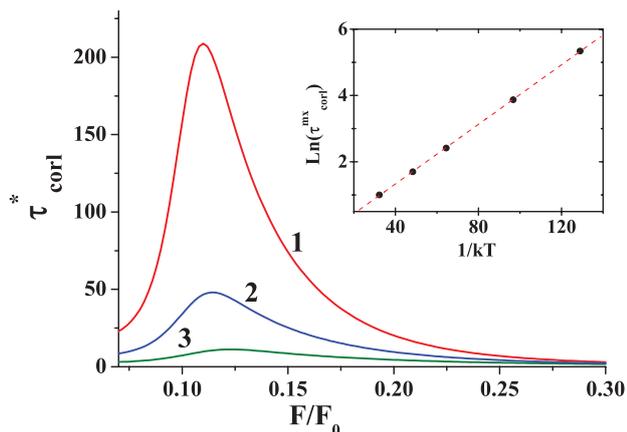


Рис. 9. Изменение  $\tau_{corl}^*$  в зависимости от действующей силы для различных температур.

1 –  $T = 90$  К ( $T' = 0,097$ ), 2 –  $T = 120$  К ( $T' = 0,129$ ), 3 –  $T = 180$  К ( $T' = 0,194$ ).  $\gamma' = 0,141$ .

На вставке - Изменение логарифма максимальной величины  $\tau_{corl}^*$  от обратной температуры.

на широком классе физических систем.

Этот результат полностью совпадает с результатами компьютерного моделирования в работе [3] где корреляционное время экспоненциально возрастало с уменьшением  $T$ .

### ВЫВОДЫ

Таким образом, нами показано, что транспорт частиц в пространственно периодических потенциалах в недодемпфированном случае может рассматриваться как частный случай движения активных броуновских частиц. При этом недодемпфированный случай в пространстве координат может быть сведен к передемпфированному случаю в пространстве скоростей с двухямыным потенциалом. Это позволяет эффективно использовать аналитические методы разработанные для передемпфированного случая. Впервые получены аналитические выражения для средней скорости, динамической температуры и времени корреляции потока частиц хорошо согласующиеся с результатами численного решения уравнений Ланжевена. Эти простые выражения могут эффективно использоваться при планировании, проведении и анализе экспериментов

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Risken H. The Fokker-Planck equation and methods of solution and applications. – Springer, 1989. – 485 p.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. – 2009. – Vol. 81. – P. 337–442.
3. 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.
4. Machura L., Kostur M., Talkner P., et. al. Brownian motors: Current fluctuations and rectification efficiency // Phys. Rev. – 2004.- Vol. E70.- P. 061105.
5. Reimann P., Van den Broeck C., Linke H., Hänggi P., Rubi J.M., Perez-Madrid A. Diffusion in tilted periodic potentials: Enhancement, universality, and scaling // Phys. Rev. – 2002.- Vol. E 65. – P. 031104.
6. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Anomalous Temperature Dependence of Diffusion in Crystals in Time-Periodic External Fields // JETP Letters. – 2012. - Vol.95, №3. – P. 137–142.
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. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential // Europhys. Lett. – 1999. – Vol. 48 (5). - P.491-497.
9. 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.
10. Lindenberg K., Sancho J.M., Lacasta A.M., Sokolov I.M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol.98. – P.020602.
11. Lindner B., Nicola E.M. Critical Asymmetry for Giant Diffusion of Active Brownian Particles // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 101. – P.190603.
12. Gardiner C.W. Handbook of stochastic methods for Physics, chemistry and natural sciences (Springer-Verlag), 1981.

PACS 25.75-q 25.75-Dw

## РОЖДЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ПИОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ ПРИ ЭНЕРГИЯХ $\sqrt{S_{NN}} = 17,3$ ГэВ. СРАВНЕНИЕ С МОДЕЛЯМИ

**В.А. Кизка<sup>1</sup>, А.Ю. Корчин<sup>1,2</sup>, В.С. Трубников<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»  
 61108, Харьков, ул. Академическая 1, Украина

<sup>2</sup>Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина  
 61022, Харьков, пл. Свободы 4, Украина  
 e-mail: [Victor.Trubnikov@cern.ch](mailto:Victor.Trubnikov@cern.ch)

Received September 2, 2013

Представлена зависимость фактора ядерной модификации от поперечного импульса заряженных пионов, рождённых в периферических столкновениях ионов свинца при энергии  $\sqrt{S_{NN}} = 17,3$  ГэВ. Фактор ядерной модификации определён как для положительно и отрицательно заряженных пионов, так и для средней продукции заряженных пионов. Экспериментальные результаты сравниваются с моделями UrQMD2.3, EPOS1.67 и HIJING1.7. Сравнительный анализ, позволяет сделать вывод, что модель EPOS1.67 описывает рождение заряженных пионов наиболее адекватно для данного рода столкновений.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** образование заряженных пионов, фактор ядерной модификации, столкновения ионов при высоких энергиях

## CHARGED PION PRODUCTION IN HEAVY ION COLLISIONS AT $\sqrt{S_{NN}} = 17,3$ GeV. COMPARISON WITH MODELS

V.A. Kizka<sup>1</sup>, A.Yu. Korchin<sup>1,2</sup>, V.S. Trubnikov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Science Center «Kharkov Institute of Physics and Technology»  
 1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine

<sup>2</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University  
 Svobody Sq. 4, 61022, Kharkiv, Ukraine

We present nuclear modification factor as a function of transverse momentum for charged pions, produced in peripheral collisions of lead ions at  $\sqrt{S_{NN}} = 17,3$  GeV. Results are presented for positive pions, negative pions and average pion production. Experimental results are compared to models UrQMD2.3, EPOS1.67 and HIJING1.7. Comparative study allow us to conclude that simulation of charged pion production within EPOS1.67 has better agreement with experimental data for this type of collision.

**KEY WORDS:** charged pion production, nuclear modification factor, high energy heavy ion collisions

## НАРОДЖЕННЯ ЗАРЯДЖЕНИХ ПІОНІВ В ЗІТКНЕННЯХ ВАЖКИХ ІОНІВ ПРИ ЕНЕРГІЇ $\sqrt{S_{NN}} = 17,3$ ГеВ.

### ПОРІВНЯННЯ З МОДЕЛЯМИ

V.A. Kizka<sup>1</sup>, O.Yu. Korchin<sup>1,2</sup>, V.S. Trubnikov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Національний науковий центр „Харківський фізико-технічний інститут”  
 61108, Харків, вул. Академічна 1, Україна

<sup>2</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
 майдан Свободи 4, 61022, Харків, Україна

Наводяться експериментальні данні що до залежності фактора ядерної модифікації від поперечного імпульсу для заряджених піонів, утворених в зіткненнях важких іонів Pb<sup>208</sup> при енергії  $\sqrt{S_{NN}} = 17,3$  ГеВ. Дані порівнюються з сучасними теоретичними моделями (UrQMD2.3, EPOS1.67, HIJING1.7), що описують динаміку процесів зіткнення важких іонів. Показано, що модель EPOS1.67 дає кращу згоду з експериментом, ніж моделі UrQMD2.3 і HIJING1.7.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** утворення заряджених піонів, фактор ядерної модифікації, зіткнення іонів при високих енергіях

Экспериментальное и теоретическое изучение образования частиц в столкновениях ионов при высоких энергиях, осуществляемое в том числе в рамках поиска предполагаемого фазового перехода между ординарной ядерной материей и кварк-глюонной плазмой (КГП), является одним из основных направлений современной физики высоких энергий. Поиски флуктуаций различных наблюдаемых величин проводятся на предмет выявления возможных сигналов предполагаемой смешанной или партонной фазы, а так же критической точки фазового перехода. Экспериментальные установки, сложнейшие детекторы больших международных коллабораций, в настоящее время изучают рождение частиц в столкновениях ионов во всём спектре доступных энергий — начиная от  $\sqrt{S_{NN}} \approx 7$  ГэВ на ускорителе RHIC (Брукхейвен, США) в рамках программы сканирования низких энергий и заканчивая гигантскими 7 ТэВ на Большом Адронном Коллайдере (ЦЕРН, Швейцария). Параллельно с проводимыми экспериментами, развивается феноменологические и теоретические

модели описания ядерной среды в сверхсжатом и сверхнагретом состоянии. Несмотря на последние достижения, на данный момент нет одной универсальной теоретической модели, которая бы одинаково хорошо описывала все наблюдаемые эффекты, регистрируемые в ультрарелятивистских столкновениях ионов. В такой ситуации, сравнение различных моделей с экспериментальными данными, с целью определения наиболее точных из них, является одной из приоритетных задач.

Целями данной статьи являются нахождение значений фактора ядерной модификации для заряженных пионов, как функции поперечного импульса, а также детальное сравнение этих экспериментальных результатов с теоретическими моделями.

Столкновения ионов высоких энергий приводят к множественному рождению частиц. Подавляющее число рожденных адронов являются нейтральными и заряженными пионами. Исходя из этого, изучение рождения пионов дает нам информацию как об общих характеристиках столкновений, так и служит необходимым компонентом в изучении разнообразных эффектов (как например, эффект усиления рождения странных частиц).

Одной из наиболее удобных величин для изучения множественного рождения частиц является так называемый фактор ядерной модификации (ФЯМ). Эта величина соотносит рождение определённого типа частиц в столкновениях ионов с рождением таких же частиц в элементарных столкновениях (p+p) при той же энергии. Это позволяет выявить и изучить отклонения от идеализированной ситуации, в которой столкновения ионов можно представить как суперпозицию элементарных p+p и p+n взаимодействий. Фактор ядерной модификации зависит от центральности столкновения и определяется как

$$R_{AA} = \frac{1}{N_{BinCol}} \frac{d\sigma_{Pb+Pb \rightarrow \pi^{\pm}+X} / dp_T d\eta}{d\sigma_{p+p \rightarrow \pi^{\pm}+X} / dp_T d\eta} \cdot$$

Здесь  $p_T$  — поперечный импульс, а  $\eta$  — псевдорэпидити, нормировка, а именно число бинарных взаимодействий  $N_{BinCol}$ , не измеряется экспериментально и является, вообще говоря, модельно-зависимой величиной. Эта величина определяется при помощи модели Глаубера [1] с учетом сорта сталкивающихся ионов, энергии и центральности соударения.

В данной статье мы определяем ФЯМ для заряженных пионов, рожденных в периферических столкновениях ионов свинца при энергии взаимодействия  $\sqrt{s_{NN}} = 17,3$  ГэВ. Набор анализируемых данных осуществлялся на ускорителе SPS в рамках эксперимента NA49 [2]. Исследуемые события были отобраны по критерию множественности заряженных частиц  $150 < M < 300$  (что соответствует центральности столкновений 43-58%) из общего числа свинец-свинцовых столкновений, набранных при рассматриваемой энергии с триггером “minimum bias”. Исходя из выбранной множественности, нами в рамках модели Глаубера вычислены основные характеристики анализируемых столкновений.

Таблица

Основные параметры проанализированных столкновений [3]

Множественность, M	Прицельный параметр, b	Количество нуклонов участников столкновения, $N_p$	Количество бинарных взаимодействий $N_{BinCol}$
$150 < M < 300$	$\langle b \rangle \approx 10,4$ Фм	$\langle N_p \rangle \approx 68$	$\langle N_{BinCol} \rangle \approx 74,4$

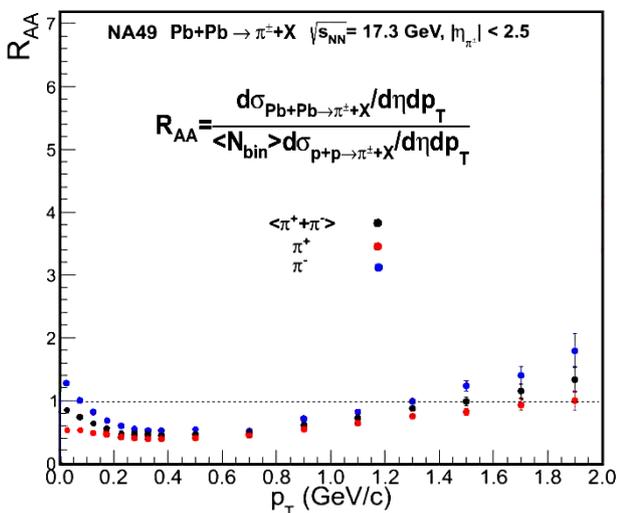


Рис. 1. Фактор ядерной модификации как функция поперечного импульса

Для вычисления ФЯМ необходима информация о рождении заряженных пионов в столкновениях p+p при той же энергии. Для этой цели нами были использованы результаты из [4]. Эти подробные и точные данные были получены на том же детекторе, в рамках того же эксперимента, что позволяет проводить непосредственное сравнение (без опасений появления систематических ошибок, связанных с техническими различиями детекторов и т.д.)

На рис. 1 представлены результаты вычисления фактора ядерной модификации для положительных и отрицательных пионов, а также для их полусуммы, как функции поперечного импульса.

Высокая способность детектора регистрировать заряженные частицы позволяет получить результаты, начиная с очень малых поперечных импульсов  $p_T \approx 0,025$  ГэВ/с и до

$p_T \approx 1,9$  ГэВ/с. Как видно из графика, ФЯМ для заряженных пионов имеет минимум при  $p_T \approx 0,4$  ГэВ/с и возрастает как с увеличением поперечного импульса, так и с его уменьшением, оставаясь меньше единицы (для отрицательных пионов в промежутке  $0,08$  ГэВ/с  $< p_T < 1,3$  ГэВ/с, а для положительных пионов практически во всём промежутке рассматриваемых  $p_T$ ).

Рост ФЯМ с увеличением поперечного импульса является проявлением известного эффекта Кронина [5]. Этот эффект заключается в увеличении количества рожденных частиц на один нуклон сталкивающихся адронов за счет множественных партонных перераспределений, посредством которых продольные составляющие импульса трансформируются в поперечные. Ярче всего он проявляется в промежутке поперечных импульсов  $1$  ГэВ/с  $\leq p_T \leq 6$  ГэВ/с и детально изучается в настоящее время на ускорителях RHIC и LHC [6]. Увеличение ФЯМ при малых поперечных импульсах предположительно объясняется вкладом от последовательных распадов нуклонных резонансов с образованием заряженных пионов малых импульсов в конечном состоянии.

### СРАВНЕНИЕ ФАКТОРА ЯДЕРНОЙ МОДИФИКАЦИИ С МОДЕЛЯМИ EPOS, HIJING и UrQMD

Полученные значения ФЯМ мы сравниваем с тремя моделями, наиболее часто используемыми для моделирования столкновений ионов высоких энергий

Модель UrQMD [7] применяется для моделирования столкновений ионов при энергии взаимодействия от  $\sqrt{s_{NN}} = 100$  МэВ и выше. Рассматриваемая нами версия - модель UrQMD2.3 является сложной комбинацией релятивистского уравнения Больцмана-Уэлингга-Уленбека (с цветными струнами) для описания так называемых "мягких КХД взаимодействий" и модели RYTHIA 6.4 (с функциями распределения партонов STEQ5L) для описания жестких КХД взаимодействий. Эта модель не предусматривает качественного изменения ядерной среды в сверхжидком и сверхнагретом состоянии.

Модель HIJING1.7 [8] применима начиная с энергии  $\sqrt{s_{NN}} = 4$  ГэВ и выше. Основной её принципиальной особенностью является описание образования и фрагментации партонных струй и мини-струй. Для описания "мягких" процессов эта модель использует комбинацию теории Редже и дуальной партонной модели [9]. Для описания жестких процессов в КХД, как и в предыдущем случае, используется RYTHIA 6.4. Модель HIJING предусматривает эффект подавления партонных струй в сверхплотной ядерной среде. Отметим, что параметр потери энергии для глюонов струи в этой модели выбирается  $\varepsilon = 2$  ГэВ/ферми, а для кварков -  $\varepsilon = 1$  ГэВ/ферми.

Модель EPOS1.67 [10] применима для моделирования столкновений от энергии  $\sqrt{s_{NN}} = 10$  ГэВ и выше. Мягкие процессы в модели EPOS 1.67 описываются при помощи теории Грибова-Редже [11]. Для описания жестких КХД процессов используется модели RYTHIA 6.4 (с функциями распределения партонов STEQ6). Эта модель предполагает, что при столкновении ионов образуется сверхплотная внутренняя область, находящаяся в состоянии деконфайнмента и заполненная цветными струнами, кварками, дикварками и т. д. Внутренняя область окружена периферической оболочкой из адронов – так называемой короной.

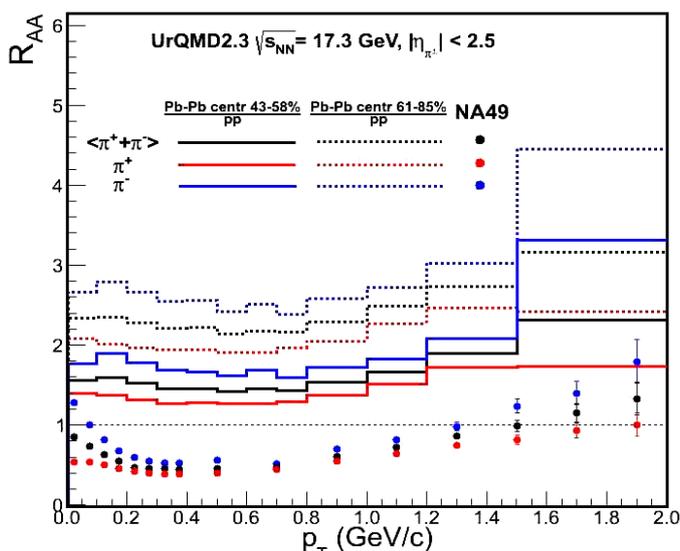


Рис. 2. Сравнение ФЯМ для заряженных пионов, рассчитанного в рамках модели UrQMD 2.3 с экспериментальными значениями

видно, эта модель довольно хорошо описывает поведение ФЯМ для поперечных импульсов от  $p_T \approx 0,07$  ГэВ/с до  $p_T \approx 1,2$  ГэВ/с. Затем, однако, демонстрирует намного более резкий рост с увеличением  $p_T$ , в сравнении с экспериментальными значениями. Исходя из этого, можем утверждать, что модель HIJING 1.7 может быть успешно применима для описания образования заряженных пионов в мягких процессах то есть с поперечными

На рис. 2-4 представлены результаты полученные в рамках моделей UrQMD 2.3, HIJING 1.7 и EPOS 1.67 в сравнении с экспериментальными значениями ФЯМ.

Для каждой из трёх моделей мы проводим сравнение для двух центральностей (43-58% и 61-85%) с целью проверки внутренней согласованности модели и изучения влияния центральности на результаты моделирования.

Как видно из рис. 2, согласия модели UrQMD 2.3 с экспериментальными результатами нет ни при каких значениях поперечного импульса (а также ни для одной из центральностей). Вместо этого можно наблюдать систематическое завышение теоретической величины ФЯМ. И хоть характер модельной кривой схож с экспериментальной, наблюдается явная переоценка рождения заряженных пионов в столкновениях тяжелых ионов. На рис. 3 представлены результаты полученные в рамках модели HIJING 1.7. Как

импульсами до  $p_T \leq 1,2$  ГэВ/с. Модель не акцентирует внимание на состоянии среды – то есть в данном интервале поперечных импульсов  $p_T = 0,07$  ГэВ/с –  $1,2$  ГэВ/с модель указывает на доминирующий процесс взаимодействий нуклонов, в которых рождается партонная струя, и партоны струи могут взаимодействовать как с адронами так и с партонами других струй - вопрос о фазе среды остается в данной модели открытым.

Представленное на рис. 4 сравнение экспериментальных результатов и результатов моделирования в рамках модели EPOS 1.67 выявляет наилучшее согласие из трёх рассмотренных нами моделей. За исключением области малых  $p_T$  ( $p_T < 0,175$  ГэВ/с), теоретические и экспериментальные кривые находятся в пределах 15-20% расхождения во всей области  $p_T$ , демонстрируя сходное поведение. Хотелось бы так же отметить, что наибольшего согласия удалось достичь для варианта, при котором в модели EPOS 1.67 предусматривается фазовый переход ядерной материи и образование кварк-глюонной плазмы (КГП). И, несмотря на то, что в рассматриваемых периферических столкновениях образования КГП не происходит, это может послужить косвенным аргументом в поддержку правильности теоретических идей, заложенных в эту модель. Проверкой этого будет изучение центральных столкновений и сравнение с теоретическими моделями.

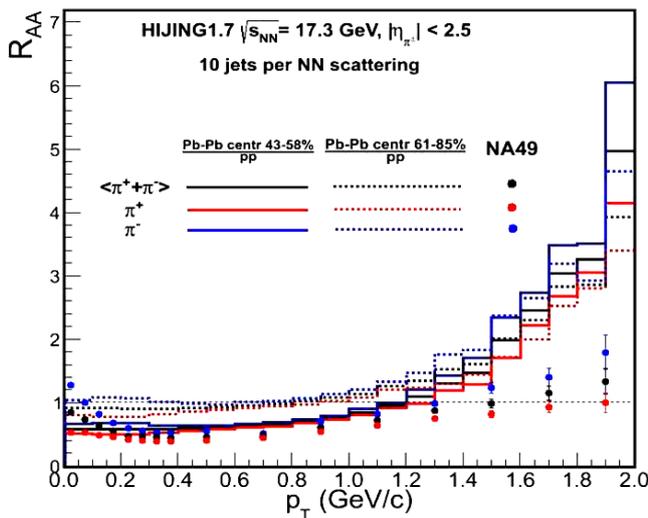


Рис. 3. Сравнение ФЯМ для заряженных пионов, рассчитанного в рамках модели HIJING 1.7 с экспериментальными значениями

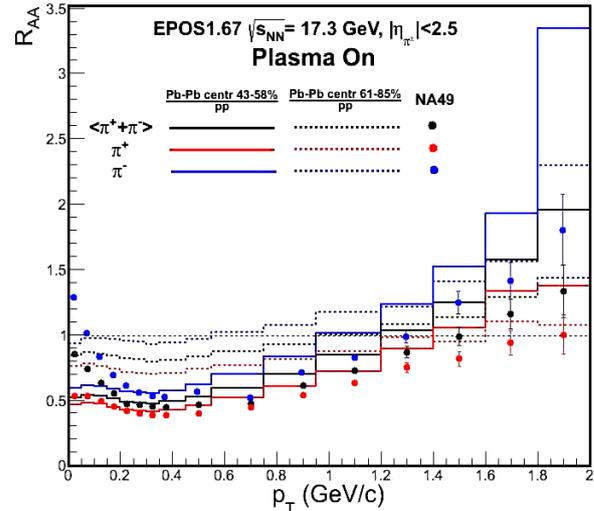


Рис. 4. Сравнение ФЯМ для заряженных пионов, рассчитанного в рамках модели EPOS 1.67 с экспериментальными значениями

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами представлен фактор ядерной модификации  $R_{AA}$ , как функция поперечного импульса для заряженных пионов образованных в периферических столкновениях ионов свинца при энергии  $\sqrt{s_{NN}} = 17.3$  ГэВ. Проведено сравнение экспериментальных значений ФЯМ со значениями полученными с помощью генераторов событий Монте-Карло UrQMD 2.3, HIJING 1.7 и EPOS 1.67. Из вышеперечисленных моделей, модель EPOS 1.67 имеет наибольшее согласие с рассмотренными экспериментальными данными.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Michael L., Miller K., Reyers S.J., Sanders P., Steinberg Glauber Modeling in High Energy Nuclear Collisions // Ann.Rev.Nucl.Part.Sci. – 2007. – Vol.57. – P.205; nucl-ex/0701025.
2. Afanasiev S. et al. The NA49 Large Acceptance Hadron Detector // Nucl.Instrum.Meth. – 1999. – Vol.A430. – P.210-244.
3. Trubnikov V.C. Rozhdenie zaryazhennykh pionov v stolkoveniyakh tyazhelykh ionov pri energii uskoritelya SPS // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2012. - №1025. – Iss.4(56). - S.107-110.
4. Alt C. et. al. (the NA49 Collaboration) Inclusive production of charged pions in p+p collisions at 158 GeV/c beam momentum // Eur. Phys. J. – 2006. – Vol.C45. – P.343-381; arXiv:hep-ex/0510009v1.
5. Cronin J.W. et al. Production of hadrons at large transverse momentum at 200, 300, and 400 GeV // Phys. Rev. – 1975. – Vol.D11. – P.3105.
6. Barnafoldi G.G., Papp G, Levai P., Fai G. Cronin Effect at Different Rapidities at RHIC // arXiv:nucl-th/0404012v3.
7. Bass S.A. et al., Microscopic Models for Ultrarelativistic Heavy Ion Collisions // arXiv:nucl-th/9803035v2 2008.
8. Xin-Nian Wang, Gyulassy M. HIJING: A Monte Carlo model for multiple jet production in pp, pA, and AA collisions // Phys.Rev. – 1991. – Vol.D 44. – P.3501.
9. Capella A., Sukhatme U., Tran Thanh Van J. Soft multihadron production from partonic structure and fragmentation function // Z. Physik C Particles and Fields. – 1980. – Vol. 3. – P.329; Ranft J. Hadron production in hadron-nucleus and nucleus-nucleus collisions in the dual Monte-Carlo multichain fragmentation model // Phys. Rev. – 1988. – Vol.D37. – P.1842.
10. Porteboeuf S., Pierog T., Werner K. Producing Hard Processes Regarding the Complete Event: The EPOS Event Generator // arXiv:1006.2967v1 [hep-ph] 2010.
11. Ostapchenko S., Pierog T., Werner K., Drescher H.D., Haldik M. Parton-based gribov-regge theory // Phys. Rep. - 2001.- Vol. 350. – P.93-289; arXiv:hep-ph/0007198.

PACS: 29.27.-a; 29.27.Fh; 61.82.Pv

## ИЗМЕРЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ТОКА ПО ПОПЕРЕЧНОМУ СЕЧЕНИЮ ПУЧКА УСКОРЕННЫХ ИОНОВ

**В.Н. Бондаренко, А.В. Гончаров, В.И. Сухоставец**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»*

*ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*

*E-mail: [goncharov@kipt.kharkov.ua](mailto:goncharov@kipt.kharkov.ua)*

Received June 20, 2013, accepted August 27, 2013

Описана методика измерения плотности тока по поперечному сечению пучка ионов на выходе электростатического ускорителя, основанная на регистрации характеристического рентгеновского излучения, возбуждаемого ионами пучка, от специальной мишени, которая может перемещаться поперек пучка в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Мишень представляет собой диск из алюминия с сердечником из молибдена. При диаметре сердечника 0,3 мм были измерены двумерные распределения плотности в протонном пучке диаметром 3 мм ускорителя «Сокол» ННЦ ХФТИ. Распределения показали заметные отклонения от осевой симметрии. Полученные распределения позволяют произвести корректное вычисление эффективной площади пучка и тем самым определять эффективное значение флюенса в экспериментах по ионному облучению в случаях, когда сканирование пучка является нежелательным.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** ионный пучок, распределение плотности тока, флюенс, характеристическое рентгеновское излучение

## MEASUREMENT OF 2D CURRENT DISTRIBUTION IN THE FAST ION BEAM

**V.N. Bondarenko, A.V. Goncharov, V.I. Sukhostavets**

*National Scientific Center «Kharkov Institute of Physics and Technology»*

*1, Akademicheskaya st., Kharkov 61108, Ukraine*

We present a technique for measurement of current density distribution in cross-section of ion beam of electrostatic accelerator. The technique is based on the detection of ion induced X-ray emission from special target that may be moved across the beam in two mutually perpendicular directions. The target consists of an aluminium disk with molybdenum core. 2D current density distributions were measured in a 3 mm diameter proton beam of the «Sokol» accelerator at NSC KIPT with the use of such target with 0.3 mm molybdenum core. Those distributions show appreciable deviation from axial symmetry. The inferred distribution allow to accurately evaluate the beam effective area. Thereby the effective value of fluence in ion beam irradiation experiments may be calculated under conditions when beam scanning is undesirable.

**KEY WORDS:** ion beam, current density distribution, fluence, characteristic X-rays

## ВИМІРЮВАННЯ РОЗПОДІЛУ ГУСТИНИ СТРУМУ ПО ПОПЕРЕЧНОМУ ПЕРЕРІЗУ ПУЧКА ПРИСКОРЕНИХ ІОНІВ

**В.М. Бондаренко, О.В. Гончаров, В.І. Сухоставець**

*Національний Науковий Центр «Харківський фізико-технічний інститут»*

*вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*

Описана методика вимірювання густини струму по поперечному перерізу пучка іонів на виході електростатичного прискорювача, що базується на реєстрації характеристичного рентгенівського випромінювання, що збуджується іонами пучка, від спеціальної мішені, яка може переміщуватись поперек пучка в двох взаємно перпендикулярних напрямках. Мишень представляє собою диск з алюмінію з сердечником з молибдену. При діаметрі сердечника 0,3 мм були виміряні двомірні розподіли густини в протонному пучку діаметром 3 мм прискорювача «Сокол» ННЦ ХФТИ. Розподіли показали суттєві відхилення від осової симетрії. Одержані розподіли дозволяють провести коректний розрахунок ефективної площі пучка і, тим самим, визначити ефективні величини флюенсу в експериментах по іонному опромінюванню у випадках, коли сканування пучка є небажаним.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** іонний пучок, розподіл густини струму, флюенс, характеристичне рентгенівське випромінювання

Пучки ускоренных ионов широко применяются для модификации свойств материалов, изменения их электрических, адгезионных, прочностных и других характеристик [1-3]. Тем не менее, детали процессов взаимодействия ионных пучков с веществом еще далеко не выяснены, и еще не созданы модели, позволяющие делать количественные прогнозы в изменении свойств материалов под облучением. Поэтому экспериментальные исследования в этом направлении продолжают.

Исследование эволюции структуры материалов в зависимости от флюенса облучения является одним из основных экспериментальных подходов в радиационной физике. Особенно сложным является поведение под облучением таких материалов, как полимеры. В первую очередь, это связано со сложностью структуры самих полимеров, сформированную в виде длинных макромолекул и включающую в себя атомы нескольких химических элементов. В таких материалах под облучением происходит изменение не только структуры, но и самого элементного состава, причем оба процесса взаимосвязаны.

Как правило, экспериментальные исследования этих процессов проводятся с использованием ионного

пучка на выходе электростатического ускорителя, который может обеспечить долговременную относительную стабильность тока пучка. Контроль изменения элементного состава полимера под облучением производится в большинстве работ [4-6]. Очевидно, что этот контроль удобнее проводить непосредственно во время облучения, т.е. *in situ*, с помощью регистрации вторичного излучения, возникающего при бомбардировке образцов первичным пучком. Так в работах [4-5] для такого анализа использовалась спектрометрия обратно рассеянных ионов, а в работе [6] – спектрометрия продуктов ядерных реакций.

Следует отметить, что обычно распределение плотности тока по поперечному сечению пучка непосредственно на выходе ускорителя является существенно неоднородным. И как следствие, является неоднородным и распределение флюенса в пределах облучаемой области образца. Техническое решение данной проблемы было найдено еще на раннем этапе исследований по облучению материалов. Для этого были разработаны системы сканирования пучка, которые позволяют облучать достаточно большие площади образцов с хорошей степенью равномерности флюенса по облучаемой поверхности. Например, такая система применяется для сканирования пучка на выходе ускорителя “Сокол” ННЦ ХФТИ [7].

Хотя при элементном анализе *in situ* с регистрацией заряженных частиц применение режима сканирования пучка, в принципе, возможно, но это требует очень существенных конструктивных и аппаратных усовершенствований. В противном случае в таком режиме неизбежно будет иметь место заметное ухудшение углового разрешения и, соответственно, энергетического разрешения в измеряемых спектрах. Особенно это относится к спектрометрии обратно рассеянных ионов.

Возможность корректного учета неоднородности флюенса при обработке результатов измерений вторичного излучения в эксперименте по ионному облучению на несканируемом пучке была показана в работе [5]. Для такого учета была введена так называемая эффективная площадь пучка, являющаяся некоторым усреднением, полученным с использованием данных о распределении тока по поперечному сечению пучка.

Целью настоящей работы была разработка методики, позволяющей проводить измерение таких распределений для пучков с поперечным размером, характерным для пучков на выходах обычных электростатических ускорителей (несколько миллиметров).

### ЭКСПЕРИМЕНТ

Измерения проводились на протонном пучке ускорителя “Сокол” на универсальной камере, которая используется в основном для ядерного микроанализа различных материалов с применением нескольких методик анализа (подробное описание камеры было дано в нашей работе [8]).

Для задачи измерения двумерного распределения плотности тока (ДРПТ) в пучке мы остановились на методике, основанной на использовании юстировочных устройств, предназначенных для ориентации камеры мишеней и самих мишеней по отношению к пучку.

Общий вид расположения узлов использовавшейся камеры представлен на рис. 1.

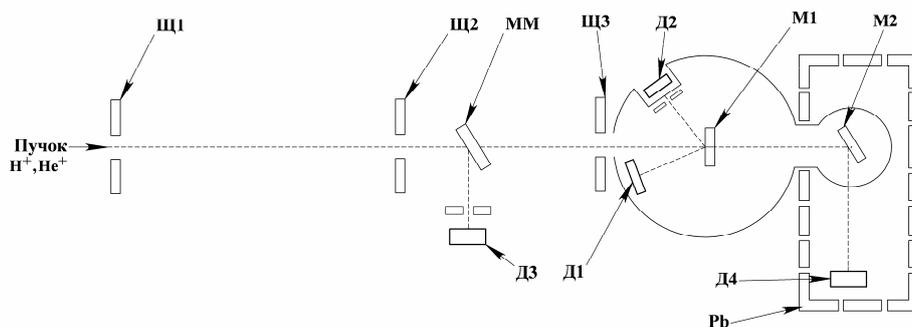


Рис. 1. Схема проведения измерений на универсальной камере на выходе ускорителя “Сокол”

Щ1, Щ2, Щ3 – щели-диафрагмы коллиматора ионного пучка; ММ – мишень монитора количества ионов пучка, прошедших в камеру и попавших на одну из анализируемых мишеней-образцов М1 или М2; Д1 – детектор заряженных частиц (обратно рассеянных ионов или продуктов ядерных реакций); Д2 – Si(Li) детектор рентгеновского излучения; Д3 – поверхностно-барьерный детектор в системе монитора количества ионов; Д4 – детектор  $\gamma$ -квантов; Pb – свинцовая защита для ослабления внешнего  $\gamma$ -фона. В настоящей работе узел М2 мишени и детектор Д4 не использовались.

Система мониторинга количества ионов пучка состоит из вращающейся мишени-прерывателя ММ пучка и детектора Д3 ионов пучка, рассеявшихся на этой мишени. При заданной энергии ионов пучка эта система калибруется по интегральному заряду тока пучка с помощью цилиндра Фарадея, который устанавливается на месте держателя мишеней (положение М1 на рис. 1). Использование этой методики позволяет исключить эффекты, связанные с вариациями тока пучка. Вся эта система вместе со второй щелью Щ2 коллиматора и щелью-скрепером Щ3 помещена в отдельную небольшую камеру, механически жестко связанную с основной камерой, в которой размещен узел мишени М1.

Основная камера установлена на стальной юстировочной плите, которую можно перемещать относительно нижней плиты, жестко связанной со станиной установки. Для измерения ДРПТ была важна плавность такого перемещения. Конструктивно она была обеспечена за счет системы тефлоновых вкладышей, вмонтированных в нижнюю плиту. Поэтому фактически юстировочная плита при перемещении скользит по этим вкладышам.

На первом этапе юстировки системы относительно пучка производится совмещение щелей Щ1 и Щ2 с осью пучка, после чего положения данных щелей фиксируются.

На втором этапе производится юстировка мишенного узла М1 относительно пучка. В вертикальной,  $у$ -плоскости узел может перемещаться за счет передвижения столика, на котором установлен узел внутри камеры. Контроль за таким перемещением осуществляется с помощью микрометра. В горизонтальной,  $х$ -плоскости (это плоскость рис. 1) передвижение мишенного узла производится через боковое смещение юстировочной плиты вместе со всей камерой путем поворота горизонтальной оси камеры вокруг фиксированной вертикальной оси, совмещенной со щелью Щ2. Поскольку расстояние от щели Щ2 до мишени М1 составляло 450 мм, то при ее перемещении в горизонтальном направлении на  $\pm 2$  мм угол поворота камеры не превышал  $\pm 0,25$  градуса.

Специально для контроля за  $х$ -смещением в экспериментах по измерению ДРПТ была использована микрометрическая индикаторная головка. Она была закреплена на краю верхней, юстировочной плиты, а упор головки – на нижней плите. Т.к. головка находилась на 170 мм дальше от щели Щ2, чем мишень М1, то коэффициент пересчета показаний индикаторной головки в горизонтальное перемещение мишени составил 0,726.

Поскольку обе степени перемещения мишенного узла обладают тонкой регулировкой, то их можно было использовать и для измерения ДРПТ непосредственно в области мишени, используя некоторый зонд с размерами много меньше размеров пучка, обычно составляющих несколько миллиметров. Очевидно, что для “картографирования” этого распределения зонд необходимо крепить в том же мишенном узле, который в дальнейшем должен быть использован для установки исследуемых мишеней-образцов, облучаемых пучком, т.е. в положении М1 (см. рис. 1).

В принципе, можно производить непосредственное измерение локального ионного тока с помощью такого “минизонда”. Однако это сопряжено с большими трудностями из-за влияния вторичных электронов и возможных электромагнитных помех. Поэтому представляется более надежным использование регистрации вторичного излучения, возникающего при бомбардировке зонда основным пучком, ДРПТ в котором предполагается измерить. Как известно, существует много разновидностей такого излучения.

Первоначально для данной задачи мы пробовали использовать регистрацию рассеянных протонов и продуктов ядерных реакций. Но практика показала, что лучшего соотношения сигнал/фон можно достичь с помощью спектрометрии РИХЕ (регистрации характеристического рентгеновского излучения (ХРИ), возбужденного на атомах вещества образца под действием первичного ионного пучка). Возможность мониторинга пучка заряженных частиц с помощью такой методики обсуждалась в работе [9].

Именно с ориентацией на такую спектрометрию были, в конечном счете, выбраны материалы для конструкции мишени-зонда. В центре мишени (диска из алюминия диаметром 18 мм) был запрессован тонкий сердечник-зонд (диаметр 0,3 мм) из молибдена в форме цилиндра, поверхность торца которого находилась в одной плоскости с поверхностью диска.

Выбор алюминия в качестве материала, в который запрессовывался зонд, обусловлен тем, что алюминий – это элемент с малым атомным номером, и энергии характеристических линий этого элемента  $Al_{K\alpha}$  и  $Al_{K\beta}$  (1,49 и 1,55 кэВ) находятся в низкоэнергетической части спектра ХРИ. Это позволяет легко подавить загрузку спектрометра по этим линиям с помощью стандартных поглотителей. Кроме того, пластичность алюминия способствует лучшей фиксации, завальцовыванию зонда в материале диска.

В качестве же материала зонда был выбран молибден, характеристические линии которого  $Mo_{K\alpha}$  и  $Mo_{K\beta}$  (17,48 и 19,61 кэВ) в спектрах хорошо отделяются от линий, соответствующих типичным загрязнениям, а также хорошо отделяются друг от друга.

При выборе материала зонда учитывалось также то, что энергия рентгеновских фотонов, соответствующих  $K$ -линиям молибдена, более чем в 2 раза превосходит энергии аналогичных фотонов для элементов группы железа (от титана до цинка). Это в случае больших токов пучка и, соответственно, повышенных загрузок детектора рентгеновского излучения позволяет избежать повышения уровня фона под линиями молибдена, которое может возникнуть за счет совпадения во времени попадания в детектор фотонов, соответствующих линиям группы железа (известное явление pile-up).

Хотя для изготовления диска был взят чистый алюминий (чистота 99,99 %), мягкость этого материала могла, в принципе, привести к загрязнению поверхности мишени с зондом мелкими вкраплениями других более тяжелых элементов –  $Fe$  и др. Поэтому при изготовлении данной мишени были приняты меры по предотвращению загрязнения ее поверхности.

Для измерений спектров ХРИ от мишени с зондом (рис. 2) использовался Si(Li) детектор с энергетическим разрешением 220 эВ по линии 5,9 кэВ. Детектор был установлен под углом  $140^\circ$  относительно пучка (детектор Д2 на рис. 1). Расстояние от мишени до кристалла детектора составляло 100 мм. Все спектры снимались при одной и той же экспозиции по системе мониторинга (ММ/ДЗ).

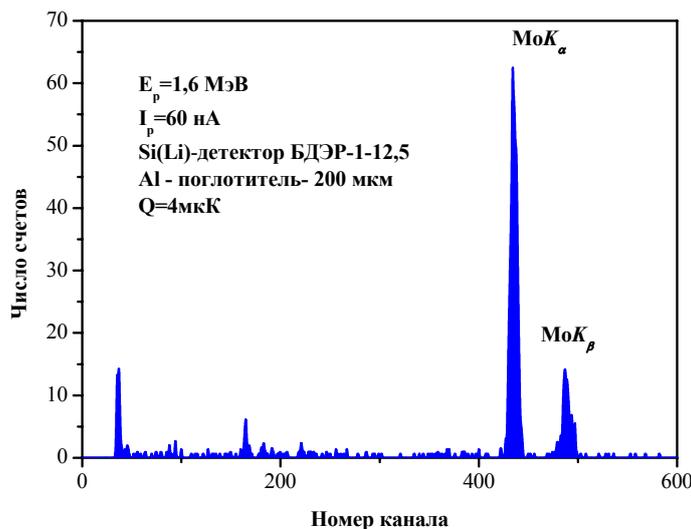


Рис. 2. Типичный спектр характеристического рентгеновского излучения, возбужденного протонным пучком при падении на мишень-зонд.

В настоящей работе для измерения ДРПТ пучка производилось порядка 100-200 измерений спектров ХРИ от мишени-зонда и соответствующих выходов  $Y_{ij}$  по линии  $MoK_{\alpha}$  (площадей пиков) при различных положениях зонда  $(x_i, y_j)$  по отношению к пучку.

Измерения осложнялись также тем, что поскольку для планируемых впоследствии экспериментов по облучению полимеров был нужен небольшой ток (до 60 нА), то ДРПТ нужно было измерять в том же режиме ускорителя и, соответственно, при той же величине тока, чтобы избежать возможной “деформации” этого ДРПТ при перестройке режима. В этих условиях измеренные выходы ХРИ по линии  $MoK_{\alpha}$  изменялись от нуля до 500 отсчетов в зависимости от позиционирования зонда по отношению к пучку. При этом набор каждого такого спектра не превышал одной-двух минут.

### ОБРАБОТКА МАССИВОВ ДАННЫХ

Поскольку измерения спектров являются кратковременными, то существенное влияние могут оказать флуктуации фона под наблюдаемым пиком в спектре ХРИ. В настоящих условиях фон под пиком  $MoK_{\alpha}$  был обусловлен, в основном, комптоновским рассеянием  $\gamma$ -излучения из реакции  $^{27}Al(p, \gamma)$  на ядрах атомов вещества, из которого был изготовлен диск мишени-зонда.

Фон под пиком  $MoK_{\alpha}$  определялся стандартным образом: определялись выходы ХРИ на участках спектра слева и справа от пика, а затем проводилась соответствующая линейная интерполяция фона в область пика. Для уменьшения погрешности определения самого фона эти выходы определялись с использованием суммирования по всем спектрам, измеренным при “картографировании” ДРПТ пучка.

Среднеквадратичные погрешности  $\delta Y_{ij}$  выходов определялись обычным способом: как корни квадратные из величины, представляющей собой площадь пика вместе с фоном под пиком.

Из полученного ДРПТ  $\phi(x, y)$  (в относительных единицах) можно найти эффективную (усредненную) площадь сечения  $A_{eff}$  пучка, введенную в работе [5] для корректного учета неоднородности флюенса при обработке результатов измерений вторичного излучения в эксперименте по ионному облучению на несканируемом пучке:

$$A_{eff} = \frac{\left( \iint_A \phi(x, y) dx dy \right)^2}{\iint_A \phi^2(x, y) dx dy}, \quad (1)$$

где  $A$  – общая площадь, по которой проводится интегрирование. Очевидно, что в частном случае равномерного ДРПТ в пределах сечения пучка ( $\phi = \text{const}$ ) имеет место  $A_{eff} = A$ .

Эффективный флюенс облучения определяется выражением

$$\phi_{eff} = \frac{Q}{zeA_{eff}}, \quad (2)$$

где  $Q$  – интегральный заряд ионов пучка, упавших на облучаемую мишень;  $z$  – степень ионизации ионов (для протонов  $z=1$ );  $e$  – элементарный заряд; эффективная площадь определяется по формуле (1).

Для обработки массива  $Y_{ij}$  выходов ХРИ, измеренных по соответствующей сетке координат  $(x_i, y_j)$ , был

разработан соответствующий код, позволяющий с помощью численного интегрирования числителя и знаменателя выражения (1) вычислять эффективную площадь сечения пучка и погрешность величины  $A_{eff}$ .

Если шаги сетки  $\Delta x$  и  $\Delta y$  постоянны, то интегрирование сводится к простому суммированию, а выражение (1) можно заменить эквивалентным выражением

$$A_{eff} = \frac{\left( \sum_i \sum_j Y_{ij} \right)^2}{\sum_i \sum_j Y_{ij}^2} \Delta x \Delta y. \quad (3)$$

Выражение для средневладратичной погрешности эффективной площади (3), как функции величин  $Y_{ij}$  и  $\delta Y_{ij}$ , мы не приводим в силу его громоздкости. Оно вычисляется по обычным правилам вычисления средневладратичных погрешностей.

### РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты одного из измерений ДРПТ пучка представлены на рис. 3. Во время измерений  $y$ -перемещение мишени-зонда осуществлялось с шагом 200 мкм, а  $x$ -перемещение – с шагом  $250 \times 0,726 = 182$  мкм. Таким образом, величина шагов перемещения была на порядок меньше диаметра протонного пучка (около 3 мм).

Видно, что данное ДРПТ не имеет осевой симметрии. В распределении, наряду с основным “ядром”, проявляется и боковой сателлит.

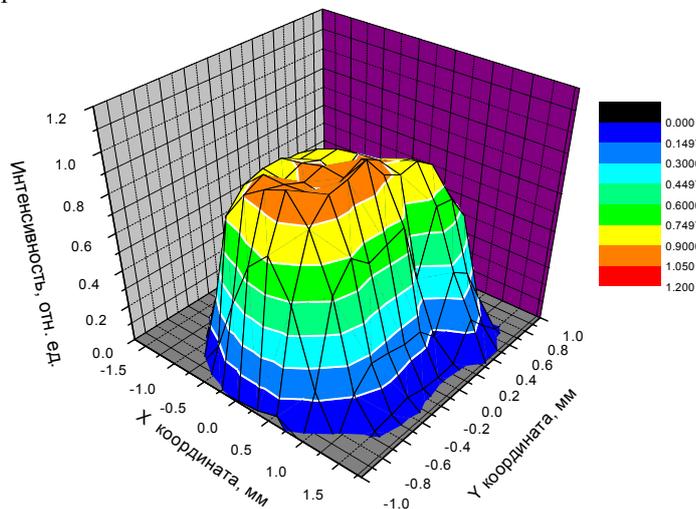


Рис. 3. Двумерное распределение плотности тока по поперечному сечению протонного пучка ускорителя “Сокол” (энергия 1,6 МэВ).

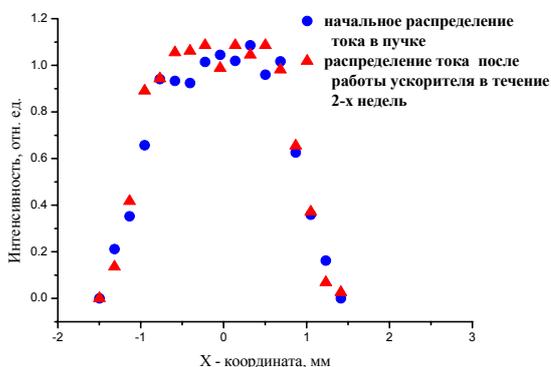


Рис. 4. Сравнение двух измерений распределения плотности тока в протонном пучке ускорителя “Сокол” с интервалом две недели (при одном и том же режиме ускорителя).

Для ДРПТ, представленного на рис. 3, эффективная площадь пучка составила  $2,9 \text{ мм}^2$  со средневладратичной погрешностью 2,6 %. В эту погрешность не включены погрешности установки сетки, по которой производилось измерение выходов  $Y_{ij}$ , поскольку эти погрешности пренебрежимо малы по сравнению со статистическими погрешностями выходов.

Подчеркнем, что после измерения ДРПТ при заданной энергии и переходе уже к облучению конкретного образца полимера режим ускорителя (в частности, напряжение фокусировки) не должен изменяться. Если это условие соблюдается, то ДРПТ пучка ускорителя остается стабильным. Долговременная стабильность этого распределения на ускорителе “Сокол” иллюстрируется рис. 4.

Данная методика измерения ДРПТ в пучке была использована в экспериментах по измерению сечений обеднения ряда полимеров таким элементом, как кислород, при облучении протонным пучком. В наших условиях эта методика зарекомендовала себя как более надежная по сравнению с фотометрией облученных полимерных пленок. Для фотометрии необходим материал, позволяющий проводить экспонирование и фотометрию в линейной области (области пропорциональности между потемнением пленки и флюенсом пучка), обеспечивающей хотя бы два порядка линейности по интенсивности облучения в пределах одного экспонирования. Следует иметь в виду, что поверхностные дефекты пленок типа царапин, углублений и др. могут сильно исказить результаты фотометрии. Конечно

же, для достаточно больших экспозиций эти дефекты перестают быть существенными, но при этом полученное изображение может выходить за пределы линейности, если рассматривать всю засвеченную область: ее центральная часть может оказываться передержанной.

### ВЫВОДЫ

В работе показано, что измерение двумерного распределения плотности тока в ионном пучке электростатического ускорителя может быть осуществлено с помощью достаточно простых средств. Разработанная система является надежной в использовании. Полученные распределения позволяют вычислить эффективную площадь пучка и, тем самым, вместе с системой мониторинга экспозиции, определять эффективный флюенс облучения образцов в эксперименте по ионному облучению на несканируемом пучке. В частности, применение данной методики позволяет при облучении образцов полимеров таким пучком не только проследить в опыте *in situ* кинетику изменения элементного состава облучаемого вещества, но и определять величины соответствующих сечений обеднения полимеров отдельными химическими элементами.

Авторы выражают признательность А.С. Глазуну за содействие в реализации рассмотренной методики, персоналу ускорителя “Сокол” за помощь, оказанную при проведении измерений, а также Утенкову С.Н. за полезные дискуссии.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ion implantation. Edited by M. Goorsky, 2012. – 436 s., <http://www.interchopen.com/books/ion-implantation>.
2. Komarov F.F. Ionnaja implantacija v metally. – М.: Metallurgija, 1990. – 216 s.
3. Popok V.N., Azarko I.I., Hajbullin R.I. Vlijanie vysokih doz implantacii i plotnosti ionnogo toka na svojstva plenok poliimida // ZhTF. – 2002. – Т.72. – Вып.4. – С.88-93.
4. Vencatesan T., Forrest S.R., Kaplan M.L., Murray C.A., Schmidt P.H., Wilkens B.J. Ion-beam-induced conductivity in polymer films // J.Appl.Phys. – 1983. – Vol.54, №.6. – P.3150-3153.
5. Bondarenko V.N., Goncharov A.V., Suhostavec V.I. Opredelenie sechenij radiacionnogo obednenija polimerov ot del'nymi jelementami iz dannyh analiza na puchke uskorenyh ionov // Jaderna fizika ta energetika. – 2007. - №1(19). – S.134-139.
6. Abdesselam M., Stoquert J.P., Chami S., Djebara M., Chami A.C., Siad M. Method to measure composition modification in polyethylene terephthalate during ion beam irradiation // Nucl. Instr. and Meth. – 2009. – Vol.B267. – P.108-112.
7. Glazunov L.S., Goncharov A.V., Zats A.V., Kuz'menko V.V., Levenets V.V., Pistryak V.M., Sukhostavets V.I. Channel for ion irradiation of materials at the accelerator “Sokol” // Problems of Atomic Science and Technology. Series “Nuclear Physics Investigation”. – Kharkov: NSC KIPT. – 2006. - №.2(46). – С.184-186.
8. Bondarenko V.N., Glazunov L.S., Goncharov A.V., Zac A.V., Kolot V.Ja., Kuz'menko V.V., Levenec V.V., Omel'nik A.P., Pistryak V.M., Suhostavec V.I., Shhur A.A. Analiticheskaja ustanovka dlja jaderno-fizicheskikh metodov analiza // Nauchnye vedomosti (Belgorodskij gosudarstvennyj universitet), serija “Fizika”. – 2001. - №2(15). – S.86-92.
9. Shchagin A.V., Sotnikov V.V. Formula dlja poperechnogo sechenija ionizacii K-obolochki atoma Si reljativistskimi jelektronami v tonkom sloe kremnija // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2007. - №777. – Iss.2/34). - S.97-101.

PACS: 52.55.Hc, 52.55.Fa, 52.55.Ds

## ABOUT ONE METHOD OF DETERMINING COIL MISALIGNMENTS IN TOKAMAK

V.A. Rudakov, **A.V. Georgiyevskiy**<sup>1</sup>

*Institute of Plasma Physics, NSC KIPT, 61108, Kharkov, Akademichna str. 1, Ukraine;*

<sup>1</sup>*Princeton Plasma Physics Laboratory, USA*

*E-mail: [rudakov@kipt.kharkov.ua](mailto:rudakov@kipt.kharkov.ua)*

*Received September 9, 2013*

The paper presents a highly sensitive “e-beam” method of determining misalignments of elements in the ITER-like magnetic system on the base of magnetic measurements. It is suggested to make a “tokamak-stellarator” hybrid by means of addition to the ITER-like magnetic system of a new, not helical Saw Tooth-shaped Coil1 (STC) in order to provide the creation of “resonance” magnetic surfaces with the angles of rotational transform  $t = n/m = 1/2$  or  $t = 1/3$ . In one of variants the STC parts can be introduced into the vacuum vessel through the largest port and assembled into a single coil. The calculations of the ITER-like magnetic configuration show that due to the turn of the poloidal field coil PF3 around the axis X direction at an angle  $\alpha = 1'$  the resonance structure is formed with  $t = 1/2$  and the maximum island width  $\delta_0 \approx 50$  mm. Under this tilt the maximum misalignment of coil elements from the design position  $\Delta\alpha$  is only 3.5 mm. So, we have found the means for identification of misalignments in the case of magnetic system elements deviation from the design position to the values  $\Delta\alpha \approx 1$  mm that leads to the values of perturbing fields  $b_j/B_0 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ .

**KEY WORDS:** misalignments, magnetic configuration, saw-tooth coils, ITER, magnetic measurements.

### ПРО ОДИН МЕТОД ВИЗНАЧЕННЯ НЕТОЧНОСТЕЙ В КОТУШКАХ МАГНІТНОЇ СИСТЕМИ ТОКАМАКА

В.А. Рудаков, **А.В. Георгієвський**<sup>1</sup>

*Інститут фізики плазми ННЦ ХФТИ, Україна, 61108, Харків, вул. Академічна, 1*

<sup>1</sup>*Принстонська плазменна фізична лабораторія, США*

Робота представляє високочутливий електронно-пучковий метод визначення неточностей в елементах ІТЕР - подібної магнітної системи за допомогою магнітних вимірів. Це здійснюється шляхом створення гібриду "токамак-стелларатор" за допомогою додаткової негвинтової пілкоподібної котушки (STC), що створює резонансні магнітні поверхні з кутами обертального перетворення  $t = n/m = 1/2$  або  $t = 1/3$ . У одному з варіантів STC може розміщуватися усередині вакуумної камери токамака. Розрахунки ІТЕР-подібної магнітної конфігурації показали, що при повороті котушки пологодального магнітного поля PF3 навколо осі X на одну кутову хвилину  $\alpha = 1'$  утворюється резонансна структура з  $t = 1/2$  і максимальною шириною  $\delta_0 \approx 50$  мм. При такому нахилі максимальне зміщення елемента котушки від його проектного положення ( $\Delta\alpha$ ) дорівнює 3,5 мм. Таким чином, був знайдений метод визначення неточностей у виготовленні елементів магнітної системи, що характеризується зміщеннями порядку одного мм і збуреннями поля  $b_j/B_0 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ .

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** розрегулювання, магнітні конфігурації, пілкоподібна котушка, ІТЕР, магнітні виміри.

### ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НЕТОЧНОСТЕЙ В КАТУШКАХ МАГНИТНОЙ СИСТЕМЫ ТОКАМАКА

В.А. Рудаков, **А.В. Георгиевский**<sup>1</sup>

*Институт физики плазмы ННЦ ХФТИ, Украина, 61108, Харьков, ул. Академическая, 1*

<sup>1</sup>*Принстонская плазменная физическая лаборатория, США*

Работа представляет высокочувствительный электронно-пучковый метод определения неточностей в элементах ИТЭР – подобной магнитной системы при помощи магнитных измерений. Это осуществляется путем создания гибрида «токамак-стелларатор» с помощью дополнительной невинтовой пилообразной катушки (STC), создающей резонансные магнитные поверхности с углами вращательного преобразования  $t = n/m = 1/2$  или  $t = 1/3$ . В одном из вариантов STC может размещаться внутри вакуумной камера токамака. Расчеты ИТЭР-подобной магнитной конфигурации показали, что при повороте катушки пологодального магнитного поля PF3 вокруг осі X на одну угловую минуту  $\alpha = 1'$  образуется резонансная структура с  $t = 1/2$  и максимальной шириной  $\delta_0 \approx 50$  мм. При таком наклоне максимальное смещение элемента катушки от его проектного положения ( $\Delta\alpha$ ) равняется 3,5 мм. Таким образом, был найден метод определения неточностей в изготовлении элементов магнитной системы, характеризующихся смещениями порядка одного мм и возмущениями поля  $b_j/B_0 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ .

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** разрегулированности, магнитные конфигурации, пилообразная катушка, ИТЭР, магнитные измерения.

Experience in research of closed magnetic system, intended for confinement of plasma, testifies to their high sensitiveness in relation to different kinds of magnetic field perturbations. Areas with the rational values of angles of rotational transform are especially sensitively to magnetic perturbations. Formation of magnetic islands is thus possible with their ceiling and subsequent stochastisation of force lines [1-4]. Such violations of structure of magnetic field can cause the enhanceable losses of plasma. One of reasons, of magnetic field perturbations there are inaccuracies in making and montage of current-carrying elements of the magnetic system. The aim of the paper was to offer for tokamaks method of exposure of misalignments in the elements of the magnetic system, essence of that consists of creation of stellarator magnetic configuration and measuring of their resonant structures.

The paper presents “e-beam” method of determining misalignments of elements in the ITER-like magnetic system

on the base of magnetic measurements (MM). For the period of MM experiments it is suggested to make a “tokamak-stellarator” hybrid (ITER-S) by means of addition to the ITER magnetic system [5] of a new, not helical Saw Tooth-shaped Coil<sup>1</sup> (STC) in order to provide the creation of “resonance” magnetic surfaces with the angles of rotational transform  $t = n/m = 1/2$  or  $t = 1/3$ .

**DESCRIPTION OF THE METHOD**

The STC has a view of a circular saw with different number of teeth [6]. In one of variants the STC parts can be introduced into the vacuum vessel (VV) through the largest port attached to the inner part of the VV wall and assembled into a single coil (Fig. 1).

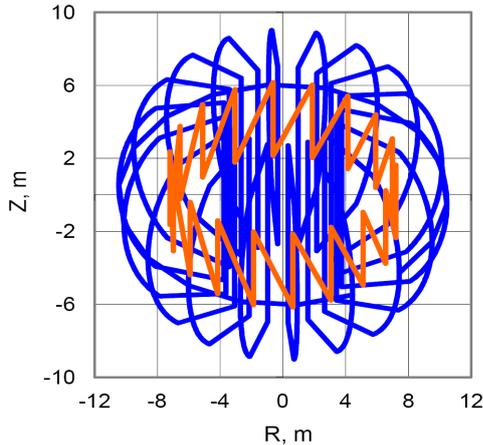


Fig. 1. ITER\_S. Toroidal coils system and Saw tooth coil.

In the method the basic component of the equipment is a small diameter ( $\varnothing \approx 1.5\text{mm}$ ) metal rod coated with a thin phosphorus layer. In other poloidal cross-section the electron gun, movable along the minor radius of the torus, is placed. The pictures of many “magnetic surfaces” are obtained by photographing the light emitted by phosphorus due to electrons striking the rod. Experiments on the Uragan-3M torsatron have shown that up to 15 contours of “magnetic surfaces” can be registered. The typical resolution  $\delta_r$  along the minor radius is of the order of  $\delta_r \approx (3 - 5) \text{ mm}$  [7,8].

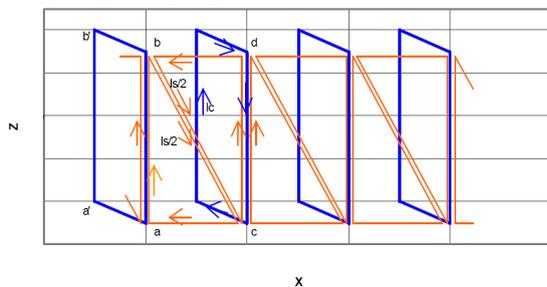


Fig. 2. Modular view of Saw-tooth coil (three angular contours) and toroidal field coil. Pieces *ac* and *bd* are parts of poloidal field currents (PFC). Arrows show current directions.

At this case the number of “saw teeth” is equal 18. The STC elements have as a straight view, so an arc view repeating the first wall shape. Note three interesting peculiarities of the STC that can be used in equipment design for magnetic measurements:

1. Number of saw tooth like pieces of the STC can be not only 18, but also 9 or 6, or even 3.
2. Tilted pieces of the STC can be lain by a special manner, providing in particular, bending of vacuum ports.
3. There is possibility to create the STC in modular view (Fig. 2). Currents in tilted and vertical pieces of neighbouring STC flow in one direction. Horizontal pieces of the modulus can play role of poloidal field coils. Such STC operates similar to a continuous STC.

Proposed “e-beam” method using the luminescent rod is the fastest and most accurate method giving direct pictures of

In the course of calculations we have considered a resonance case of ITER-S with the angle of rotational transform  $t=1/2$ . The basic configuration in two cross-sections is shown in Fig. 3. In the figure we used the next designations:  $R_{ST}$  – radial position of STC,  $R_0$ - main radius of torus,  $b/B_0$  – ratio between amplitude of perturbation field  $b$  and toroidal field  $B_0$ ,  $N_{ST}$  – saw teeth quantity,  $N_T$  – number of toroidal field coils (TFC),  $Z_{ST}$  – half altitude of STC,  $Z_{TC}$  – half altitude of TFC,  $I_{TC}=1$ - current in TFC,  $I_{ST}$  – current in STC with respect to  $I_{TC}$ ; IPO1, IPO2, IPO6 – currents in poloidal field coils,  $t_0$ ,  $t_{max}$  – rotational transform angles in the center and in the edge of the configuration.

The stellarator configuration is created with the use of STC with 18 teeth. As a result of the tilt of the upper poloidal field coil (PF-3) with angle  $\alpha^\circ$  per one minute ( $\Delta\alpha=3.5\text{mm}$ , the turn around the direction of X- axis) there appears an island structure  $n=1, m=2$  (2 islands) with a maximum value of the island width  $\delta_0 \approx 5.1 \text{ cm}$  (Fig. 4). The coil parameters are:  $R= 12.1 \text{ m}$ ,  $Z = 3.06 \text{ m}$ ,  $I_c = 4530 \text{ kA}$ .

Direct calculations have shown that the maximum values of the horizontal and vertical magnetic field components of this coil  $b_R$  and  $b_z$  corresponds to the position of the toroidal angle  $\varphi = \pi/3$ . In the point  $R=6.7 \text{ m}$ ,  $Z = 0$ , that approximately corresponds to the centre of the resonance structure, the relative values of the radial ( $B_R$ ) and horizontal ( $B_z$ ) magnetic field components were the following:

$$B_z / B_0 = 0.054259664, B_R / B_0 = -0.0156872567, \text{ where } B_0 = 4.63 \text{ T (case } \alpha=0)$$

$$B_z / B_0 = 0.0542706062, B_R / B_0 = -0.0156741147 \text{ (case } \alpha=1')$$

The differences in components before and after the coil inclination ( $\Delta b_j / B_0 = (b_{j1} - b_{j2}) / B_0$ ) are equal:

<sup>1</sup> The STC winding was proposed and investigated for the first time by A.V.Georgiyevskiy and V.A.Rudakov together with the scientists of Wisconsin University in 1995 [6].

$$\Delta B_z / B_0 = 1.094 \cdot 10^{-5}, \text{ hence } \Delta B_z = -1.094 \cdot 10^{-5} \cdot 4.63 \cdot 10^4 = -0.5066 \text{ G.}$$

$$\Delta B_R / B_0 = 1.314 \cdot 10^{-5}, \text{ hence } \Delta B_R = +1.314 \cdot 10^{-5} \cdot 4.63 \cdot 10^4 = 0.6085 \text{ G.}$$

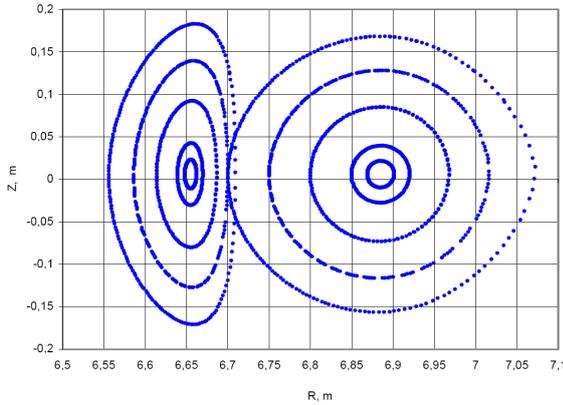


Fig. 3. Base configuration without misalignments.

Field period cross-section (right), half field period (left).  
 $R_{ST}=7.3$ ,  $R_0=6.3$  m.,  $N_{ST}=18$ ,  $N_T=18$ ,  $Z_{TC}=5.14$ ,  $Z_{ST}=2$  m,  
 $B_0(6.3)=5.3$  T,  $(B_{zpfic}+B_{zST})=+0.53\%$  at  $R=6.0$ m).  $I_{TC}=1(9275$   
 kA),  $I_{ST}=-0.5$ ,  $t_{max}=0.493$ ,  $IPO1=IPO6=-0.305$ .

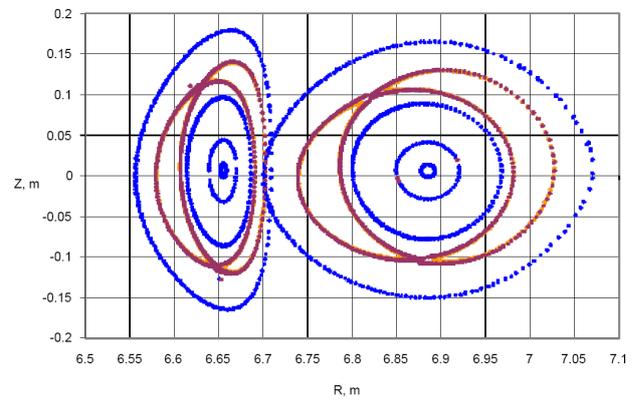


Fig. 4. Magnetic configuration with two islands at resonance  $n/m=1/2$ . PF-3 coil tilted by angle  $1'$ .

If we use the formula of [5]:

$$\delta_0 = 4 (b_{mn} R_0 / m B_0 t')^{1/2},$$

then we obtain for  $\delta_0=5.1$  cm,  $R_0=6.7$  m,  $m=2$ ,  $t'=1.4 \cdot 10^{-3}$ ,  $B_0=4.63$  T,  $b_{mn}=0.314$  G. Here  $t'=\partial/\partial r$  is shear.

Substituting as  $b_{mn}$  the quantity  $\Delta B_z=0.5066$  G, we obtain:

$$\delta_0 = 4 (0.5066 \cdot 670 / 2 \cdot 46300 \cdot 0.0014)^{1/2} = 6.5 \text{ cm.}$$

The analogous estimation with  $b_{mn}=\Delta B_R=0.6085$  G give gives the value  $\delta_0=7.1$  cm.

So, the perturbing action of poloidal field coil (PF-3) misalignment in the form of the angle of tilt  $\alpha=1'$  leads to the perturbing field of the order  $b_{mn}/B_0 \approx 10^{-5}$  and provokes forming of the resonance structure in the form of two island  $n=1$ ,  $m=2$  with the maximum width of the island  $\delta_0 \approx 5.1$  cm. Taking into account the degree of approximation of the island structure size estimation, it can be said that the observed scale of the island structure does not contradict to the values of the perturbing field arising as a result of the coil tilt.

We would remind, that at the above-mentioned tilt of PF-3 ( $\alpha=1'$ ) the maximum coil misalignment  $\Delta\alpha=3.5$ mm, and  $\delta_0 \approx 51$  mm. As a result, the perturbation  $b_{mn}/B_0 \approx 1 \cdot 10^{-5}$  creates the islands with the maximum width  $\delta_0 \approx 51$  mm that exceeds by an order of magnitude the above-mentioned value of the resolution of the proposed method ( $\delta_r \approx 3-5$  mm).<sup>2</sup> Therefore, we can assert that the minimum misalignment can be fixed at a level  $\Delta\alpha \approx 1$  mm,  $b_{mn}/B_0 \sim 3 \cdot 10^{-6}$ . This is confirmed by the below-given results of the calculations at the angle of tilt  $\alpha=1/4'$ .

For the case  $\alpha=1/4'$  the magnetic field components have the values:

$$b_z / B_0 = 0.05422573762, \quad b_R / B_0 = -0.0156839726,$$

that gives the following values of their differences:

$$\Delta B_z / B_0 = -2.88 \cdot 10^{-6}, \text{ hence } \Delta B_z = -2.88 \cdot 10^{-6} \cdot 4.63 \cdot 10^4 = -0.133 \text{ G.}$$

$$\Delta B_R / B_0 = 3.28 \cdot 10^{-6}, \text{ hence } \Delta B_R = +3.28 \cdot 10^{-6} \cdot 4.63 \cdot 10^4 = 0.151 \text{ G.}$$

The calculations of the magnetic configuration for this case enabled to obtain the resonance structure  $m=2$ ,  $n=1$  with  $\delta_0 \approx 25$  mm (Fig. 5), that does not contradict to the above given root dependence  $\delta_0$  on the amplitude of resonance magnetic field amplitude  $b_{mn}$ . The value of the resolution ( $\delta_r$ ) of the proposed MM method is (3–5) mm, i.e.  $\delta_r \ll \delta_0$ . Thus, a possibility was found for identification of misalignments in the case of deviation of the position of magnetic system elements from the design position by the value  $\Delta\alpha \sim 1$  mm. Besides, it is possible to observe the influence of coil misalignments leading to the relative values of perturbing fields of  $b_{mn}/B_0 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ .

The results of calculations of toroidal field coil misalignment influence on the formation of resonance structure are presented in Table. In particular, inclination of the plane of the toroidal field coil #10 at the angle  $1/4'$  (maximal displacement of the coil part is 0.4mm) leads to forming of two-island resonance structure with  $\delta_0 \approx 22$  mm. In this case the perturbation field value equals to  $b_{mn}/B_0 \approx 2.6 \cdot 10^{-6}$ .

Thus, it is possible to do the main conclusion, that proposed for ITER tokamak (with additional, rather simple - non helical winding STC) method, of vacuum "resonance" magnetic measurements using the luminescent rod, allows to

<sup>2</sup> Note, that a similar result is obtained in the calculations of the magnetic configuration for the case of misalignment of the same winding by 3mm along the Y axis direction (see Table 1 - 05061001, 05061002) ( $dy_{p03}=0.003$ )

identify error magnetic fields up to  $b_{mn}/B_0 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ , caused by PFC or TFC misalignments with value  $\approx 0.4 - 1$  mm. All results presented above calculated at resonance  $t = n/m = 1/2$ . There is resonant structure obtained at the case  $t = n/m = 1/3$  (Table, 6 position). For these case three-island structure obtained as a result of the PF-3 coil inclination by the angle  $1'$ .

Table

The misalignments in ITER-S coils

N	Files	Coil	$\alpha^\circ$	$\Delta\alpha$ mm	$\delta_0$ mm	b/B <sub>0</sub>
1	05041301 05041302	PF-3	1'	3.5	51	$\sim 1 \cdot 10^{-5}$
2	05051301 05051302	PF-3	1/4'	$\sim 1$	25	$\sim 3 \cdot 10^{-6}$
3	05062701 05062702	TF-10	1'	1.6	30	$\sim 1.04 \cdot 10^{-5}$
4	05063001 05063002	TF-10	1/4'	0.4	22	$\sim 2.6 \cdot 10^{-6}$
5	05061001 05061002	PF-3	0**	3	52	$6 \cdot 10^{-6}$
6	05040502* 05040503	PF-3	1'	3.5	16	$\sim 1 \cdot 10^{-5}$

\*) resonance  $t = 1/3$ .

\*\*\*) displacement along Y axis.

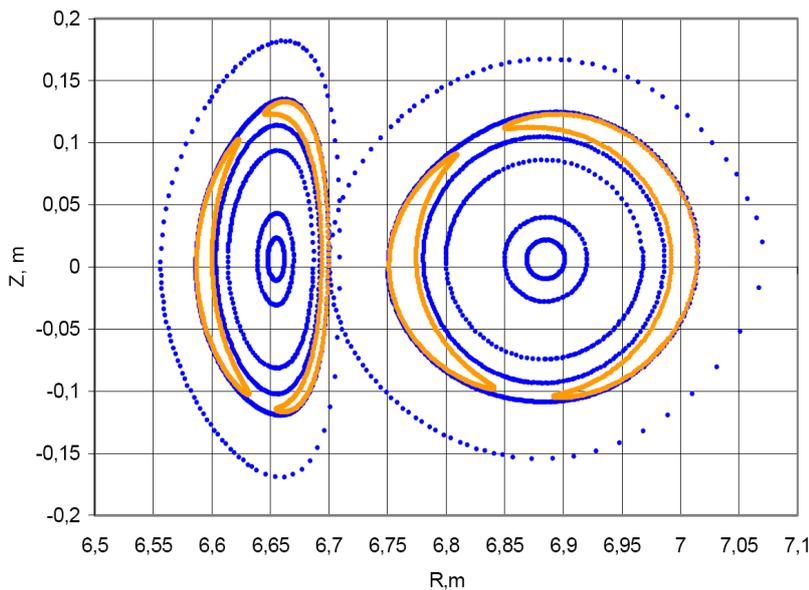


Fig. 5. Magnetic configuration with two islands at resonance  $n/m = 1/2$ . PF-3 coil tilted by angle  $1/4'$ . Turn around of the X-axis direction

luminescent rod, allows to identify error magnetic fields up to  $b_{mn}/B_0 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ , caused by PFC or TFC misalignments with value  $\approx 0.4 - 1$  mm. All results presented above calculated at resonance  $t = n/m = 1/2$ . There is resonant structure obtained at the case  $t = n/m = 1/3$  (Table, 6 position). For these case three-island structure obtained as a result of the PF-3 coil inclination by the angle  $1'$ .

There is problem to make TF and PF systems symmetric with respect to the toroidal axis (elimination of the main  $n=1$  component). Recommended level of compensation is  $10^{-5}$ . Remind for comparison, that the achieved level of toroidal error field compensation by a saddle loop method is of about  $3 \cdot 10^{-4}$  (that is not enough) and for the poloidal field coils  $10^{-5}$  [10]. But before compensation there is necessity to identify the error field. Proposed method of MM gives reliable means to solving this problem.

### CONCLUSION

So, the paper presents a highly sensitive “e-beam” method of determining misalignments of elements in a tokamak magnetic system on the base of magnetic measurements. Note that using the proposed resonance MM methods one can determine, with a high accuracy, other magnetic field errors too. For example, at the first stage of MM it is possible to find, and, in a great measure, to compensate the averaged, by  $\varphi$ , summary (nonlocal) additional magnetic field components  $\Delta B_z$  and

There is problem to make TF and PF systems symmetric with respect to the toroidal axis (elimination of the main  $n=1$  component). Recommended level of compensation is  $10^{-5}$ . Remind for comparison, that the achieved level of toroidal error field compensation by a saddle loop method is of about  $3 \cdot 10^{-4}$  (that is not enough) and for the poloidal field coils  $10^{-5}$  [10]. But before compensation there is necessity to identify the error field. Proposed method of MM gives reliable means to solving this problem.

Thus, it is possible to do the main conclusion, that proposed for ITER tokamak (with additional, rather simple - non helical winding STC) method, of vacuum “resonance” magnetic measurements using the

$\Delta B_R$ . Their sources can be, in particular, a value of magnetic permeability ( $\mu$ ) of metalwork not taken into account. The proposed MM makes it possible to detect “surprises” which cannot be foreseen by any calculations. As a rule (not as an exception) different “surprises” took place in many cases when starting large-scale installations. Let us show, also, other (potential) possibilities of the suggested MM method (see, also, [11]).

There is an opportunity to perform a highly sensitive control of the accuracy by retaining the currents in PFC and TFC coils according to the rearrangement of the “resonance” island structure related with the change of these currents ( $\Delta I/I \leq 0.38\%$ , the estimation was shown in calculations for NCSX magnetic system [11]). The offered method of measuring of inaccuracies in the elements of the magnetic system has higher exactness as compared to the known methods of the magnetic measuring in tokamaks.

Proposed is the method for detecting the errors of the average vertical ( $\Delta B_z$ ) and radial ( $\Delta B_R$ ) magnetic fields. Note that potential possibilities of the proposed MM method are not limited by the above list. Future work will be focused on developing the methods applied to identify specific types of coil misalignments.

#### REFERENCES

1. Danilkin I.S. Vliyaniye geometricheskikh pogreshnostei magnitnoi sistemy na topologiyu polya stellaratora. Kn. Stellaratory. M.: Nauka. – 1973. - C. 26-49. (Ivanovskii M. A. i dr. Stellarator TOP-2// Trudy FIAN SSSR. – 1973.- T.65. - C. 65 - 72).
2. Morozov A.I., Solov'ev L.S. Geometriya magnitnogo polya // Vopr. teorii plazmy. – 1963. - Vyp.2. - S. 3-91.
3. Solov'ev L.S., Shafranov V.D. Zamknutyie magnitnye konfiguratsii dlya uderzhaniya plazmy // Vopr. teorii plazmy. – 1967. - Vyp.5. – S.3–208.
4. Chirikov B.V. Stokhasticheskoe razrushenie magnitnykh poverkhnostei stellaratora // DAN SSSR. - 1967. - T.174. - № 6. - S.1313–1316.
5. ITER Physics Basis // Nuclear Fusion. – 1999. – Vol. 39. – P.2137-2173.
6. Brouchous D.A., Georgiyevskiy A.V., Hershkowitz N., Kishinevsky M., Rudakov V.A. // “PHAEDRUS-T” Tokamak Plasma with Externally Applied Rotational Transform. – In: ANS-95, Winter Meeting, Washington. – 1995. – P. 237-241.
7. Bykov V.E., Voitsenya V.S., Volkov E.D., Georgiyevskiy A.V., Schworer K., Hailer et H. et al. Study of the modified Uragan-3M torsatron magnetic configuration // VANT, Ser. Thermonuclear Fusion. - M: ZNII Atominform. – 1990. – Vol. III. - P.12.
8. Lesnyakov G.G., Volkov E.D., Georgiyevskiy A.V. et al. Study of magnetic configuration of the l=3 torsatron by the triode and the luminescent rod methods // Nucl. Fus. – 1992. – Vol. 32. – P.2157-2176.
9. Lee D.K., Harris J.H., Colchin R.J., et al. Field Error Modelling Studies in the ATF. – In: 7-th International Workshop on Stellarators. Oak Ridge, Tennessee. – 1989, April 10-14. – P.3-5.
10. Control Task Force Meeting at Naka JWS. – 1996, April 19-23.
11. Fredrickson E., Georgiyevskiy A.V., Rudakov V.A., Zarnstorff M.C. Using e-beam mapping to detect coil misalignment in NCSX. – In: 15th International Stellarator Workshop, Madrid. – October 2005. – Rep. P1-10.

УДК 533. 915

**КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В  $NF_3$** **В.А. Лисовский**<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина  
61022, Харьков, пл. Свободы 4, Украина<sup>2</sup> Научный физико-технологический центр МОН и НАН Украины  
Харьков, 61022, пл. Свободы, 6, Украинаe-mail: [lisovskiy@yahoo.com](mailto:lisovskiy@yahoo.com)

Received September 1, 2013

В настоящей работе с помощью кода Bolsig и сечений упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами газа рассчитаны коэффициенты переноса электронов в  $NF_3$ . Был определен первый коэффициент Таунсенда для прямой ионизации молекул  $NF_3$  электронным ударом (как полный, так и парциальный для каждого сорта образующихся положительных ионов). Показано, что в процессе ионизации наиболее вероятно появление положительных ионов  $NF_2^+$ . Получены коэффициент диссоциативного прилипания и значение приведенного электрического поля, в котором частоты ионизации и прилипания электронов равны друг другу, т.е. эффективный коэффициент ионизации равен нулю. С помощью частот упругих и неупругих столкновений рассчитаны также доля энергии, теряемой электронами при столкновениях с молекулами  $NF_3$ , средняя и характеристическая энергии электронов, подвижность и дрейфовая скорость электронов. Были также измерены ВЧ кривые зажигания для различных расстояний между электродами и частот ВЧ электрического поля, из координат точек поворота на которых получены значения дрейфовой скорости электронов в  $NF_3$ , удовлетворительно согласующиеся с результатами расчетов с помощью кода Bolsig.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** коэффициенты переноса электронов, первый коэффициент Таунсенда, транспортная частота, частота передачи энергии, средняя энергия, характеристическая энергия, подвижность, дрейфовая скорость электронов, ВЧ пробой

**ELECTRON TRANSPORT COEFFICIENTS FOR  $NF_3$** **V.A. Lisovskiy**<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Kharkov National University  
61022, Kharkov, Svobody Sq. 4, Ukraine<sup>2</sup> Scientific Center of Physical Technologies  
Kharkov, 61022, Svobody Sq. 6, Ukraine

This paper reports the transport parameters of electrons in  $NF_3$  we calculated employing the Bolsig code and cross sections of elastic and inelastic collisions between electrons and gas molecules. We determined the first Townsend coefficient for direct ionization of  $NF_3$  molecules through electron impact (including the total one as well as partial contributions for each species of forming positive ions). We demonstrate that the appearance of positive  $NF_2^+$  ions is the most probable ionization process. We found the dissociative attachment coefficient and the reduced electric field value for which the electron ionization and attachment rates are equal, i.e., the effective ionization coefficient vanishes. We also employed the elastic and inelastic collision rates to calculate the portion of energy lost by electrons under collisions with  $NF_3$  molecules, the average and characteristic electron energy, electron mobility and drift velocity. We also registered the RF breakdown curves for different inter-electrode gap and RF frequency values and employed the obtained turning point coordinates to determine the electron drift velocity in  $NF_3$  in satisfactory agreement with the data of calculations furnished by the Bolsig code.

**KEY WORDS:** electron transport parameters, the first Townsend coefficient, the rate of momentum transfer, the rate of energy relaxation, the average energy, the characteristic energy, mobility, the electron drift velocity, RF breakdown

**КОЕФІЦІЄНТИ ПЕРЕНОСУ ЕЛЕКТРОНІВ В  $NF_3$** **В.О. Лісовський**<sup>1,2</sup><sup>1</sup> Харківський національний університет  
61022, Харків, пл. Свободи 4, Україна<sup>2</sup> Науковий фізико-технологічний центр МОН і НАН України  
Харків, 61022, пл. Свободи, 6, Україна

У цій роботі за допомогою коду Bolsig і перерізів пружних і непружних зіткнень електронів з молекулами газу розраховані коефіцієнти переносу електронів в  $NF_3$ . Був визначений перший коефіцієнт Таунсенда для прямої іонізації молекул  $NF_3$  електронним ударом (як повний, так і парціальний для кожного сорту позитивних іонів, що утворюються). Показано, що в процесі іонізації найбільш вірогідна поява позитивних іонів  $NF_2^+$ . Отримано коефіцієнт диссоциативного прилипання і значення наведеного електричного поля, в якому частоти іонізації і прилипання електронів рівні між собою, тобто ефективний коефіцієнт іонізації дорівнює нулю. За допомогою частот пружних і непружних зіткнень розраховані також частка енергії, що втрачається електронами при зіткненнях з молекулами  $NF_3$ , середня і характеристична енергії електронів, рухливість і дрейфова швидкість електронів. Були також виміряні ВЧ криві запалювання для різних відстаней між електродами і частот ВЧ електричного поля, з координат точок повороту на яких отримані значення дрейфової швидкості електронів в  $NF_3$ , що задовільно узгоджуються з результатами розрахунків за допомогою коду Bolsig.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** коефіцієнти переносу електронів, перший коефіцієнт Таунсенда, транспортна частота, частота передачі енергії, середня енергія, характеристична енергія, рухливість, дрейфова швидкість електронів, ВЧ пробій

Трёхфтористый азот ( $\text{NF}_3$ ) широко используется для травления кремния и кремнийсодержащих полупроводниковых и диэлектрических материалов ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{SiO}_2$  и т.д.) [1-24],  $\text{UO}_2$  [25], силицидов вольфрама [26], для плазменной очистки технологических камер, применяемых для производства жидкокристаллических дисплеев и кремниевых солнечных панелей [23, 27-33]. В смесях с моносиланом ( $\text{SiH}_4$ ) и закисью азота ( $\text{N}_2\text{O}$ ) добавка  $\text{NF}_3$  приводит к значительному росту скорости осаждения пленок поликремния [34], а горение разряда в смеси трёхфтористого азота с моносиланом, аммиаком и азотом сопровождается осаждением фторированных пленок нитрида кремния [35]. Плазменная обработка диэлектрических полимеров в  $\text{NF}_3$  может улучшить их влагостойкость [36]. Смеси  $\text{NF}_3$  с инертными газами применяются в эксимерных лазерах [37-40]. Трёхфтористый азот рассматривается также как возможная замена фреонам и элегазу ( $\text{SF}_6$ ) в плазменных технологических процессах травления и очистки благодаря его меньшему времени жизни в атмосфере [31].

Для гидродинамического моделирования процессов в трёхфтористом азоте как в плазменных технологических камерах, так и в атмосфере Земли необходимо знать коэффициенты переноса электронов в этом газе. Однако в известной нам литературе отсутствует информация о дрейфовой скорости электронов, коэффициенте диффузии, средней энергии электронов, коэффициентах ионизации и прилипания в  $\text{NF}_3$ . Поэтому исследование параметров переноса электронов в  $\text{NF}_3$  представляет значительный интерес.

В настоящей работе с помощью численного кода BOLSIG и приведенных в литературе сечений упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами  $\text{NF}_3$  были получены частоты процессов столкновений, подвижность и дрейфовая скорость электронов, коэффициенты ионизации, прилипания, а также средняя и характеристическая энергии электронов в диапазоне приведенных электрических полей  $E/p \approx 1 - 1000$  В/(см·Торр). Из измеренных кривых зажигания ВЧ емкостного разряда определены значения дрейфовой скорости электронов в  $\text{NF}_3$  при  $E/p \approx 540 - 1241$  В/(см·Торр), которые удовлетворительно согласуются с результатами расчетов.

Целью работы было определение коэффициентов переноса электронов в трёхфтористом азоте в широком диапазоне приведенного электрического поля  $E/p$ .

#### УСЛОВИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

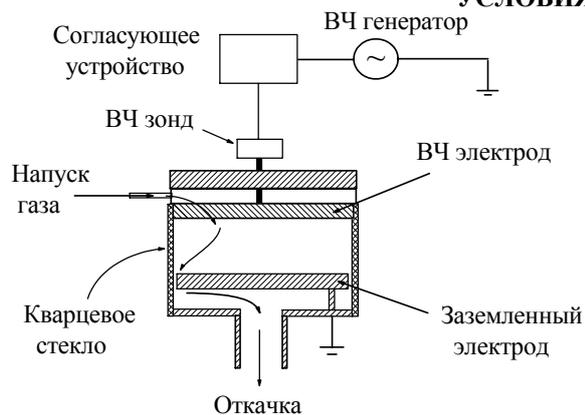


Рис. 1. Схема экспериментальной установки.

Исследования зажигания ВЧ разряда были проведены в диапазоне давлений  $\text{NF}_3$   $p \approx 0,05 - 4$  Торр для двух частот ВЧ электрического поля  $f = 13,56$  МГц и  $f = 27,12$  МГц. Использовались плоские алюминиевые электроды диаметром 143 мм, расстояние между которыми было равно  $L = 15$  мм, 20,4 мм, 23 мм и 25 мм для частоты  $f = 13,56$  МГц и  $L = 5$  мм и 11,9 мм для  $f = 27,12$  МГц. Один из электродов был заземлен, ко второму прикладывалось ВЧ напряжение амплитудой  $U_{rf} < 1600$  В. Диаметр разрядной трубки из кварцевого стекла был равен 145 мм (рис.1).  $\text{NF}_3$  напускался в камеру через систему маленьких отверстий (диаметром менее 1 мм) в ВЧ электроде, а откачивался через узкий зазор между заземленным электродом и стенкой разрядной трубки.

Для измерения давления газа использовались 1 и 10 Торр баратроны (емкостные манометры, MKS Instruments). Исследования проводились при фиксированном потоке газа 5 стандартных кубических сантиметров в минуту (sccm), который устанавливался с помощью контроллера массопотока. ВЧ зонд (RF probe, Advanced Energy Z'SCAN) применялся для измерения амплитуды ВЧ напряжения.

Для измерения ВЧ кривых зажигания мы использовали методику, впервые предложенную Левитским [41]. На правой ветви кривой зажигания (вблизи и справа от ее минимума) при фиксированном давлении  $\text{NF}_3$  ВЧ напряжение на электродах медленно увеличивалось до момента пробоя. За пробойное принималось максимальное ВЧ напряжение, которое можно было приложить к электродам без зажигания разряда. Однако левая ветвь ВЧ кривой зажигания (при низких давлениях газа) может быть неоднозначной, т.е. при одном и том же давлении газа можно зажечь разряд при двух и даже трех различных ВЧ напряжениях. Поэтому при этих условиях мы сначала значительно уменьшали давление газа, что препятствовало зажиганию разряда, затем устанавливали фиксированное ВЧ напряжение и далее медленно повышали давление газа до момента пробоя. В момент зажигания разряда в камере появлялось свечение, во внешней цепи - активный разрядный ток, которые сопровождалось резким уменьшением ВЧ напряжения на электродах.

#### РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В $\text{NF}_3$ С ПОМОЩЬЮ КОДА BOLSIG

Код BOLSIG ([www.siglo-kinema.com/bolsig.htm](http://www.siglo-kinema.com/bolsig.htm)) выполняет численное решение уравнения Больцмана для электронов, которые движутся в газе с наложенным на него электрическим полем  $E$ . Результатом расчетов с

помощью кода BOLSIG являются функции распределения электронов по энергиям для фиксированных значений приведенного электрического поля  $E/p$ , константы скорости упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами газа, а также искомые нами коэффициенты переноса электронов (подвижность и дрейфовая скорость электронов, коэффициенты ионизации, прилипания, диффузии, средняя энергия электронов). Код BOLSIG использует файл с набором газов, которые могут быть исследованы с его помощью, а также сечениями упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами газов. Необходимый для нашего исследования трёхфтористый азот не содержится в этом наборе газов, поэтому мы расширили его и добавили найденные в литературе сечения столкновений электронов с молекулами  $\text{NF}_3$ .

Теперь рассмотрим имеющиеся сечения столкновений электронов с молекулами  $\text{NF}_3$  [42-44]. Rescigno [43] с помощью комплексного вариационного метода Коха теоретически получил упругое дифференциальное и транспортное сечения (в диапазоне энергий электронов 0,2 – 10 эВ), а также сечения диссоциативного возбуждения для синглетного и триплетного электронно возбужденных состояний (от пороговых энергий до 25 эВ). Voesten и др. [44] измерили дифференциальные сечения упругих столкновений, интегральное упругое и транспортное сечения рассеяния (в диапазоне энергий электронов 1,5 – 100 эВ), а также дифференциальные сечения для колебательного возбуждения. Дятко и Напартович [45] с помощью этих дифференциальных сечений для колебательного возбуждения [44] рассчитали сечение возбуждения колебательных уровней в диапазоне энергий электронов 1 – 10 эВ. Jouscoski и Bettega [46] рассчитали дифференциальные, интегральное и транспортное в диапазоне энергий электронов до 60 эВ с помощью многоканального метода Швингера.

В литературе имеется ряд работ, авторы которых исследовали ионизирующие столкновения электронов с молекулами  $\text{NF}_3$ . Reese и Dibeler [47] использовали масс-спектрометрический метод и определили потенциалы появления ионов  $\text{NF}_3^+$ ,  $\text{NF}_2^+$ ,  $\text{NF}^+$ ,  $\text{N}^+$ ,  $\text{F}^+$ ,  $\text{F}^-$  и  $\text{F}_2^-$ . Tarnovsky и др. [48] и Becker и др. [49] измерили абсолютные сечения ионизации молекул  $\text{NF}_3$  электронным ударом от пороговой энергии до 200 эВ с образованием  $\text{NF}_3^+$ ,  $\text{NF}_2^+$ ,  $\text{NF}^+$ ,  $\text{N}^+$  и  $\text{F}^+$  ионов. Deutsch и др. [50, 51] использовали Deutsch-Mark формализм для расчета полного абсолютного сечения для ионизации молекулы  $\text{NF}_3$ . Однако их результаты примерно в 2 раза превышают величину экспериментально определенного сечения ионизации [48]. Naaland и др. [52] измерили сечения ионизации и диссоциативной ионизации молекул  $\text{NF}_3$  в диапазоне энергий электронов до 200 эВ.

Как было экспериментально показано авторами [53-56], наиболее вероятно образование отрицательных ионов  $\text{F}^-$  в процессе диссоциативного прилипания электронов к молекулам  $\text{NF}_3$ . Сечение образования этих отрицательных ионов примерно на три и четыре порядка, соответственно, выше, чем для ионов  $\text{F}_2^-$  и  $\text{NF}_2^-$  [56].

Экспериментальные данные Nandi и др. [56] для прилипания электронов молекулам  $\text{NF}_3$  представлены в виде подробной таблицы и использованы нами при расчетах с помощью кода BOLSIG. Сечение колебательного возбуждения было взято из работы [45], диссоциативного возбуждения - из работы [43], экспериментальное сечение ионизации - из работы [48]. Отметим, что сечение колебательного возбуждения [45] было определено в узком диапазоне энергий электронов 1 – 10 эВ и не является полным (в том смысле, что на границах этого диапазона величина сечения лишь в 5-10 раз ниже, чем в максимуме при энергии электронов 3 эВ), и вне этого диапазона корректная оценка сечения невозможна. Однако в других литературных источниках сечение колебательного возбуждения не было измерено или рассчитано. До конца не определенным является сечение диссоциативного возбуждения [43], т.к. оно было рассчитано только до энергии электронов  $\epsilon_e = 25$  эВ (максимум сечения находится при  $\epsilon_e = 21$  эВ), когда сечение уменьшилось по сравнению с максимальным примерно на 40 %. Сечение ионизации было измерено в [48] только до  $\epsilon_e = 200$  эВ, поэтому мы аппроксимировали его поведение до 300 эВ, используя его линейный ход (в логарифмическом масштабе) при больших энергиях электронов.

Ситуация с транспортным сечением также сложная. Сечение, рассчитанное в [43], имеет пологий максимум при  $\epsilon_e \approx 0,75$  эВ, минимум при  $\epsilon_e \approx 3,6$  эВ, который сменяется резким максимумом при  $\epsilon_e \approx 5,5$  эВ, при этом сечение определено только до энергии электронов 10 эВ. В области малых энергий  $\epsilon_e < 0,75$  эВ оно уменьшается. Сечение, измеренное в [44] в диапазоне энергий электронов 1,5 – 100 эВ, имеет пологий максимум при  $\epsilon_e \approx 4,5$  эВ, и при энергии  $\epsilon_e = 10$  эВ оно примерно на 20 % выше, чем сечение [43]. Так как эти сечения определены в разных, частично перекрывающихся диапазонах энергии электронов (0,2 – 10 эВ [43] и 1,5 – 100 эВ [44]), то мы для расчетов использовали комбинированное RB сечение, которое при  $\epsilon_e < 7$  эВ состояло из сечения Rescigno [43] и при  $\epsilon_e \geq 7$  эВ - из сечения Voesten и др. [44] (при  $\epsilon_e = 7$  эВ эти сечения равны). Для энергий выше 100 эВ это сечение было аппроксимировано благодаря его линейному ходу в логарифмическом масштабе при больших энергиях электронов.

Транспортное сечение рассчитано также Jouscoski и Bettega [46] в диапазоне от десятых долей электрон-вольт до 60 эВ. С ростом энергии электронов оно сначала быстро уменьшается (в отличие от сечения [43]), при  $\epsilon_e \approx 4,5$  эВ оно достигает минимума и затем сменяется резким максимумом при  $\epsilon_e \approx 7$  эВ, следующий пологий минимум наблюдается при  $\epsilon_e \approx 14$  эВ, пологий максимум – при  $\epsilon_e \approx 27$  эВ, после прохождения которого сечение монотонно уменьшается.

Ниже будут представлены результаты расчетов для двух случаев, когда в коде BOLSIG использовалось комбинированное RB транспортное сечение (Rescigno [43] и Voesten и др. [44]) и сечение Jouscoski и Bettega

[46], соответственно.

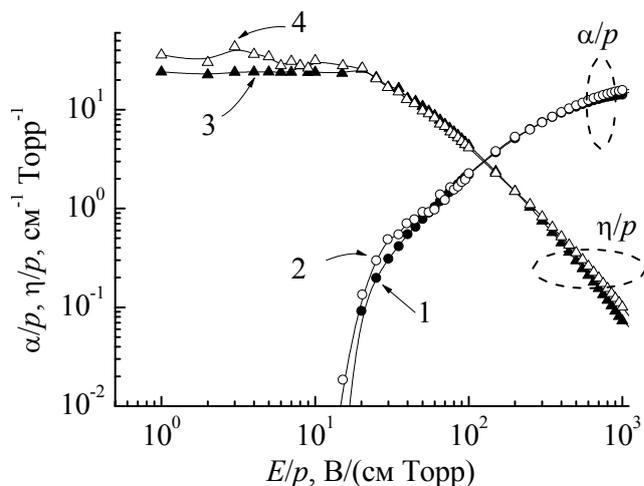


Рис. 2. Зависимость первого коэффициента Таунсенда для ионизации (1,2) и коэффициента прилипания (3, 4) от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ .

Кривые 1 и 3 - расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43, 44], кривые 2 и 4 - расчет с транспортным сечением [46].

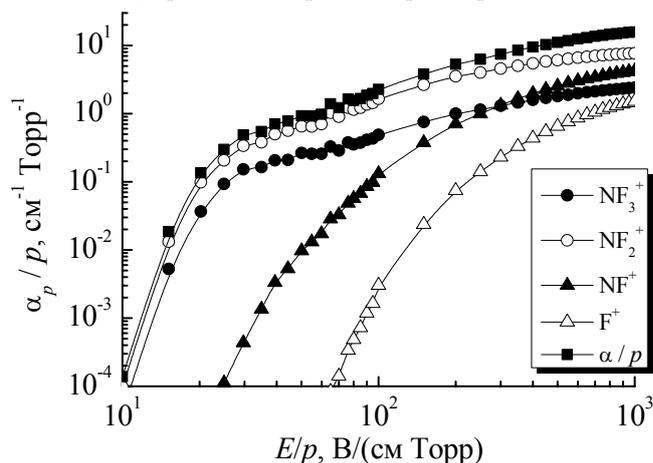


Рис. 3. Зависимость парциального первого коэффициента Таунсенда для ионизации с образованием положительных ионов  $\text{NF}_3^+$ ,  $\text{NF}_2^+$ ,  $\text{NF}^+$  и  $\text{F}^+$ , а также коэффициента полной ионизации  $\alpha/p$  от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ .

Расчет с помощью транспортного сечения [46].

меньше, чем  $(E/p)_c$ . Из рисунка видно также, что коэффициент прилипания в диапазоне  $1 \leq E/p \leq 20$  V/(см Торр) является наибольшим и сохраняется практически постоянным при изменении  $E/p$ . Отметим, что в других электроотрицательных газах [57-61] ( $\text{SF}_6$ ,  $\text{CF}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{O}_2$  и т.д.) коэффициент прилипания  $\eta/p$  имеет более или менее резко выраженный максимум при  $E/p \approx 10 - 50$  V/(см Торр), но не плато, что выделяет  $\text{NF}_3$  среди других подобных газов, молекулы которых способны захватывать свободные электроны. Энергия электронного сродства для атома фтора (3,6 эВ) превышает  $\text{NF}_2\text{-F}$  энергию связи (2,5 эВ) [62], поэтому молекулы  $\text{NF}_3$  легко распадаются вследствие диссоциативного прилипания



Следовательно, молекулы  $\text{NF}_3$  являются слабосвязанными, так как для их диссоциации, сопровождающейся прилипанием, электронам не обязательно иметь какую-либо начальную энергию. Диссоциативное прилипание является одной из причин появления диссоциативной  $\delta$ -моды ВЧ емкостного разряда [63], при которой степень диссоциации молекул  $\text{NF}_3$  может достигать 100 %.

На рис. 3 показаны зависимости парциального первого коэффициента Таунсенда  $\alpha_p/p$  для ионизации с образованием положительных ионов  $\text{NF}_3^+$ ,  $\text{NF}_2^+$ ,  $\text{NF}^+$  и  $\text{F}^+$ , а также коэффициент полной ионизации  $\alpha/p$  от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ . Расчет проводился с помощью транспортного сечения [46], а также сечений ионизации молекул  $\text{NF}_3$  из работы [48]. Из рисунка видно, что во всем исследованном нами

Сначала рассмотрим, как в  $\text{NF}_3$  происходят процессы прямой ионизации молекул электронным ударом и диссоциативного прилипания свободных электронов к молекулам  $\text{NF}_3$  с образованием отрицательных ионов  $\text{F}^-$ . На рис. 2 показаны зависимости первого коэффициента Таунсенда для ионизации  $\alpha/p$  и коэффициента прилипания электронов  $\eta/p$ , рассчитанные с помощью кода BOLSIG, от приведенного электрического поля  $E/p$ . Из рисунка видно, что расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43,44] дает немного более низкие значения коэффициентов ионизации  $\alpha/p$  и прилипания  $\eta/p$ , чем расчет с транспортным сечением [46]. Особенно хорошо это различие заметно при слабых приведенных электрических полях ( $E/p \leq 70$  V/(см Торр) для ионизации и  $E/p \leq 20$  V/(см Торр) для прилипания), а также небольшое расхождение видно при сильных полях порядка нескольких сотен V/(см Торр) и увеличивается с ростом  $E/p$ . Коэффициенты ионизации и прилипания равны друг другу при  $(E/p)_c = 128,2$  V/(см Торр) для комбинированного RB транспортного сечения [43,44] и при  $(E/p)_c = 124,4$  V/(см Торр) для транспортного сечения [46]. В тех областях разряда, где прямая ионизация должна компенсировать потери электронов вследствие прилипания (например, в положительном столбе разряда постоянного тока, в плазменном объеме слаботочного режима ВЧ емкостного разряда), для поддержания стабильного горения разряда приведенное электрическое поле должно быть не

диапазоне  $E/p$  наиболее вероятно появление ионов  $NF_2^+$ , а ионы  $NF_3^+$  возникают в несколько раз реже, чем  $NF_2^+$ . В слабых приведенных электрических полях парциальный первый коэффициент Таунсенда  $\alpha_p/p$  для появления ионов  $NF^+$  в десятки и сотни раз ниже, чем для  $NF_3^+$ , но при  $E/p > 200$  В/(см Торр) ионы  $NF^+$  рождаются в процессе диссоциативной ионизации чаще, чем ионы  $NF_3^+$ . Наконец, ионы  $F^+$  являются наименее вероятным продуктом диссоциативной ионизации, хотя при сильных приведенных электрических полях  $E/p \sim 1000$  В/(см Торр) они появляются почти так же часто, как и ионы  $NF_3^+$ .

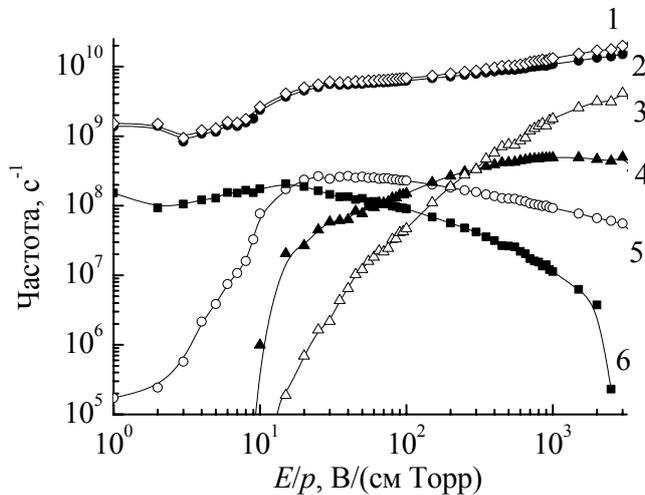


Рис. 4. Зависимость полной частоты столкновений (1), частоты упругих столкновений с передачей импульса (2), полной частоты ионизирующих столкновений (3), суммарной частоты диссоциативного возбуждения (4), частоты колебательного возбуждения (5) и частоты прилипания (6) электронов к молекулам  $NF_3$  от приведенного электрического поля  $E/p$ .

Расчет с помощью транспортного сечения [46].

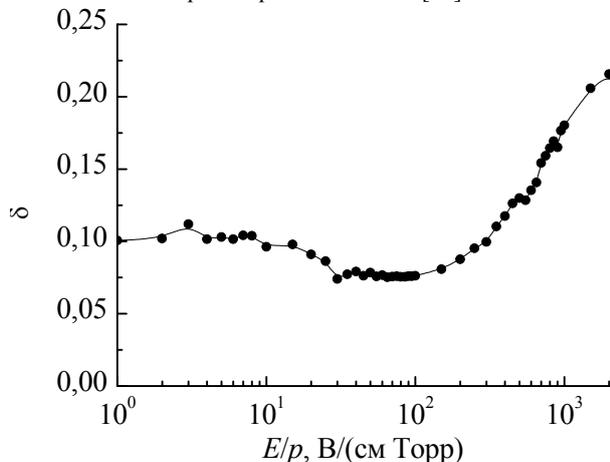


Рис. 5. Зависимость доли энергии, теряемой электронами при столкновениях с молекулами  $NF_3$ , от приведенного электрического поля  $E/p$ .

Расчет с помощью частот упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами  $NF_3$ , представленных на рис. 4.

$2 \cdot m/M = 1.54 \cdot 10^{-5}$ , то есть при наличии только упругих столкновений электроны в слабом электрическом поле должны были бы терять пренебрежимо малую долю энергии. Для других газов об этом говорится, например, в работах [60, 64 - 67]. Обычно с ростом  $E/p$  доли энергии  $\delta$  сначала примерно равна  $2 \cdot m/M$ , в более сильном поле электроны совершают также неупругие столкновения с молекулами газа и  $\delta$  начинает монотонно возрастать, асимптотически стремясь к 1.

Однако из рис. 5 видно, что в случае  $NF_3$  доля энергии  $\delta$ , теряемая электронами при столкновении с молекулами, не является малой (порядка  $2 \cdot m/M$ ) ни при каких условиях во всем исследованном нами диапазоне приведенного электрического поля  $E/p$ . Для  $E/p = 1$  В/(см Торр)  $\delta \approx 0,1$ , при  $E/p \approx 80$  В/(см Торр) доля теряемой энергии достигает минимума  $\delta \approx 0,076$ , а затем с ростом  $E/p$   $\delta$  увеличивается и при  $E/p = 2000$  В/(см Торр)  $\delta \approx 0,22$ . Чтобы определить  $\delta$  для более сильных  $E/p$ , нужно более детально знать сечения упругих и неупругих

Зависимости частот упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами  $NF_3$  от приведенного электрического поля  $E/p$  показаны на рис. 4. Из рисунка видно, что наиболее частыми являются упругие столкновения электронов с молекулами  $NF_3$ , их частота во всем диапазоне  $E/p$  практически совпадает с полной частотой столкновений. При слабых  $E/p < 10$  В/(см Торр) частота диссоциативного прилипания  $\nu_{att}$  электронов к молекулам  $NF_3$  составляет примерно 10 % от полной частоты столкновений, но затем  $\nu_{att}$  достигает максимума и с ростом  $E/p$  быстро уменьшается. Полная частота ионизирующих столкновений  $\nu_i$  мала при слабых приведенных электрических полях, но при  $E/p = 3000$  В/(см Торр)  $\nu_i$  достигает примерно 25 % от полной частоты столкновений. Суммарная частота диссоциативного возбуждения  $\nu_{exc}$  и частота колебательного возбуждения  $\nu_{vibr}$  также показаны на рис. 4 и с ростом  $E/p$  сначала возрастают, достигают максимума и затем монотонно уменьшаются.

На рис. 5 показана зависимость доли энергии  $\delta$ , теряемой электронами при столкновении с молекулами  $NF_3$ , от приведенного электрического поля  $E/p$ . Величина  $\delta$  была определена с помощью частот упругих  $\nu_{elast}$  и неупругих столкновений электронов с молекулами аммиака, представленными на рис. 4, по формуле:

$$\delta = \frac{2m/M \cdot \nu_{elast} + \nu_{exc} + \nu_{vibr} + \nu_{ion} + \nu_{att}}{\sum \nu} = \frac{\nu_u}{\nu_{me}}, \quad (2)$$

где  $\nu_u$  является частотой потерь энергии (энергетической релаксации), а транспортная частота  $\nu_{me}$

$$\nu_{me} = \sum \nu = \nu_{elast} + \nu_{exc} + \nu_{vibr} + \nu_{ion} + \nu_{att} \quad (3)$$

является суммой всех возможных частот столкновений электронов с молекулами.  $M$  и  $m$  – массы молекулы газа и электрона, соответственно. Для молекулы  $NF_3$  отношение

столкновений электронов высокой энергии с молекулами  $\text{NF}_3$ . Как уже говорилось выше, в слабом электрическом поле  $E/p < 10 \text{ В/(см Торр)}$  частота прилипания электронов к молекулам газа всего примерно в 10 раз меньше, чем частота упругих столкновений  $\nu_{elast}$ . И при умножении  $\nu_{elast}$  на малый множитель  $2 \cdot m/M$  доминирующий вклад в частоту энергетической релаксации  $\nu_u$  дает частота прилипания  $\nu_{att}$ . Именно она обеспечивает высокий уровень доли энергии  $\delta$ , теряемой электронами низкой энергии при столкновении с молекулами  $\text{NF}_3$ .

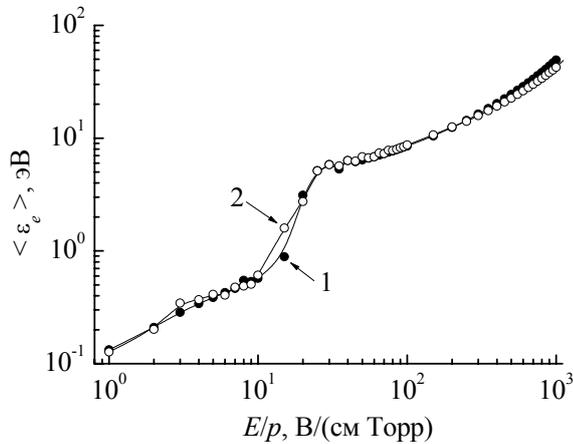


Рис. 6. Зависимость средней энергии электронов от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ . Кривая 1 - расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43,44], кривая 2 - расчет с транспортным сечением [46].

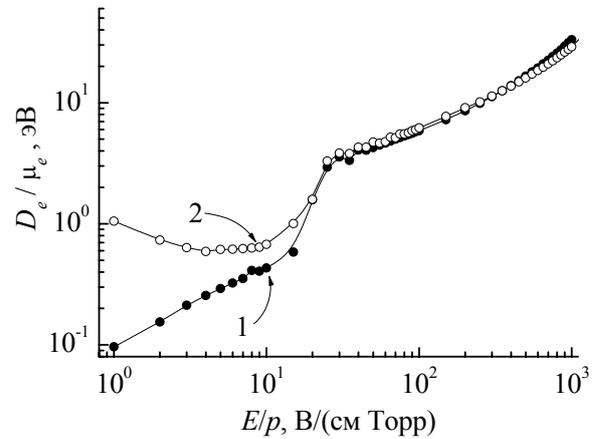


Рис. 7. Зависимость характеристической энергии электронов от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ .

Кривая 1 - расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43,44], кривая 2 - расчет с транспортным сечением [46].

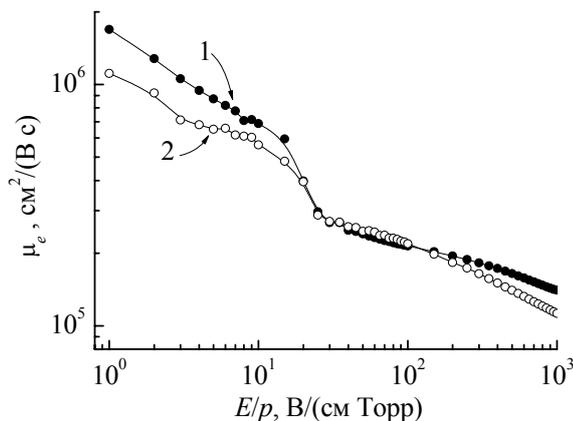


Рис. 8. Зависимость подвижности электронов от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ . Кривая 1 - расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43, 44], кривая 2 - расчет с транспортным сечением [46].

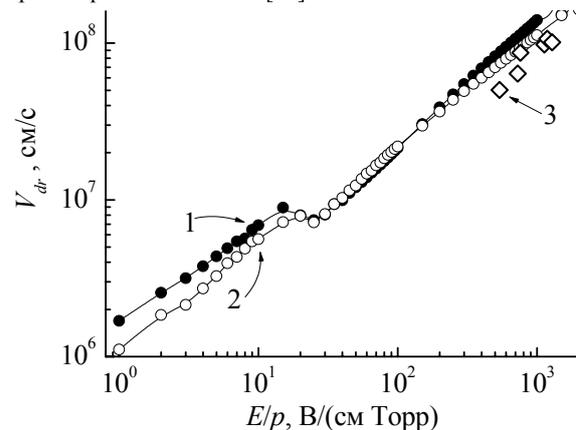


Рис. 9. Зависимость дрейфовой скорости электронов от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$ .

Кривая 1 - расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43, 44], кривая 2 - расчет с транспортным сечением [46], точки 3 - наши экспериментальные результаты.

Теперь рассмотрим среднюю энергию электронов, зависимость которой от приведенного электрического поля  $E/p$  в  $\text{NF}_3$  показана на рис. 6. Из рисунка видно, что расчеты с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43,44] и транспортного сечения [46] дают практически совпадающие результаты. Заметное различие наблюдается в диапазоне резкого скачка средней энергии  $E/p = 10 - 25 \text{ В/(см Торр)}$ , а также при  $E/p > 300 \text{ В/(см Торр)}$  средняя энергия с комбинированным RB транспортным сечением [43,44] растет с  $E/p$  быстрее, чем с транспортным сечением [46]. Отметим также, что при низких  $E/p \leq 10 \text{ В/(см Торр)}$  электроны имеют небольшую энергию, менее 0,6 эВ, которой явно не хватает для обычной диссоциации молекул  $\text{NF}_3$  без участия процесса прилипания.

Характеристическая энергия электронов (отношение коэффициента диффузии к подвижности электронов)  $D_e/\mu_e$  представлена на рис. 7. Из рисунка видно, что для  $E/p \leq 25 \text{ В/(см Торр)}$  использование комбинированного RB транспортного сечения [43,44] дает монотонно растущую с  $E/p$  характеристическую энергию (с участком быстрого роста  $D_e/\mu_e$  в диапазоне  $E/p \approx 15 - 25 \text{ В/(см Торр)}$ ). Однако характеристическая энергия, рассчитанная с помощью транспортного сечения [46], сначала уменьшается с  $E/p$ , достигает минимума и затем возрастает. При  $E/p > 25 \text{ В/(см Торр)}$  значения  $D_e/\mu_e$  для сечений [43,44] и [46] близки.

На рис. 8 показано, что расчет с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43,44] дает более высокую подвижность электронов в  $\text{NF}_3$ , чем с транспортным сечением [46] в диапазонах  $E/p < 20$  В/(см Торр) и  $E/p > 150$  В/(см Торр). В диапазоне  $E/p = 15 - 25$  В/(см Торр) имеется более резкий спад подвижности электронов, из-за которого на зависимости дрейфовой скорости электронов  $V_{dr}$  от  $E/p$  появляется участок с отрицательным наклоном – “отрицательная дифференциальная проводимость” ОДП (рис. 9). Такие участки с ОДП, на которых дрейфовая скорость электронов с ростом  $E/p$  уменьшается, наблюдаются во многих газах ( $\text{CH}_4$  [66,68,69],  $\text{BF}_3$  и  $\text{SiF}_4$  [69],  $\text{SiH}_4$  [66,70,71],  $\text{CF}_4$  [66,72-74],  $\text{C}_2\text{F}_6$  [75],  $\text{C}_3\text{F}_8$  [76], смесях молекулярных газов с инертными [77-79] и т.д.) при тех условиях, когда отношение транспортной частоты к напряженности электрического поля  $v_{me}/E$  имеет возрастающий с  $E/p$  участок, т.е.  $v_{me}/p$  увеличивается быстрее, чем  $E/p$ . Как и в случае подвижности, дрейфовая скорость электронов, рассчитанная с помощью комбинированного RB транспортного сечения [43,44] оказалась выше, чем с помощью транспортного сечения [46] в диапазонах  $E/p < 20$  В/(см Торр) и  $E/p > 150$  В/(см Торр).

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДРЕЙФОВОЙ СКОРОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ КРИВЫХ ЗАЖИГАНИЯ ВЧ ЕМКОСТНОГО РАЗРЯДА В $\text{NF}_3$

Для определения дрейфовой скорости электронов в газе используем метод, предложенный ранее в работах [80,81]. Этот метод основан на измерении кривой зажигания ВЧ емкостного разряда с целью определения координат точки поворота (давления  $p_t$  и ВЧ пробойного напряжения  $U_t$ ) на ее диффузионно-дрейфовой ветви. При условиях диффузионно-дрейфовой ветви заряженные частицы рождаются вследствие ионизации молекул газа электронным ударом, а также вследствие электрон-электронной вторичной эмиссии, теряются вследствие диффузионного ухода на стенки и электроды, дрейфа в ВЧ электрическом поле, а в электроотрицательных газах электроны прилипают к молекулам газа. Процессами ион-электронной и ион-ионной рекомбинации можно пренебречь, т.к. при развитии пробоя газа концентрация заряженных частиц низкая. Две другие ветви ВЧ кривых зажигания (пашеновская и мультипакторная) [80] для определения дрейфовой скорости электронов не используются, поэтому мы не будем их подробно описывать. Диффузионно-дрейфовая ветвь хорошо видна для больших зазоров между электродами и частот ВЧ электрического поля (рис. 10). При небольших расстояниях между электродами диффузионно-дрейфовая ветвь может быть почти не видна, что ограничивает применимость метода [80,81] со стороны узких зазоров (низких значений приведенного электрического поля  $E/p$ ).

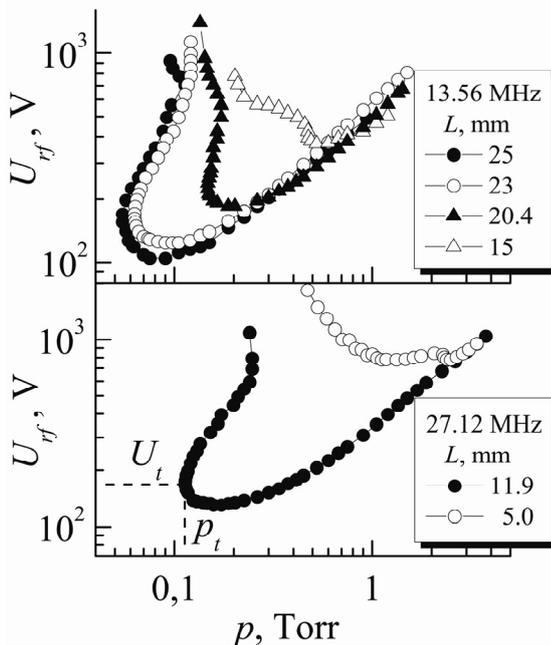


Рис. 10. ВЧ кривые зажигания в  $\text{NF}_3$  при различных расстояниях между электродами  $L$  и ВЧ частотах 13,56 МГц и 27,12 МГц.

Подробное описание метода было приведено, например, в работах [80 - 83], поэтому здесь рассмотрим его кратко.

Запишем уравнение движения центра электронного облака в однородном ВЧ электрическом поле  $E_{rf} \sin \omega t$ :

$$m \frac{d\vec{V}}{dt} = -e\vec{E}_{rf} \sin \omega t - m\vec{V}v_{me}, \quad (4)$$

где  $\vec{V}$  - скорость электрона,  $e$  и  $m$  - заряд и масса электрона, соответственно,  $E_{rf}$  - амплитуда ВЧ поля,  $v_{me}$  - транспортная частота (величина  $v_{me}$  предполагается постоянной),  $\omega = 2\pi f$  - циклическая частота ВЧ поля, и проинтегрируем его. Тогда получим формулы для скорости  $\vec{V}$  и смещения  $\vec{r}$  электронов:

$$\vec{V} = \frac{e\vec{E}_{rf}}{m\sqrt{\omega^2 + v_{me}^2}} \cdot \cos(\omega t + \varphi), \quad (5)$$

$$\vec{r} = \frac{e\vec{E}_{rf}}{m\omega\sqrt{\omega^2 + v_{me}^2}} \cdot \sin(\omega t + \varphi), \quad (6)$$

где  $\varphi = \arctan(v_{me}/\omega)$ . Из (6) видно, что амплитуда смещения  $A$  электронов в ВЧ электрическом поле равна:

$$A = \frac{eE_{rf}}{m\omega\sqrt{\omega^2 + v_{me}^2}} = \frac{V_{dr}}{\omega}, \quad (7)$$

а максимальная мгновенная дрейфовая скорость электронов  $V_{dr}$  дается формулой:

$$V_{dr} = \frac{eE_{rf}}{m\sqrt{\omega^2 + v_{me}^2}}. \quad (8)$$

Далее, кривая зажигания представляет собой зависимость амплитуды ВЧ пробойного напряжения от

давления газа  $U_{rf} = U_{rf}(p)$ , для которой легко получить точку поворота, которая наблюдается при  $dU_{rf}(p)/dp \rightarrow \infty$ . Особенностью этой точки поворота является то, что амплитуда смещения электронов равна половине зазора  $L$  между электродами [80-83]:

$$A = \frac{V_{dr}}{\omega} = \frac{L}{2}. \quad (9)$$

Тогда получим простую формулу для дрейфовой скорости электронов  $V_{dr}$  в точке поворота ВЧ кривой зажигания

$$V_{dr} = \frac{\omega \cdot L}{2} = L \cdot \pi \cdot f. \quad (10)$$

Следовательно, для фиксированных частоты ВЧ электрического поля  $f$  и расстояния между электродами  $L$  дрейфовая скорость электронов в точке поворота ВЧ кривой зажигания одна и та же для различных газов. Однако координаты точки поворота ( $p = p_t$  и  $U_{rf} = U_t$ ) позволяют определить приведенное электрическое поле  $E/p$ , которое различно для каждого газа.

В качестве наглядного примера рассмотрим координаты точки поворота  $p_t = 0,114$  Торр и  $U_t = 168,3$  В для частоты ВЧ поля  $f = 27,12$  МГц и расстояния между электродами  $L = 1,19$  см (см. Рис.10). Тогда получим, что дрейфовая скорость электронов в данной точке поворота равна  $V_{dr} = 1,19 \cdot \pi \cdot 27,12 \cdot 10^6 = 1,014 \cdot 10^8$  см/с. Этой величине дрейфовой скорости соответствует приведенное электрическое поле  $E/p = U_t/(L \cdot p_t) = 1241$  В/(см Торр). Приведенные на рис. 9 экспериментальные значения дрейфовой скорости электронов удовлетворительно согласуются с результатами расчетов с помощью кода Bolsig. Каждая измеренная ВЧ кривая зажигания дает одно значение дрейфовой скорости электронов (при условии, что эта кривая зажигания имеет диффузионно-дрейфовую ветвь с точкой поворота). Поэтому для определения дрейфовой скорости электронов в широком диапазоне  $E/p$  нужно иметь измеренные ВЧ кривые зажигания при различных расстояниях  $L$  между электродами и частотах  $f$  ВЧ электрического поля. Насколько нам известно, в литературе экспериментальные ВЧ кривые зажигания  $NF_3$  пока отсутствуют. Эти кривые зажигания сами по себе представляют большой интерес, так как они показывают, в какой области ВЧ напряжения и давления газа можно зажечь газовый разряд в технологической или исследовательской камере.

Очевидно, что каждая экспериментальная методика имеет свой диапазон условий, в которых она применима. Выше мы уже сказали, что для метода [80,81], во-первых, необходимо наличие на ВЧ кривой зажигания хорошо выраженной диффузионно-дрейфовой ветви с точкой поворота. Далее, должно выполняться определенное соотношение между циклической частотой ВЧ электрического поля  $\omega$  и транспортной частотой  $v_{me}$  (3). В работе [84] показано, что могут иметь место три различных случая. (1). Случай низкой частоты. Циклическая частота ВЧ электрического поля пренебрежимо мала по сравнению с транспортной частотой,  $\omega \ll v_e \ll v_{me}$ . В этом случае функция распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) аналогична ФРЭЭ в постоянном поле, равном по величине ВЧ мгновенному электрическому полю  $E_{rf}(t)$ , так как ФРЭЭ имеет время, чтобы подстроиться под изменение поля. ФРЭЭ модулирована очень сильно. (2). При  $v_e \approx \omega \ll v_{me}$  (случай более высокой частоты  $\omega$ ) временная модуляция функции распределения заметно меньше, чем в первом случае. (3). При  $v_e \ll \omega \approx v_{me}$  ФРЭЭ в ВЧ электрическом поле аналогична ФРЭЭ в постоянном поле, величина которого равна эффективному полю, а временная модуляция ФРЭЭ очень мала.

Поэтому из приведенного выше анализа различных соотношений ВЧ циклической и транспортной частот видно, что метод [80, 81] пригоден, если выполняется условие  $\omega \ll v_{me}$  (анизотропная часть ФРЭЭ “следит” за мгновенным ВЧ электрическим полем). В каждый момент периода ВЧ поля мгновенная скорость электронов совпадает с их дрейфовой скоростью в постоянном электрическом поле, равном по величине мгновенному ВЧ полю.

Теперь проверим, выполняется ли условие  $\omega \ll v_{me}$  для точек поворота на измеренных нами ВЧ кривых зажигания. Возьмем для этого кривые зажигания, измеренные для максимальных расстояний для каждой из ВЧ частот, так как точки поворота находятся при наименьших давлениях газа, чем для более узких зазоров между электродами. Из рис. 10 видно, что для частоты 13,56 МГц при максимальном зазоре 25 мм точка поворота наблюдается при давлении 0,055 Торр. С помощью частот упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами  $NF_3$ , представленных на рис. 4, определим частоту энергетической релаксации  $v_e$  и транспортную частоту  $v_{me}$  для этого давления газа. Полученные зависимости этих частот  $v_e$  и  $v_{me}$  сравниваются с циклической частотой ВЧ электрического поля  $\omega = 2 \cdot \pi \cdot 13,56 \cdot 10^6 = 8,52 \cdot 10^7$  с<sup>-1</sup> на рис. 11. Из рисунка видно, что для приведенного электрического поля в точке поворота  $E/p$  (показанного на рисунке вертикальной линией)  $v_e = 1,43 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup> и  $v_{me} = 7,65 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup>, то есть  $v_{me} \approx 9 \cdot \omega$ . В случае ВЧ частоты 27,12 МГц ( $\omega = 1,7 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup>) и зазора между электродами 11,9 мм точка поворота кривой зажигания находится при давлении газа 0,114 Торр. Из рис. 12 следует, что в данной точке поворота  $v_e = 3,3 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup> и  $v_{me} = 16,7 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup>, то есть  $v_{me} \approx 9,8 \cdot \omega$ . Поэтому можно принимать, что  $\omega \ll v_{me}$ . Из представленных на рис. 10 ВЧ кривых зажигания легко получить, что во всех точках поворота выполняется это условие  $\omega \ll v_{me}$ , то есть транспортная частота достаточно высока, чтобы дрейфовая скорость электронов успела подстроиться под изменение ВЧ электрического поля и

соответствовала его мгновенной величине. Следовательно, в момент пробоя газа в максимальном (амплитудном) ВЧ электрическом поле  $E_{rf}$  дрейфовая скорость электронов также достигает максимального значения, которое соответствует дрейфовой скорости в постоянном поле  $E = E_{rf}$ . Поэтому не удивительно, что ВЧ приведенное электрическое поле  $E_{rf}/p$  на рис. 9 автоматически заменено на постоянным полем  $E/p$  равной величины.

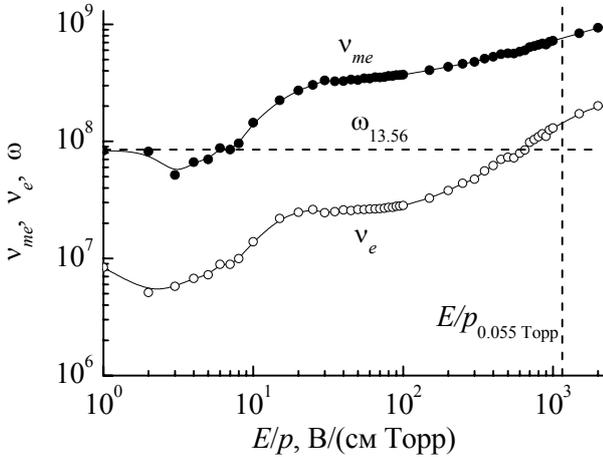


Рис. 11. Зависимость частоты релаксации энергии  $\nu_e$  и транспортной частоты  $\nu_{me}$  от  $E/p$  при давлении  $\text{NF}_3$   $p = 0,055$  Торр ( $E/p_{0,055 \text{ Торр}}$  означает приведенное электрическое поле, соответствующее точке поворота на ВЧ кривой зажигания для  $L = 25$  мм на рис. 10;  $\omega$  - циклическая частота для 13,56 МГц).

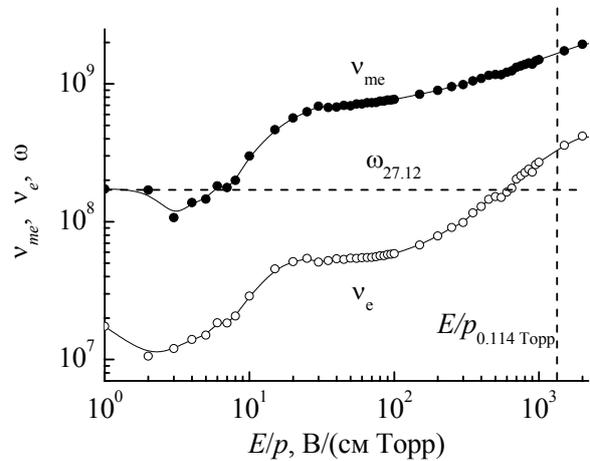


Рис. 12. Зависимость частоты релаксации энергии  $\nu_e$  и транспортной частоты  $\nu_{me}$  от  $E/p$  при давлении  $\text{NF}_3$   $p = 0,114$  Торр ( $E/p_{0,114 \text{ Торр}}$  означает приведенное электрическое поле, соответствующее точке поворота на ВЧ кривой зажигания для  $L = 11,9$  мм на рис. 10;  $\omega$  - циклическая частота для 27,12 МГц).

Очевидно, что данный метод определения дрейфовой скорости электронов  $V_{dr}$  не обеспечивает такой точности, как, например, времяпролетный метод, и полученные величины  $V_{dr}$  не могут быть использованы для уточнения сечений столкновений электронов с молекулами газа. Однако наши результаты измерения  $V_{dr}$  позволяют оценить, насколько точными являются результаты расчетов дрейфовой скорости электронов с помощью численных кодов, и могут быть использованы для определения параметров плазмы с помощью гидродинамического моделирования.

## ВЫВОДЫ

Таким образом, в настоящей работе проведен поиск и анализ сечений упругих и неупругих столкновений электронов с молекулами  $\text{NF}_3$ . Данные сечения были добавлены в файл сечений кода Bolsig, с помощью которого затем были рассчитаны такие параметры переноса электронов, как: 1) первый коэффициент Таунсенда для ионизации (как полный, так и парциальный для каждого сорта образующихся положительных ионов); 2) коэффициент диссоциативного прилипания; 3) частоты упругих и неупругих столкновений; 4) доля энергии, теряемая электронами при столкновениях с молекулами  $\text{NF}_3$ ; 5) средняя и характеристическая энергии электронов; 6) подвижность и дрейфовая скорость электронов. Показано, что равенство частот ионизации и прилипания электронов выполняется в приведенном электрическом поле  $(E/p)_c = 128,2$  В/(см Торр) для комбинированного RB транспортного сечения [43,44] и при  $(E/p)_c = 124,4$  В/(см Торр) для транспортного сечения [46]. Ионизация молекул  $\text{NF}_3$  идет преимущественно по диссоциативному каналу с образованием положительных ионов  $\text{NF}_2^+$ , появление других сортов ионов менее вероятно. В слабом приведенном электрическом поле  $E/p < 10$  В/(см Торр) прилипание электронов к молекулам  $\text{NF}_3$  оказывает большое влияние на их перенос, а частота прилипания дает примерно 10 % вклад в полную частоту столкновений. Из-за этого доля энергии, теряемая электроном при одном столкновении с молекулой  $\text{NF}_3$ , не опускается ниже 7,6 %, хотя обычно она в слабом электрическом поле мала и при только упругих столкновениях составляет  $\delta \approx 2 \cdot m/M \ll 1$ . Показано, что в диапазоне  $E/p = 15 - 25$  В/(см Торр) на зависимости дрейфовой скорости электронов от  $E/p$  появляется участок с отрицательным наклоном («отрицательная дифференциальная проводимость»). Из координат точек поворота на измеренных нами ВЧ кривых зажигания определены значения дрейфовой скорости электронов в  $\text{NF}_3$ , которые удовлетворительно согласуются с результатами расчетов с помощью кода Bolsig.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bower D.H. Planar Plasma Etching of Polysilicon Using  $\text{CCl}_4$  and  $\text{NF}_3$  // J. Electrochem. Soc. – 1982. – Vol.129. – P.795.
2. Greenberg K.E., Verdeyen J.T. Kinetic processes of  $\text{NF}_3$  etchant gas discharges // J. Appl. Phys. – 1985. – Vol.57. – P.1596.

3. Chow T.P., Fanelli G.M. Reactive Ion Etching of Silicon and Silicides in SF<sub>6</sub> or NF<sub>3</sub>/CCl<sub>4</sub> or HCl Mixtures // J. Electrochem. Soc. – 1985. – Vol. 132. – P.1969.
4. Ishii I., Brandt W.W. Plasma and Reagent Pulse Induced Transients in the Etching of Si by NF<sub>3</sub> // J. Electrochem. Soc. – 1986. – Vol.133. – P.1240.
5. Nordheden K.J., Verdeyen J.T. The Effect of Oxygen on the Etch Rate of NF<sub>3</sub> Discharges // J. Electrochem. Soc. – 1986. – Vol.133. – P.2168.
6. Blom H.-O., Berg S., Nender C., Norstrom H. Silicon etching in a direct current glow discharge of CF<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> and NF<sub>3</sub>/O<sub>2</sub> // J. Vac. Sci. Technol. B. - 1989. - Vol.7. - P.1321.
7. Perrin J., Meot J., Siefert J.-M., Schmitt J. Mass spectrometric study of NF<sub>3</sub> plasma etching of silicon // Plasma Chem. Plasma Process. - 1990. - Vol.10. - P.571.
8. Sidhwa A.J., Goh F.C., Naseem H.A., Brown W.D. Reactive ion etching of crystalline silicon using NF<sub>3</sub> diluted with H<sub>2</sub> // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1993. - Vol.11. - P.1156.
9. Konuma M., Bauser E. Water vapor controlling selective reactive ion etching of SiO<sub>2</sub>/Si in NF<sub>3</sub> plasma // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.74. – P.1575.
10. Langan J.G., Beck S.E., Felker B.S., Rynders S.W. The role of diluents in electronegative fluorinated gas discharges // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol.79. – P.3886.
11. Meeks E., Larson R.S., Vosen S.R. Shon J.W. Modeling Chemical Downstream Etch Systems for NF<sub>3</sub>/O<sub>2</sub> Mixtures // J. Electrochem. Soc. – 1997. – Vol.144. – P.357.
12. Richter Ch., Espertshuber K., Wagner Ch., Eickhoff M., Krotz G. Rapid plasma etching of cubic SiC using NF<sub>3</sub>/O<sub>2</sub> gas mixtures // Materials Sci. Engineering B. - 1997. - Vol.46. - P.160.
13. Koike K., Fukuda T., Fujikawa Sh., Saeda M. Study of CF<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>6</sub>, SF<sub>6</sub> and NF<sub>3</sub> Decomposition Characteristics and Etching Performance in Plasma State // Jpn. J. Appl. Phys. - 1997. - Vol.36. - P.5724.
14. Kastenmeier B.E.E., Matsuo P.J., Oehrlein G.S., Langan J.G. Remote plasma etching of silicon nitride and silicon dioxide using NF<sub>3</sub>/O<sub>2</sub> gas mixtures // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1998. - Vol.16. - P.2047.
15. Langan J.G., Rynders S.W., Felker B.S., Beck S.E. Electrical impedance analysis and etch rate maximization in NF<sub>3</sub>/Ar discharges // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1998. - Vol.16. - P.2108.
16. Matsuo P.J., Kastenmeier B.E.E., Oehrlein G.S., Langan J.G. Silicon etching in NF<sub>3</sub>/O<sub>2</sub> remote microwave plasmas // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1999. - Vol.17. - P.2431.
17. Hays D.C., Jung K.B., Hahn Y.B., Lambers E.S., Pearton S.J., Donahue J., Johnson D., Shul R.J. Comparison of F<sub>2</sub>-Based Gases for High-Rate Dry Etching of Si // J. Electrochem. Soc. – 1999. – Vol.146. – P.3812.
18. Kastenmeier B.E.E., Matsuo P.J., Oehrlein G.S., Ellefson R.E., Langan J.G. Surface etching mechanism of silicon nitride in fluorine and nitric oxide containing plasmas // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2001. - Vol.19. - P.25.
19. Tasaka A., Takahashi K., Tanaka K., Shimizu K., Mori K., Tada S., Shimizu W., Abe T., Inaba M., Ogumi Z., Tojo T. Plasma etching of SiC surface using NF<sub>3</sub> // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2002. - Vol.20. - P.1254.
20. Reyes-Betanzo C., Moshkalyov S.A., Ramos A.C.S., Swart J.W. Mechanisms of silicon nitride etching by electron cyclotron resonance plasmas using SF<sub>6</sub>- and NF<sub>3</sub>-based gas mixtures // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2004. - Vol.22. - P.1513.
21. Kim B., Lee B.T. Prediction of SiC etching in a NF<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> plasma using neural network // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2004. - Vol.22. - P.2517.
22. Tasaka A., Watanabe E., Kai T., Shimizu W., Kanatani T., Inaba M., Tojo T., Tanaka M., Abe T., Ogumi Z. Effect of oxygen concentration on the spike formation during reactive ion etching of SiC using the mixed gas plasma of NF<sub>3</sub> and O<sub>2</sub> // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2007. - Vol.25. - P.391.
23. Lisovskiy V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V., Yegorenkov V. Applying RF current harmonics for end-point detection during etching multi-layered substrates and cleaning discharge chambers with NF<sub>3</sub> discharge // Vacuum. - 2008. - Vol.82. -P.321.
24. Tasaka A., Yamada H., Nonoyama T., Kanatani T., Kotaka Y., Tojo T., Inaba M. Effects of type of reactor, crystallinity of SiC, and NF<sub>3</sub> gas pressure on etching rate and smoothness of SiC surface using NF<sub>3</sub> gas plasma // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2009. - Vol.27. - P.1369.
25. Veilleux J.M., El-Genk M.S., Chamberlin E.P., Munson C., FitzPatrick J. Etching of UO<sub>2</sub> in NF<sub>3</sub> RF plasma glow discharge // J. Nuclear Mater. - 2000. - Vol.277. - P.315.
26. Lee R.-L., Terry F.L. Reactive-ion etching of tungsten silicide using NF<sub>3</sub> gas mixtures // J. Vac. Sci. Technol. B. - 1991. - Vol.9. - P.2747.
27. Bruno G., Capezzuto P., Cicala G., Manodoro P. Study of the NF<sub>3</sub> plasma cleaning of reactors for amorphous silicon deposition // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1994. - Vol.12. - P.690.
28. Raoux S., Tanaka T., Bhan M., Ponnakanti H., Seamons M., Deacon T., Xia L.-Q., Pham F., Silvetti D., Cheung D., Fairbairn K. Remote microwave plasma source for cleaning chemical vapor deposition chambers: Technology for reducing global warming gas emissions // J. Vac. Sci. Technol. B. - 1999. - Vol.17. - P.477.
29. Entley W.R., Langan J.G., Felker B.S., Sobolewski M.A. Optimizing utilization efficiencies in electronegative discharges: The importance of the impedance phase angle // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol.86. – P.4825.
30. Kastenmeier B.E.E., Oehrlein G.S., Langan J.G., Entley W.R. Gas utilization in remote plasma cleaning and stripping applications // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2000. - Vol.18. - P.2102.
31. Reichardt H., Frenzel A., Schober K. Environmentally friendly wafer production: NF<sub>3</sub> remote microwave plasma for chamber cleaning // Microelectronic Engineering. - 2001. - Vol.56. - P.73.
32. Hsueh H.-P., McGrath R.T., Ji B., Felker B.S., Langan J.G., Karwacki E.J. Ion energy distributions and optical emission spectra in NF<sub>3</sub>-based process chamber cleaning plasmas // J. Vac. Sci. Technol. B. - 2001. - Vol.19. - P.1346.
33. Ji B., Elder D.L., Yang J.H., Badowski P.R., Karwacki E.J. Power dependence of NF<sub>3</sub> plasma stability for in situ chamber

- cleaning // *J. Appl. Phys.* – 2004. – Vol.95. – P.4446.
34. Ranade R.M., Ang S.S., Brown W.D. Effects of nitrogen trifluoride on the properties of plasma-enhanced chemical-vapor-deposited semi-insulating polysilicon films // *Thin Solid Films.* - 1995. - Vol.258. - P.292.
  35. Gomez-Aleixandre C., SanchezGarrido O., Albella J.M. Oxidation kinetics of plasma-enhanced chemical vapor deposition silicon nitride films deposited from  $\text{SiH}_4/\text{NH}_3/\text{NF}_3/\text{N}_2$  mixtures // *J. Vac. Sci. Technol. B.* - 1990. - Vol.8. - P.540.
  36. Lu H.Y., Petrich M.A.  $\text{NF}_3$  plasma treatment of polymeric dielectrics // *J. Vac. Sci. Technol. A.* - 1992. - Vol.10. - P.450.
  37. McDaniel E.W., Nighan W.L. (Eds) *Gas lasers.* - New York: Academic Press, 1982. - 548 p.
  38. Brunner W., Junge K. *Wissenspeicher Lasertechnik.* - Leipzig: VEB Fachbuchverlag, 1987. - 544 p.
  39. Trager F. (Ed.) *Springer Handbook of Lasers and Optics.* - New York: Springer, 2007. - 1331 p.
  40. Lawrence J., Pou J., Low D.K.Y., Toyserkani E. (Eds.) *Advances in laser materials processing: Technology, research and applications.* - Great Abington: Woodhead Publishing, 2010. - 828 p.
  41. Levitskii S.M. Potential of space and electrode sputtering under high-frequency discharge in the gas // *Sov. Phys.–Tech. Phys.* - 1957. - Vol.2. - P.887.
  42. Jiao C.Q., DeJoseph C.A., Haaland P.D., Garscadden A. in *Gaseous Dielectrics IX* (Edited by Christophorou L.G. and Olthoff J.K.). - New York: Kluwer Academic, 2001. - p.127.
  43. Rescigno T.N. Low-Energy Electron Collision Processes in  $\text{NF}_3$  // *Phys. Rev. A.* - 1995. - Vol.52. - P.329.
  44. Boesten L., Tachibana Y., Nakato Y., Shinohara T., Tanaka H., Dillon M.A. Vibrationally inelastic and elastic cross sections for  $e + \text{NF}_3$  collisions // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* - 1996. - Vol.29. - P.5475.
  45. Dyatko N.A., Napartovich A.P. Electron swarm characteristics in Ar:  $\text{NF}_3$  mixtures under steady-state Townsend conditions // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 1999. - Vol.32. - P.3169.
  46. Jucoski E., Bettega M.H.F. Elastic scattering of low-energy electrons by  $\text{NF}_3$  // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* - 2002. - Vol.35. - P.783.
  47. Reese R.M., Dibeler V.H. Ionization and Dissociation of Nitrogen Trifluoride by Electron Impact // *J. Chem. Phys.* - 1956. - Vol.24. - P.1175.
  48. Tarnovsky V., Levin A., Becker K., Basner R., Schmidt M. Electron impact ionization of the  $\text{NF}_3$  molecule // *Int. J. Mass. Spectrom. Ion Processes.* - 1994. - Vol.133. - P.175.
  49. Becker K.H., Tarnovsky V. Electron-impact ionization of atoms, molecules, ions and transient species // *Plasma Sources Sci. Technol.* - 1995. - Vol.4. - P.307.
  50. Deutsch H., Mark T.D., Tarnovsky V., Becker K., Cornelissen C., Cespiva L., Bonacic-Koutecky V. Measured and calculated absolute total cross-sections for the single ionization of  $\text{CF}_x$  and  $\text{NF}_x$  by electron impact // *Intern. J. Mass Spectrometry Ion Processes.* - 1994. - Vol.137. - P.77.
  51. Deutsch H., Becker K., Matt S., Mark T.D. Theoretical determination of absolute electron-impact ionization cross sections of molecules // *Intern. J. Mass Spectrometry.* - 2000. - Vol.197. - P.37.
  52. Haaland P.D., Jiao C.Q., Garscadden A. Ionization of  $\text{NF}_3$  by electron impact // *Chem. Phys. Lett.* - 2001. - Vol.340. - P.479.
  53. Harland P.W., Franklin J.L. Partitioning of excess energy in dissociative resonance capture processes // *J. Chem. Phys.* - 1974. - Vol.61. - P.1621.
  54. Sides G.D., Tiernan T.O. Dissociative electron attachment in nitrogen trifluoride // *J. Chem. Phys.* - 1977. - Vol.67. - P. 2382
  55. Miller Th.M., Friedman J.F., Miller A.E.S., Paulson J.F. Thermal electron attachment to  $\text{NF}_3$ ,  $\text{PF}_3$ , and  $\text{PF}_5$  // *Intern. J. Mass Spectrometry Ion Processes.* - 1995. - Vol.149/150. - P.111.
  56. Nandi D., Rangwala S.A., Kumar S.V.K., Krishnakumar E. Absolute cross sections for dissociative electron attachment to  $\text{NF}_3$  // *Intern. J. Mass Spectrometry.* - 2001. - Vol.205. - P.111.
  57. Gallagher J.W., Beaty E.C., Dutton O., Pitchford L.C. An Annotated Compilation and Appraisal of Electron Swarm Data in Electronegative Gases // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* - 1983. - Vol.12. - P.109.
  58. Christophorou L.G., Olthoff J.K., Rao M.V.V.S. Electron Interactions with  $\text{CF}_4$  // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* - 1996. - Vol.25. - P.1341.
  59. Christophorou L.G., Olthoff J.K. Electron Interactions With  $\text{SF}_6$  // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* - 2000. - Vol.29. - P.267.
  60. Lisovskiy V., Martins S., Landry K., Douai D., Booth J.-P., Cassagne V. Electron drift velocity in  $\text{NH}_3$  in strong electric fields determined from RF breakdown curves // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 2005. - Vol.38. - P.872.
  61. Lisovskiy V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V., Yegorenkov V. Electron drift velocity in  $\text{N}_2\text{O}$  in strong electric fields determined from RF breakdown curves // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 2006. - Vol.39. - P.1866.
  62. Kastenmeier B.E.E., Matsuo P.J., Oehrlein G.S., Langan J.G. Remote plasma etching of silicon nitride and silicon dioxide using  $\text{NF}_3/\text{O}_2$  gas mixtures // *J. Vac. Sci. Technol. A.* - 1998. - Vol.16. - P.2047.
  63. Lisovskiy V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V., Yegorenkov V. RF discharge dissociative mode in  $\text{NF}_3$  and  $\text{SiH}_4$  // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 2007. - Vol.40. - P.6631.
  64. Engel A. *Ionized gases.* - Oxford: Clarendon Press, 1955. - 332 p.
  65. Christophorou L.G., Carter J.G. Energy lost by slow electrons in collisions with molecules // *Chem. Phys. Lett.* - 1968. - Vol.2. - P.607.
  66. Raju G.G. *Gaseous electronics: theory and practice.* - Boca Raton, FL: CRC Press, 2006. - 680 p.
  67. Phelps A.V. in *Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions* (Eds. by Pitchford L.C., McKoy B.V., Chutjian A. and Trajmar S.). - New York: Springer, 1987. - 127p.
  68. Shimura N., Makabe T. Structures of velocity distribution functions and transport parameters of the electron swarm in  $\text{CH}_4$  in a DC electric field // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 1992. - Vol.25. - P.751.
  69. Hunter S.R., Carter J.G., Christophorou L.G. Electron attachment and ionization coefficients and electron drift velocities in  $\text{BF}_3$  and  $\text{SiF}_4$  // *J. Appl. Phys.* - 1989. - Vol.65. - P.1858.
  70. Kurachi M., Nakamura Y. Electron collision cross sections for the monosilane molecule // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 1989. - Vol.22. - P.107.
  71. Lisovskiy V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V., Yegorenkov V. Electron drift velocity in silane in strong electric

- fields determined from RF breakdown curves // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 2007. - Vol.40. - P.3408.
72. Christophorou L.G., Olthoff J.K., Rao M.V.V.S. Electron Interactions with  $\text{CF}_4$  // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* - 1996. - Vol.25. - P.1341.
  73. Bordage M.C., Segur P., Chouki A. Determination of a set of electron impact cross sections in tetrafluoromethane consistent with experimental determination of swarm parameters // *J. Appl. Phys.* - 1996. - Vol.80. - P.1325.
  74. Bordage M.C., Segur P., Christophorou L.G., Olthoff J.K. Boltzmann analysis of electron swarm parameters in  $\text{CF}_4$  using independently assessed electron-collision cross sections // *J. Appl. Phys.* - 1999. - Vol.86. - P.3558.
  75. Christophorou L.G., Olthoff J.K. Electron Interactions with  $\text{C}_2\text{F}_6$  // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* - 1998. - Vol.27. - P.1.
  76. Christophorou L.G., Olthoff J.K. Electron Interactions With  $\text{C}_3\text{F}_8$  // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* - 1998. - Vol.27. - P.889.
  77. Christophorou L.G., McCorkle D.L., Maxey D.V., Carter J.G. Fast gas mixtures for gas-filled particle detectors // *Nuclear Instruments and Methods.* - 1979. - Vol.163. - P.141.
  78. Soejima H., Nakamura Y. Measurement of electron swarm parameters in  $\text{GeH}_4$ -Ar mixtures // *J. Vac. Sci. Technol. A.* - 1993. - Vol.11. - P.1161.
  79. Shishikura Y., Asano K., Nakamura Y. Low-energy electron collision cross sections of ethane by electron swarm study // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 1997. - Vol.30. - P.1610.
  80. Lisovskiy V.A., Yegorenkov V.D. RF breakdown of low-pressure gas and a novel method for determination of electron-drift velocities in gases // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 1998. - Vol.31. - P.3349.
  81. Lisovskiy V.A., Yegorenkov V.D. Electron-drift velocity determination in  $\text{CF}_4$  and  $\text{SF}_6$  in a strong electric field from breakdown curves of low-pressure RF discharge // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 1999. - Vol.32. - P.2645.
  82. Lisovskiy V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V., Yegorenkov V. Electron drift velocity in argon, nitrogen, hydrogen, oxygen and ammonia in strong electric fields determined from RF breakdown curves // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 2006. - Vol.39. - P.660.
  83. Lisovskiy V., Yegorenkov V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V. Electron drift velocity in  $\text{SF}_6$  in strong electric fields determined from RF breakdown curves // *J. Phys. D: Appl. Phys.* - 2010. - Vol.43. - P.385203.
  84. Loureiro J. Time-dependent electron kinetics in  $\text{N}_2$  and  $\text{H}_2$  for a wide range of the field frequency including electron-vibration superelastic collisions // *Phys. Rev. E.* - 1993. - Vol.47. - P.1262.

УДК 621.039.53:533.9

## ИОННОЕ И ЛАЗЕРНОЕ ОБЛУЧЕНИЕ СПЛАВОВ ЦИРКОНИЯ

**В.Г. Кириченко, Т.А. Коваленко***Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина**61108, г. Харьков, пр. Курчатова, 31**E-mail: val\_kir@mail.ru*

Received August 16, 2013

Кратко представлены результаты исследования повреждения циркониевых сплавов при ионном и лазерном облучении, приводящим к образованию аморфных фаз в слое глубиной до 3000 Å. Обнаружено, что термический отжиг облученных фольг сплавов проходит в две стадии. В результате лазерного облучения на поверхности сплавов формируются волновые структуры за счет быстрого застывания жидкого расплава, фронт которого движется с большой скоростью  $V=(0,8-1,0)\cdot 10^3$  м/с.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** цирконий, сплавы, радиационная стойкость, поверхность, ионное и лазерное облучение, аморфизация, кристаллизация

### ION AND LASER IRRADIATION OF ZIRCONIUM ALLOYS

**V.G. Kirichenko, T.A. Kovalenko***V.N. Karazin Kharkiv National University**31 Kurchatov St., Kharkov, 61108, Ukraine*

The ion and laser irradiation of the zirconium alloys leads to the formation of amorphous phases in a layer of depth up to 3000 Å. It was found that thermal annealing of the irradiated foils of alloys held to a two stage. In the result of laser irradiation on the surface of the alloys the wave structures are formed due to the rapid solidification of a liquid melt, whose front is moving at high speed  $V=(0,8-1,0)\cdot 10^3$  m/s.

**KEY WORDS:** Zirconium, alloys, radiation stability, surface, ion irradiation, amorphization, crystallization

### ИОННЕ ТА ЛАЗЕРНЕ ОПРОМІНЕННЯ СПЛАВІВ ЦИРКОНІЮ

**В.Г. Кіріченко, Т.О. Коваленко***Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна**61108, Харків, пр. Курчатова, 31*

Стисло розглянуто результати аналізу іонного та лазерного опромінення сплавів цирконію, що призводить до утворення аморфних фаз у шарі глибиною до 3000 Å. Виявлено, що термічний відпал опромінених фольг сплавів проходить у дві стадії. В результаті лазерного опромінення на поверхні сплавів формуються хвильові структури за рахунок швидкого застигання рідкого розплаву, фронт якого рухається з великою швидкістю  $V=(0,8-1,0)\cdot 10^3$  м/с.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** цирконій, сплави, радіаційна стійкість, поверхня, іонне опромінення, аморфізація, кристалізація

Сплавы циркония с высокой температурой плавления, с низким сечением поглощения тепловых нейтронов, совместимые с ядерным горючим, с высокими деформируемостью и свариваемостью используются в ядерных реакторах на тепловых нейтронах при обогащении топлива до 5% и степенью выгорания до 65 МВт ·сут/кг U [1]. Относительная доля поврежденных ТВЭЛов 0,027-0,001 % [2,3]. К основным причинам повреждения ТВЭЛов относятся механическое взаимодействие топливных таблеток с оболочкой, радиационный рост элементов конструкции, неодинаковое изменение размеров стандартных ТВЭЛов, коррозионное повреждение материала оболочки, коррозионное растрескивание за счет выделения продуктов деления, фреттинг-коррозия, искривление ТВЭЛов под действием облучения, нарушение механической целостности оболочек, внешнее истирание оболочки и т.д. Для оценки радиационной стойкости сплавов циркония целесообразно использовать имитацию ионным облучением, приводящим к образованию радиационных дефектов в поверхностном слое до 100 нм со скоростью набора дозы ( $10^{-2}$ - $10^{-3}$  сна/с), что значительно превышает скорость набора дозы в исследовательских и энергетических реакторах ( $10^{-6}$ - $10^{-8}$  сна/с). В имитационных экспериментах используются: электронное излучение, ионное излучение, мощное  $\gamma$ -излучение. К преимуществам лазерной обработки: упрочнение поверхности; создание поверхностного излучения значительных площадей без охрупчивания, растрескивания, деформирования, отслаивания; легирования различными элементами с помощью излучения лазера; получение заданного микрорельефа поверхности; отсутствие деформации обрабатываемых деталей за счет локальности термообработки; исключение финишной обработки; отсутствие механического воздействия на материал.

Характеристики имитационных экспериментов приведены в таблице. Оценка критерия подобия при облучении в нашем случае дает для параметра соответствия различие в 30-40%, что является удовлетворительным критерием на фоне идеального соответствия, равного 1. Кроме того, следует учитывать, что в случае применяемого нами метода МСКЭ глубина анализируемого слоя составляет 100-300 нм, что хорошо согласуется с глубиной повреждаемого ионами слоя при имитационном облучении.

Таблица

## Характеристики имитационных экспериментов

Основные преимущества	Параметры	Критерии
Экспрессность, точный контроль параметров облучения, исследования влияния различных факторов на образование дефектов при облучении, отсутствие наведенной активности, экономичность проведения экспериментов.	Ионная имитация реакторных повреждений происходит с более (на 2-3 порядка) высокими скоростями создания повреждений. Нарушение подобия диффузионных процессов по сравнению с реакторным облучением. Степень повреждаемости неоднородна по глубине материала. Необходимо знание пространственного распределения дозы облучения $P(x)$ . Необходим контроль процессов формирования дислокационной структуры в облучаемом материале, фазового состава на разных стадиях облучения.	Соблюдение равенства основных характеристик условий облучения [15]: - скоростей создания радиационных повреждений - функций распределения дефектов по энергиям ПВА - скоростей образования продуктов ядерных реакций - равенства дозы облучения в смещениях на атом; - соответствия функций распределения дефектов по энергиям ПВА; -- равенства отношения скоростей дефектообразования и наработки газовых трансмутантов; - подобия протекания диффузионных процессов.

Ядерно-физические методы микроскопического исследования твердых тел широко используются для изучения циркониевых сплавов, аустенитных и ферритных сталей. Применение мессбауэровской спектроскопии при изучении циркония и его сплавов с добавками  $Fe^{57}$  и  $Sn^{119}$  способствовало получению новых данных о структуре и фазовом составе интерметаллических фаз [3].

Целью настоящей работы является исследование повреждения циркониевых сплавов при ионном и лазерном облучении.

## МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для проведения исследования были изготовлены сплавы: Zr-0,31%Fe; Zr-0,63%Fe; Zr-0,31%Fe-M (M=1%Sn; 0,28V; 0,3%Cr; 0,3-0,5%Mo; 0,5-2,5%Nb; 1%Ta; 0,3%Cu) и Zr-0,5%Fe-0,5%Sn-1%Nb). Методика их приготовления описана в [4]. Добавки железа обогащены стабильным изотопом  $Fe^{57}$ . Перед облучением деформированные фольги отжигали в вакууме  $1,3 \cdot 10^4$  Па. Облучение ионами  $Fe^{4+}$  с энергий  $E = 600$  кэВ флюенсом  $\Phi = 2 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2}$  проводили на ускорителе тяжелых ионов. После облучения проводили изохронный отжиг в диапазоне 370-970 К. Импульсное лазерное облучение проводили с помощью лазера АИГ:  $Nd^{3+}$  с энергией 4-5 Дж в импульсе длительностью 30-50 нс. Использовалась мессбауэровская спектроскопия на ядрах  $^{57}Fe$  и  $^{119}Sn$  в геометрии обратного рассеяния с регистрацией электронов внутренней конверсии (МСКЭ). Рентгенографическое исследование сплавов проводили на установке ДРОН-3,0 в  $Cu-k_{\alpha}$  - излучении. Рентгеноспектральный анализ поверхности отожженных образцов сплавов циркония производили на спектрометре "Самбах MBX 268". Получены распределения ряда легирующих добавок и O, N, C по сечению интерметаллидов в поверхностном слое.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные подобным образом расчетные профили распределения имплантированных атомов Fe и образовавшихся дефектов для сплава несколько отличаются от чистого циркония, что обусловлено сегрегацией интерметаллидов в данном сплаве в приповерхностном слое (рис. 1-4).

Профили концентрации имплантированных ионов железа, как и профили повреждений, на образце сплава находятся ближе к поверхности, чем на образце чистого циркония. Уровень радиационных повреждений (смещений на атом - сна)  $D = \Phi \times \sigma_d \times t$ , где  $\Phi$  – плотность потока ионов;  $\sigma_d$  – поперечное сечение;  $t$  – время облучения. Максимум концентрации внедрённых атомов  $C_{MAX}$  находится на глубине  $R_p$  ( $< R_p >$ ) от

поверхности и равен  $C_{MAX} = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}}$ . Концентрация  $C(x)$  внедренных атомов в аморфных мишенях как функция расстояния от поверхности выражается соотношением

$$C(x) = \frac{\Phi}{\sqrt{2\pi\Delta R_p}} \exp\left(-\frac{(x - \bar{R}_p)^2}{2 < \Delta R_p >^2}\right), \quad (1)$$

где  $x$  – расстояние от поверхности образца.

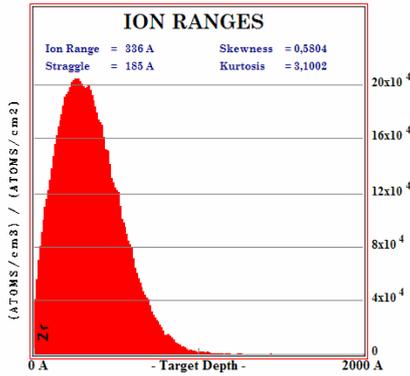


Рис. 1. Расчетные зависимости ионного профиля для E=60 кэВ

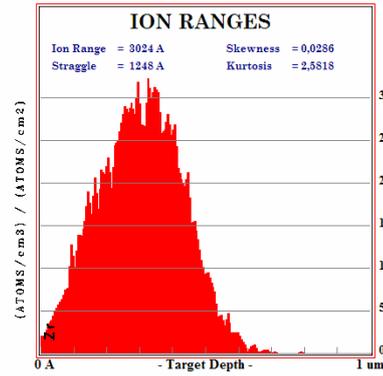


Рис. 2. Расчетные зависимости ионного профиля для E=600 кэВ

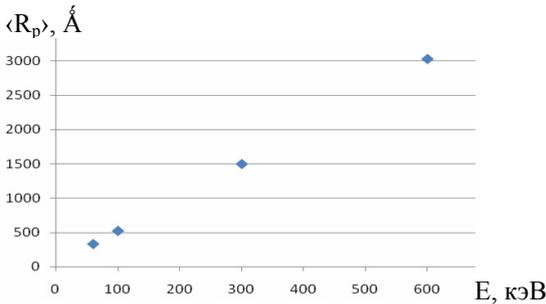


Рис. 3. Зависимость среднего пробега ионов железа в чистом цирконии от энергии ионов

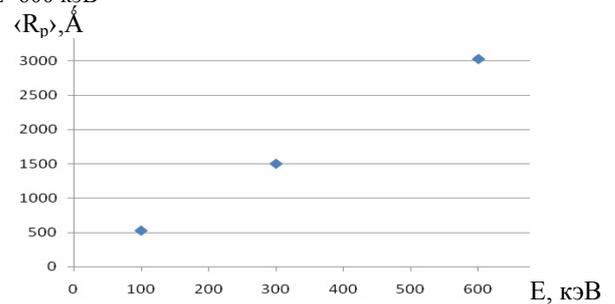


Рис. 4. Зависимость среднего пробега ионов железа в сплаве цирконий-1% ниобия от энергии ионов

Следует отметить, что в вышеприведенных рассуждениях не учитывалось диффузионное перераспределение внедренных атомов. Отметим, что вышеприведенные формулы можно использовать для расчета распределения имплантированных ионов в аморфных, поликристаллических твердых телах, если температура во время имплантации и отжига достаточно низкая и не вызывает перераспределения имплантированных примесей вследствие диффузии. Полученная линейная зависимость (рис. 3,4) среднего пробега ионов железа от энергии ионов связана как с возможностью выбора энергии ионов, так и используемой в расчете моделью.

На рис. 5,6 приведены мессбауэровские спектры необлученной и облученной сторон фольги сплава Zr-Fe.

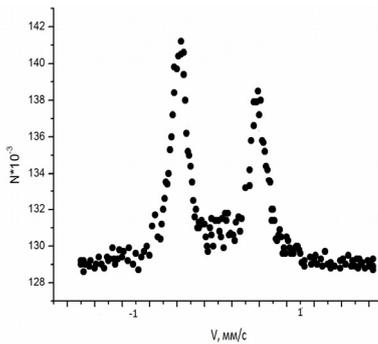


Рис. 1. МСКЭ спектр необлученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 970 К, 1 ч

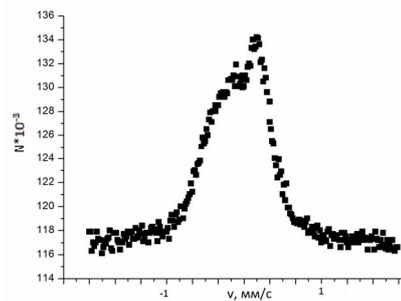


Рис. 2. МСКЭ спектр облученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe

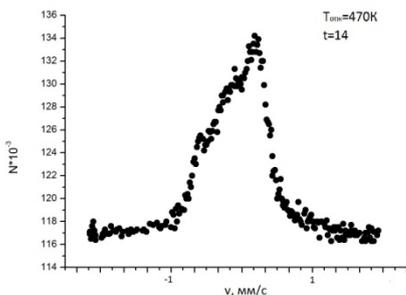


Рис. 3 МСКЭ спектр облученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 470 К, 1 ч

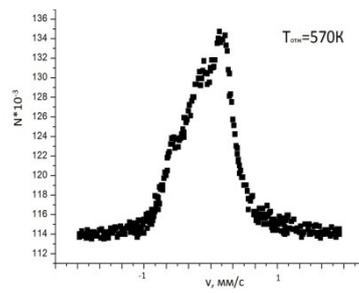


Рис. 4. МСКЭ спектр облученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 570 К, 1 ч

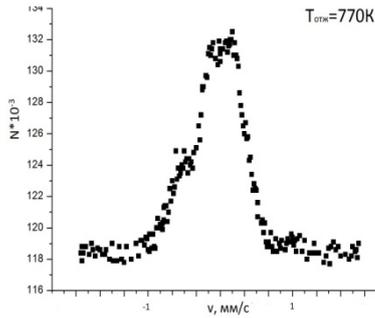


Рис. 5. МСКЭ спектр облученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 770 К, 1 ч

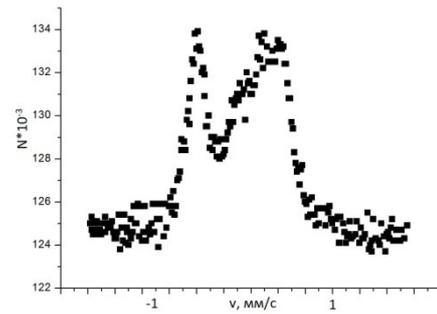


Рис. 6. МСКЭ спектр облученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 870 К, 1 ч

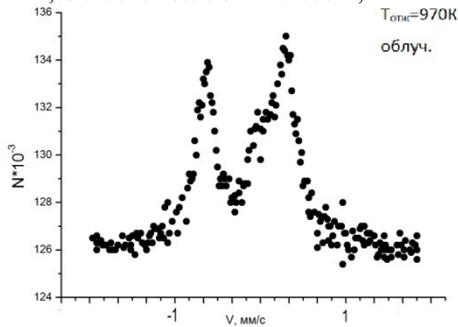


Рис. 7. МСКЭ спектр облученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 970 К, 1 ч

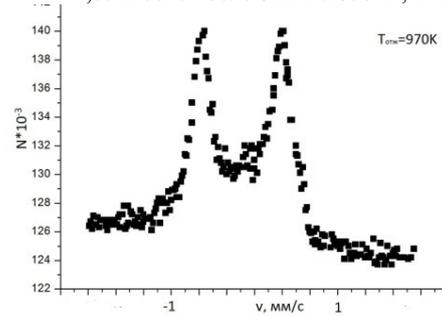


Рис. 8. МСКЭ спектр необлученной стороны фольги сплава Zr-1,03 ат%Fe после отжига 970 К, 1 ч

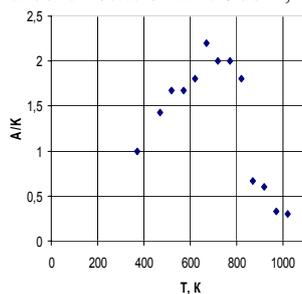


Рис.9. Зависимость содержания аморфной и метастабильной фазы А, нормированной на содержание кристаллической фазы К, от температуры отжига [4]

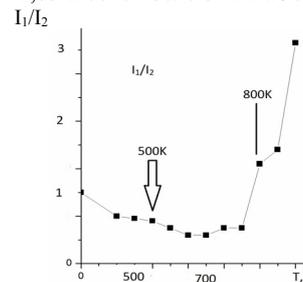


Рис. 10. Зависимость доли кристаллической фазы на облученной стороне фольги сплава Zr-Fe от температуры отжига [4]

Фаза  $Zr_3Fe$  однозначно идентифицирована с помощью мессбауэровской спектроскопии в геометрии обратного рассеяния. Термическая обработка позволяет достигать концентрации атомов-информаторов Fe от 2 до 6,5% в приповерхностном слое по сравнению с 0,3-0,6% в исходном состоянии.

Облучение ионами  $Fe^{4+}$  сплавов Zr-0,51%Fe, Zr-1,03%Fe при  $T=300$  К дозой  $2 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2}$  приводит к значительному изменению фазового состава интерметаллидов в приповерхностном слое сплавов. Ионное облучение сплава привело к аморфизации интерметаллической фазы  $Zr_3Fe$  и переходу атомов Fe в метастабильную фазу  $Zr_7Fe_{24}$ . Изохронный отжиг приводит к обратному превращению – распаду аморфной фазы через формирование на промежуточном этапе в диапазоне температур отжига 720-820 К метастабильной фазы  $m-Zr_3Fe$  и переходу атомов Fe в кристаллическую фазу  $Zr_3Fe$  со структурой типа  $Re_3B$  (рис. 3-8).

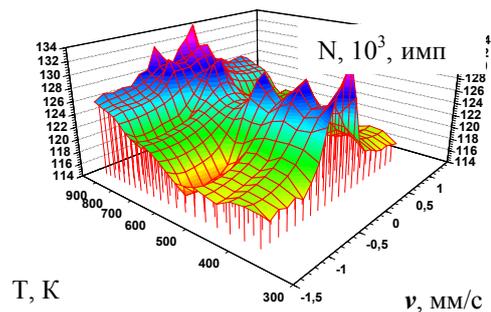
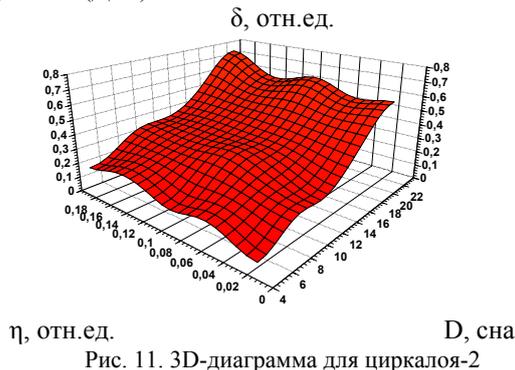
Зависимость суммарного относительного содержания аморфной фазы и метастабильной фазы  $m-Zr_3Fe$  от температуры отжига сплава Zr-0,63%Fe приведена на рис. 9. Наибольшая доля этих фаз наблюдается при температурах 650-700 К. Далее, при увеличении температуры отжига эта доля резко уменьшается, что связано с образованием и ростом кристаллической фазы. На рис. 10 представлена зависимость образующейся кристаллической фазы от температуры отжига.

При температуре 500 К, соответствующей началу перехода атомов железа из распадающейся аморфной фазы в метастабильную фазу  $m-Zr_3Fe$  и вертикальной линией – температура 800 К, соответствующая началу перехода атомов железа в формирующуюся кристаллическую фазу  $Zr_3Fe$ . Процесс кристаллизации характеризуется образованием зародышей, растущих до включений с размерами 10-120 нм.

Таким образом, становится возможным регулирование как относительного содержания интерметаллических нанокристаллических фаз в поверхностных слоях сплавов (толщиной до 3000 Å) за счет проведения предварительной термомеханической обработки, так и степени кристалличности этих фаз путем ионного облучения и последующего изохронного отжига.

При миграции и объединении вакансий в материалах появляются поры, стимулирующие диффузионные процессы и снижающие эксплуатационные характеристики сплавов. Одним из возможных путей снижения подвижности вакансий и уменьшения склонности к порообразованию является ослабление дальнего порядка, что становится возможным при аморфизации интерметаллических фаз, объемная доля которых в поверхностном слое может достигать 10-12 %.

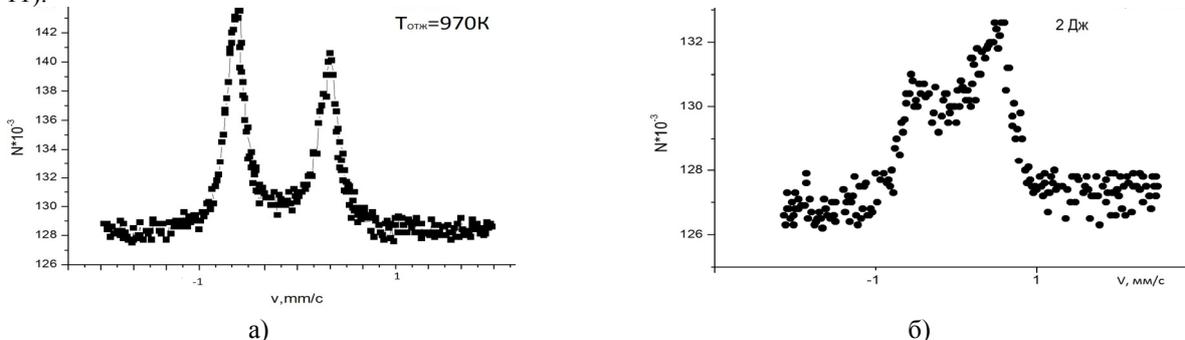
Другой важной проблемой является собственно аморфизация сплавов и интерметаллидов под влиянием облучения, особенно при облучении тяжелыми ионами тонкого (до 3000 Å) поверхностного слоя. В случае двойных сплавов Zr-Fe облучение приводит к аморфизации интерметаллических включений. Наименьшее воздействие ионное облучение оказывает на фазовый состав интерметаллидов в сплаве Zr-0,5%Fe-0,5%Sn-1%Nb. Полученные в [5,6] результаты в виде 2D-графиков для циркалоя-2 представлены нами в виде 3D-диаграмм (рис. 11), с помощью которых можно интерполировать экспериментальные результаты в 3-х координатном базисе: «степень холодной деформации образцов -  $\eta$ » - «смещения на атом - D» - «деформация при облучении (ДРП) -  $\delta$ ».



Эти результаты для трех степеней предварительной холодной деформации образцов 2% (0,02) ХД, 10% (0,1) ХД и 20% (0,2) ХД, соответствующих величин смещений (сна) и относительного удлинения образцов при облучении представлены на рис. 11. Видно, что в диапазоне до 23 сна, деформация под облучением ведет себя немонотонно, тогда как при анализе двухмерных графиков эта немонотонность не отмечается.

Полученные нами экспериментальные данные на модельных циркониевых сплавах по обогащению поверхности атомами железа в составе интерметаллических фаз типа  $Zr_3Fe$  коррелируют с данными по повышению концентрации железа вблизи поверхности сплава в условиях эксплуатации. Это можно проиллюстрировать 3D-диаграммой изменения спектров рассеяния облученной ионами поверхности сплавов циркония в зависимости от температуры изохронного отжига (рис. 12). 3D-спектральная диаграмма отражает в грубом приближении происходящие in-situ изменения фазового состава интерметаллических фаз в поверхностных слоях циркониевых сплавов.

В рассматриваемом случае процессы образования после облучения аморфных фаз и формирование в процессе отжига метастабильных фаз с переходом их в кристаллическую форму отражают существующие в динамическом режиме эксплуатации сплавов циркония (нейтронное облучение плюс постоянный отжиг при нижней границе температуры 350 °С) непрерывные превращения из кристаллической в аморфную фазу и наоборот. Возможно, что ход этих превращений зависит и одновременно влияет на зависимость ДРП от смещений на атом. Возможно, этими причинами обусловлено наличие широкого плато на 3D-диаграмме (рис. 11).

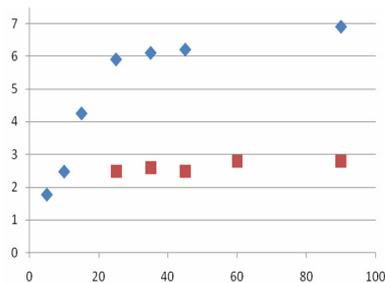


а) – спектр необлученной стороны после отжига при 970, б) - спектр облученной лазером стороны

На рис. 13 представлены результаты исследования поверхности отожженного образца сплава Zr-0,51at.%Fe с помощью мессбауэровской спектроскопии конверсионных электронов для обнаруженных на поверхности сплава интерметаллических включений до и после лазерного облучения одним импульсом. Фаза

$Zr_3Fe$  однозначно идентифицирована с помощью месбауэровской спектроскопии в геометрии обратного рассеяния (рис. 13а). Видно, что после облучения интенсивность спектра в максимуме почти в два раза ниже, чем в случае отожженного исходного сплава. Это свидетельствует о движении во время действия импульса включений интерметаллических фаз внутрь образца от поверхности в поверхностном слое 0,3 мкм и глубже. Это дает для оценки скорости движения включения во время действия импульса приблизительное значение 0,3-0,5 м/с, причем такие скорости характерны для отрыва металлических капель при эрозии поверхности в условиях импульсного воздействия мощных плазменных потоков [7]. Как показано на рис. 14 распределение интерметаллических фаз до и после облучения в поверхностном слое до 3000 Å ( $\theta=90^\circ$ ) значительно различается.

$\varepsilon$ , %



θ, град.

Рис. 14. Зависимость величины эффекта рассеяния необлученной (♦) и облученной поверхности сплава (■) от угла падения пучка гамма-квантов относительно плоскости образца

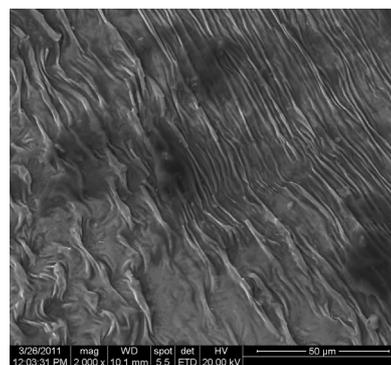


Рис. 15. Микроструктура поверхности центра облученного лазером участка

Отметим, что изменение формы спектра после облучения свидетельствует о формировании за время действия импульса аморфной фазы при аморфизации исходной кристаллической фазы  $Zr_3Fe$ . В нашем случае, как и ранее [8] отсутствует изменение веса облученных образцов, что свидетельствует о практически полном отсутствии распыления поверхности. Волновая структура на поверхности сплавов (рис. 15-16) после лазерного импульсного облучения с характерными значениями шага неровностей профиля поверхности свидетельствует о возбуждении капиллярных волн в результате тангенциальной неустойчивости Кельвина-Гельмгольца на границе расплавленный металл - лазерная плазма [9]. Над поверхностью распространяется сверхбыстрый поток пара и плазмы в приповерхностном слое вдоль расплавленной поверхности сплавов от центра к периферии. На рис. 17 представлены данные зависимости средних значений периода между гребнями соседних волновых образований от расстояния в направлении от центра к краю пятна для отожженного сплава. Простой расчет на основе этих данных дает следующие приблизительные значения скорости распространения волны вдоль поверхности образца  $V=(0,8-1,0) \cdot 10^3$  м/с.

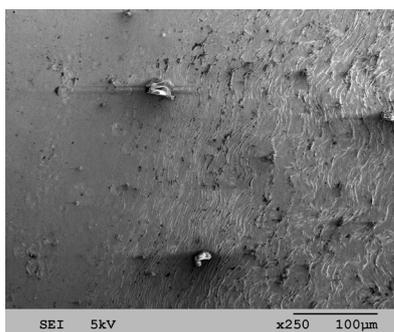


Рис. 16. Микроструктура поверхности облученного лазером участка на границе облученного пятна

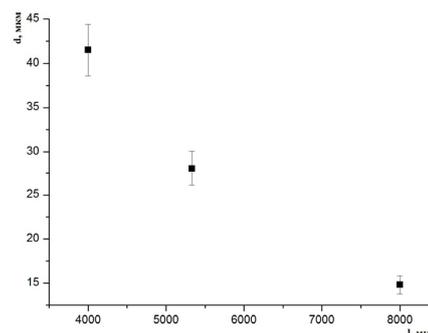


Рис. 17. Зависимости средних значений периода между гребнями соседних волновых образований от расстояния в направлении от центра к краю пятна для отожженного сплава [8]

Такие большие значения распространения фронта расплавленной жидкой фазы обусловлены в основном малой длительностью лазерного импульса (50 нс) и совместным действием разных механизмов.

С одной стороны, наблюдаемая после лазерного облучения волновая структура застывшей поверхности является результатом формирования неустойчивости Кельвина-Гельмгольца. Неустойчивость Кельвина-Гельмгольца КГ, проявляется находящаяся в квазижидком состоянии, характеризующихся вязкостью и поверхностным натяжением. Периоды волновых структур на охлажденной поверхности материалов хорошо согласуются с моделью капиллярных волн, возбуждаемых на расплавленной поверхности металлов потоком лазерной плазмы и движения приповерхностного слоя. Выполняется условие развития неустойчивости

$$W^2 + (\mu_2^*)^2 (\mu_1^*)^{-2} > 2, \quad (2)$$

где  $W$  – подъемная сила,  $\mu_1$  и  $\mu_2$  – соответствующие вязкости. Ввиду большого значения (рис. 18) вязкости циркония  $\mu_2$  возможно это условие выполняется в случае импульсного воздействия практически всегда. При известном значении  $W$  можно определить значение вязкости лазерно-эрозионной плазмы при заданной температуре. Источником энергии для формирования жидкой фазы является центральная часть лазерного пучка (рис. 19). Видно, что основная часть энергии лазерного пучка сосредоточена в луче диаметром около 4 мм.

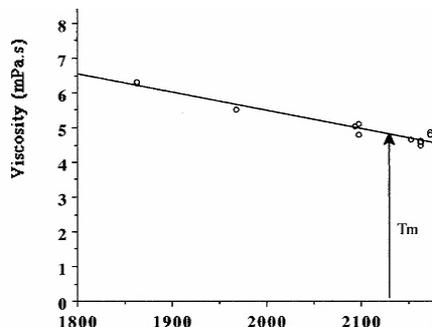


Рис. 18. Вязкость циркония как функция температуры [10, 11]

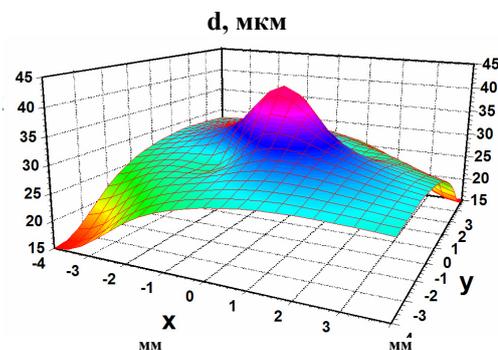


Рис. 19. 3D диаграмма зависимости периода волновой структуры от расстояния по облученному пятну в радиальном направлении [8]

С другой стороны, сплавы характеризуются атомно-шероховатыми поверхностями. С микроскопической точки зрения атомно-шероховатое состояние характеризуется высокой концентрацией разного рода поверхностных дефектов и осуществляется при достаточно высоких температурах. В случае отсутствия диссипативных процессов избыточная поверхностная энергия, например, при лазерном облучении, может перейти только в кинетическую энергию движения жидкости, кристаллизация и плавление сопровождаются движением жидкой фазы за счет разности плотностей двух фаз. Это значит, что при бездиссипативной кристаллизации любое отклонение формы кристалла от равновесной приводит к возникновению колебаний поверхности. Эти колебания распространяются вдоль поверхности в виде волн на поверхности жидкости. Это кристаллизационные волны, поскольку их существование целиком обусловлено периодической кристаллизацией после расплавления [12], и они могут осуществлять продвижение фронта расплава вдоль поверхности сплава.

## ВЫВОДЫ

В результате ионного облучения на поверхности циркониевых сплавов формируются аморфные и метастабильные фазы, которые при последующем изохронном отжиге кристаллизуются в исходную фазу  $Zr_3Fe$ . Процессы образования аморфных фаз и формирование при отжиге метастабильных и кристаллических фаз отражают существующие режимы эксплуатации сплавов циркония. В результате импульсного лазерного облучения на поверхности сплавов формируются волновые структуры за счет быстрого застывания жидкого расплава. Таким образом, становится возможным регулирование, как относительного содержания интерметаллических нанокристаллических фаз в поверхностных слоях сплавов, степени кристалличности этих фаз так и рельефа поверхности за счет проведения лазерного импульсного облучения в различных условиях охлаждения поверхности и объема образцов сплавов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Metally i splavy dlya atomnoi tekhniki: sb. nauchn. trudov / pod red. V.S. Emel'yanova. – М.: Energoatomizdat, 1985. – 92 с.
2. Strasser A. Mirovoi opyt ekspluatatsii tvelov legkovodnykh reaktorov // At. Tekhn.. za rubezhom. – №9. –1986. –S.28–33.
3. Shmelev V.D. i dr. Aktivnyye zony VVER dlya atomnykh elektrostantsii. - М.: Akademkniga, 2004. – 220 s.
4. Shikanova Yu.A., Filippov V.P., Petrov V.I., Novoselov A.E., Kobylanskii G.P. Vliyanie na sostoyanie atomov zheleza i olova, a takzhe na radiatsionnyi rost model'nykh obraztsov tsirkonievyykh splavov sostava i vida obrabotki / Tr. VI Mezhd. Ural'skogo Sem. «Radiatsionnaya fizika metallov i splavov», Snezhinsk. - 2007. - С.45.
5. Kirichenko V.G., Kovalenko O.V., Leonov V.N., Starostenko S.V. Vliyanie ionnogo oblucheniya na strukturu poverkhnosti splavov tsirkoniya // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2011. - № 955. - Iss. 2/50/. – S.77 – 83.
6. Kobylansky G., Novoselov A., Ostrovsky Z., Obukhov A., Shishin V., Shishov V., Nikulina A., Peregud M., Mahmood S.T., White D., Lin Y-P., Dubecky M. Irradiation-induced growth strain and microstructure of recrystallized, cold-worked and quenched alloys Zry-2, NSF and E635 / 15th International Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry, June 24–28, 2007, Sunriver Resort, Oregon, USA.
7. Bykovskii Yu.A., Nevolin V.N., Fominskii V.Yu. Ionnyaya i lazernaya implantatsiya metallicheskikh materialov. - М.: Energoatomizdat, 1991. - 238s.

8. Kirichenko V.G., Kovalenko O.V., Leonov V.N., Starostenko S.V., Kovalenko T.A., Kolesnikov D.A. Vliyanie lazernogo oblucheniya na mikrostrukturu poverkhnosti splavov tsirkoniya // The Journal of Kharkiv National University, physical series "Nuclei, Particles, Fields". – 2012. – №991. - Iss. 1/ 53/. – S.80–85.
9. Martynenko Yu.V., Moskovkin P.G. O kapel'noi erozii metallov pod deistviem sryvov plazmy v tokamakakh // VANT. Ser. Termoyadernyi sintez. - 2001. - Iss.1. - №2. - S.65-69.
10. Babichev A.P., Babushkina N.A., Bratkovskii A.M. i dr., Fizicheskie velichiny: Spravochnik. Pod. red. I.S. Grigor'eva, E.Z. Meilikhova. - M.: Energoatomizdat, 1991. – 1232 s.
11. Hildebrand J.H., Lamoreaux R.H. Viscosity of liquid metals: An interpretation (fluidity of liquid metals/solubility parameters) // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. – 1976. - Vol. 73, №4. - R. 988–989.
12. Keshishev K.O., Parshin A.Ya., Babkin A.V. Eksperimental'noe obnaruzhenie kristallizatsionnykh voln // Pis'ma v ZhETF. – 1979. - T.30. - Iss.1. - S.63-67.

УДК 620.111: 620.172: 620.179.14

## АКУСТО–ЭМИССИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ СТАЛЕЙ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

**И.И. Папиров, П.И. Стоев**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»*

*Украина, 61108, г. Харьков, ул. Академическая, 1*

*e-mail: [papirov@kipt.kharkov.ua](mailto:papirov@kipt.kharkov.ua)*

Received September 23, 2013

Исследованы особенности акустической эмиссии (АЭ) при пластической деформации сталей Ст3 и 1Х18Н9Т в магнитном поле. Впервые обнаружены новые акусто-эмиссионные эффекты, вызванные воздействием магнитного поля. В случае стали Ст3 наложение магнитного поля в процессе растяжения образцов приводит к существенному изменению спектра АЭ по амплитудам и устранению зуба текучести. На максимуме АЭ в области начала течения магнитное поле приводит к активации более мелких дислокационных ансамблей с низкой амплитудой и существенному снижению роли крупных дислокационных ансамблей с высокой амплитудой в деформацию материала. Деформация в магнитном поле аустенитной стали 1Х18Н9Т приводит к дополнительной генерации сигналов АЭ, образованию перегиба на кривой общей суммы импульсов, связанного с  $\alpha$ -мартенситным переходом, и существенному изменению характера самого спектра АЭ при испытании образцов в поле и без магнитного поля. Полученные результаты указывают на то, что главной причиной влияния магнитного поля на пластическую деформацию испытанных сталей является не изменение термоактивационных параметров пластического течения, а существенная перестройка дислокационных ансамблей, участвующих в этом процессе.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** акустическая эмиссия, пластическая деформация, магнитное поле, акусто-эмиссионные эффекты

## ACOUSTIC EMISSION EFFECTS AT A PLASTIC STRAIN OF STEELS IN A MAGNETIC FIELD

**I.I. Papirov, P.I. Stoev**

*National Science Centre Kharkov Institute of Physics and Technology*

*Ukraine, 61108, Kharkov, Academicheskaya st., 1*

The features of the behavior of the parameters of acoustic emission during plastic deformation of steel 3 and 1X18H9T in a magnetic field was studied. For the first time new effects of acoustic emission which are provoked by magnetic field influence are found. In the case of steel Ст3 application of a magnetic field in the process of deformation of the samples results in significant changes in the spectrum of the amplitudes of signals acoustic emission and the elimination of tooth strength. On a maximum the curve of activity of acoustic emission in the field of strains corresponding to the beginning of flow of a metal, the magnetic field leads to activation of smaller dislocation ensembles with low amplitudes and a substantial reduction of role of large-size dislocation ensembles with high amplitude. The deformation in the magnetic field of austenitic steel 1X18H9T leads to additional generation of acoustic signals, the formation of inflection on the curve of common sum of pulses associated with the  $\alpha$ -martensitic transformation, and a significant change of spectrum of signals acoustic emission at test in magnetic field and when the field is absent. The results indicate that the main cause of the influence of magnetic field on the plastic deformation of the tested steels is not to change the parameters of thermal activation of plastic flow, and a significant restructuring of dislocation ensembles participating in the process.

**KEY WORDS:** acoustic emission, plastic deformation, magnetic field, acoustic emission effects

## АКУСТИЧНО-ЕМИСІЙНІ ЕФЕКТИ ПРИ ПЛАСТИЧНІЙ ДЕФОРМАЦІЇ СТАЛЕЙ У МАГНІТНОМУ ПОЛІ

**І.І. Папіров, П.І. Стоєв**

*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»*

*Україна, 61108, м. Харків, вул. Академічна, 1*

Досліджені особливості поведінки параметрів акустичної емісії при пластичній деформації сталей Ст3 і 1Х18Н9Т в магнітному полі. Вперше виявлені нові акустично-емісійні ефекти, що викликані дією магнітного поля. В разі сталі Ст3 накладення магнітного поля в процесі розтягування зразків приводить до істотної зміни спектру акустичної емісії по амплітудах та до усунення зуба текучості. На максимумі кривих залежності акустичної в області початку течії магнітне поле приводить до активації дрібніших дислокаційних ансамблів з низькою амплітудою та істотного зниження ролі крупних дислокаційних ансамблів з високою амплітудою у деформацію матеріалу. Деформація в магнітному полі аустенітної сталі 1Х18Н9Т приводить до додаткової генерації сигналів акустичної емісії, утворення перегину на кривій загальної суми імпульсів, пов'язаного з  $\alpha$ -мартенситним переходом, та суттєвої зміни характеру самого спектру акустичної емісії при випробуванні зразків в полі і без поля. Отримані результати вказують на те, що головною причиною впливу магнітного поля на пластичну деформацію випробуваних сталей є не зміна термоактиваційних параметрів пластичної течії, а суттєва перебудова дислокаційних ансамблів, що беруть участь в цьому процесі.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** акустична емісія, пластична деформація, магнітне поле, акусто-емісійні ефекти

Изучение процессов взаимодействия поля с веществом является одной из фундаментальных задач физики твердого тела. На протяжении последних 30 лет проводятся интенсивные исследования влияния электрических и магнитных полей на различные физико-механические характеристики материалов и особенно на характер их пластического течения и разрушения.

Показано, что при испытаниях в магнитном поле изменяются предел текучести, предел прочности,

максимальное удлинение и ползучесть материалов, износостойкость и долговечность деталей конструкций и инструмента. В работах многих авторов детально изучен и описан магнитоэластический эффект различных материалов [1-6].

Магнитоэластический эффект, или влияние магнитного поля на характеристики пластичности обычно связывают со многими факторами – изменением подвижности индивидуальных дислокаций, кинетическими (скоростными) особенностями движения дислокаций в магнитном поле, влиянием магнитного поля на некоторые структурные дефекты, чувствительностью самого эффекта к типу и концентрации закрепляющих примесей в испытуемых образцах. Даже в кристаллах германия и кремния обнаружено изменение скорости дислокаций после их магнитной обработки за счет высокоэнергетических процессов локальной перестройки структуры и силовых полей в области закрепления дислокаций [7]. Обнаружено также заметное сглаживание эффекта Портевена ле Шателле при включении магнитного поля [8].

Влияние электромагнитного поля на характер пластического течения в кристаллических телах обычно связывают с облегчением движения дислокаций и с влиянием дрейфующих в решетке электронов на процессы размножения, движения и взаимодействия дислокаций [2]. В.Я. Кравченко [9] показал, что сила электронного торможения движущихся дислокаций в магнитном поле и при низких температурах, наоборот, возрастает за счет влияния поля на движение электронов проводимости, причем сама эта сила может меняться в процессе деформации.

В работах [2,3,9] показано, что электроэластический и магнитоэластический эффекты фактически снижают сопротивление материала деформированию. Но, несмотря на обширные исследования и начавшееся практическое применение этих явлений, их механизмы оказываются проблематичными, и многие авторы объясняют трудности интерпретации результатов параллельным развитием нескольких физических эффектов, вносящих разные вклады в результирующее воздействие электрического и магнитного полей на процесс пластического течения твердых тел. Очевидно, что внешние поля могут оказывать воздействие на процессы генерирования и движения линейных дефектов кристаллического строения (дислокаций и вакансий), или, иными словами, на кинетику пластической деформации. На микроуровне можно говорить о влиянии внешних полей на процессы генерации дислокаций, а также на энергию активации и активационный объем движения и взаимодействия дислокаций с препятствиями в кристаллах. К сожалению, большинство этих выводов относительно влияния полей на механизмы деформации являются скорее умозрительными, нежели экспериментально доказанными.

При низких температурах деформации возникает еще один эффект, связанный с влиянием на движение дислокаций электронного ветра (силы электронного увлечения). Дефекты кристаллического строения, в том числе дислокации, тормозят движение электронного ветра, а магнитное поле дополнительно вызывает его отклонение. В результате влияния электронного ветра на единицу длины дислокации действует дополнительная сила  $F_j$ , пропорциональная скорости дислокаций  $V$ :

$$F_j = BV,$$

здесь  $B$  коэффициент электронного торможения дислокаций [9,10], величина  $B \sim 10^{-4}$  г/см.с.

В зависимости от знака дислокаций, эта сила может способствовать движению дислокаций или тормозить его в поле.

Еще одна сила, влияющая на движение дислокаций при низких температурах, связана с рассеянием электронов на границах раздела и передаваемым им импульсом [9]. Показано, что эта сила действует в направлении растяжения и приблизительно равна  $100$  дин/см<sup>2</sup>.

Определенное влияние на пластическую деформацию металлов может оказывать также пинч-эффект – влияние магнитного поля на свободные электроны в металлах вне связи с их магнитными свойствами. Известно, что магнитное поле действует на электронный газ с силой Лоренца, причем эта сила всегда направлена к центру проводника. В результате электронный газ сжимается к центру проводника, образуя отрицательный объемный электрический заряд, а у поверхности проводника, где концентрация электронов понижается, формируется положительный заряд (при этом, естественно, полный заряд проводника остается равным нулю). Вследствие такой поляризации в проводнике образуется электрическое поле (поле Холла), которое, действуя с силой Кулона на ионную решетку, приводит к ее упругому сжатию с образованием механических напряжений.

Целью данной работы является исследование особенностей поведения параметров акустической эмиссии при пластической деформации сталей в магнитном поле (МП).

В данной работе для изучения влияния магнитного поля на пластическую деформацию сталей мы впервые применили метод акустической эмиссии. Этот метод позволяет получать важную информацию о движении дислокационных ансамблей и поэтому способен дать дополнительную информацию о механизмах процессов, протекающих при пластической деформации и сравнить их со сложившимися теоретическими представлениями.

#### МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА

Материалом для образцов служили две марки стали: сталь Ст3 в виде листа толщиной 2,0 мм и листовая нержавеющая сталь 1X18Н9Т толщиной 1,0мм.

Из стальных листов вырезали заготовки для образцов, которые имели размер 260×12 мм. Затем механическим способом в средней части заготовки изготавливали рабочую часть размером 30×6 мм. Для снятия напряжений, вызванных механической обработкой, образцы отжигали при температуре 500°C в течение 1 часа.

Испытания на растяжение образцов проводили на универсальной испытательной машине 1958 У10-1 со скоростью деформации  $1 \times 10^{-4} \text{сек}^{-1}$  при комнатной температуре.

На испытательную машину монтировали два постоянных магнита цилиндрической формы ( $\varnothing$  60мм) из сплава Nd-Fe-B, которые создавали в области деформации образца поперечное магнитное поле напряженностью 5500 Э. Нерабочая часть образца находилась вне магнитного поля.

При растяжении образцов синхронно регистрировали параметры деформирования и акустической эмиссии.

Для регистрации акустической эмиссии использовали многоканальный акустический комплекс М400, позволяющий регистрировать и разделять сигналы АЭ в зависимости от их амплитуды. Амплитудное значение шумов, приведенное к входу предварительного усилителя, составляло 5мкВ. Уровни амплитудной дискриминации каналов составляли 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 100 мкВ относительно этого значения.

В качестве датчика-регистратора АЭ использовали пьезокерамический преобразователь из керамики ЦТС-19 с резонансной частотой 180 кГц. Датчик крепили к исследуемому образцу через слой акустической смазки специальным держателем, который обеспечивал одинаковое усилие прижатия.

Сбор, обработка, анализ результатов, включающих информацию об акустической эмиссии и информацию о параметрах деформирования, проводили с помощью ЭВМ и специально разработанных программ обработки данных [11].

## РЕЗУЛЬТАТЫ

### Ферритная сталь Ст3

При деформации ферритной низкоуглеродистой стали Ст3 мы обнаружили несколько эффектов, связанных, во-первых, с существенным влиянием магнитного поля на кривые деформации исследуемого материала, и, во-вторых, с сопровождающими их акусто-эмиссионными эффектами. На рис. 1а показаны кривые деформации стали Ст3 при деформации без поля (кривая 1) и в магнитном поле (кривая 2). Главное отличие двух кривых наблюдается на пределе текучести и состоит в наличии зуба текучести при деформации образцов стали без приложения магнитного поля (кривая 1) и его исчезновении при деформации в магнитном поле (кривая 2). Известно, что появление «зуба» текучести связано с дислокационным механизмом деформации: в начале пластического течения плотность дислокаций является недостаточной для обеспечения более высокой степени деформации; поэтому после достижения точки верхнего предела текучести начинается интенсивное образование новых ансамблей дислокаций за счет их отрыва от облаков примесей, что и приводит к падению напряжения после прохождения зуба текучести.

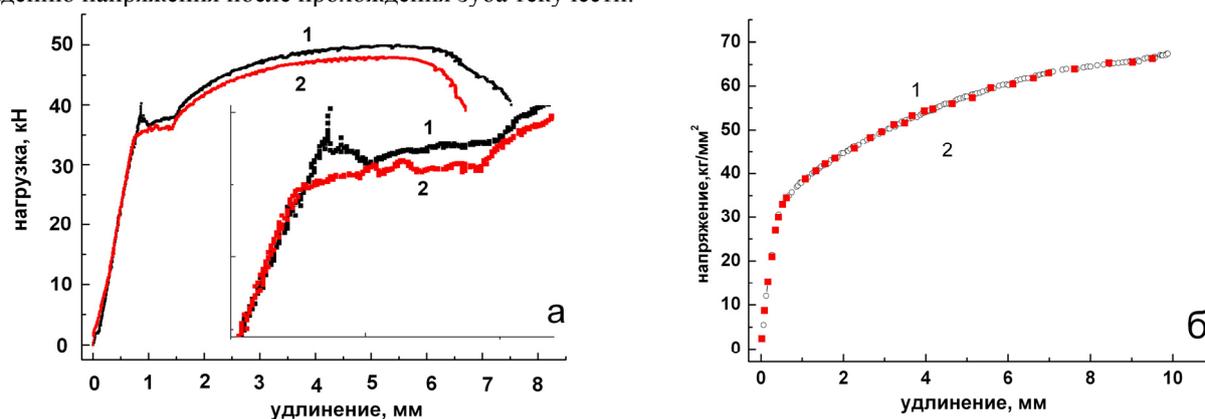


Рис. 1. Кривые деформации при растяжении образцов стали без магнитного поля (○ (кривая 1)), в магнитном поле (■ (кривая 2)) а - сталь Ст3, б - 1X18N9T

Мы видим, что магнитное поле радикальным образом влияет на этот процесс, устраняя характерную особенность деформации малоуглеродистых сталей в виде зуба текучести. Влияние магнитного поля на характер изменения кривых деформации немагнитной аустенитной стали 1X18N9T отличается от воздействия на образцы из ферромагнитной стали Ст3. Из рис. 1б видно, что диаграммы деформации образцов стали 1X18N9T без поля (рис. 1б кривая 1) и в магнитном поле (рис. 1б, кривая 2) подобны друг другу и кривые на графике совмещаются.

Зависимости активности АЭ образцов Ст3 в МП и его отсутствии приведены на рис. 2а,б. Видно, что в процессе растяжения образцов Ст3 в МП заметно снижается активность АЭ. Влияние МП на кривую

деформации стали Ст3 и на регистрируемую АЭ наиболее сильно проявляется именно в районе зуба и площадки текучести. На стационарной стадии течения после окончания площадки текучести МП практически не влияет: кривые деформации и спектры АЭ здесь практически идентичны у образцов, растягиваемых без поля и в МП.

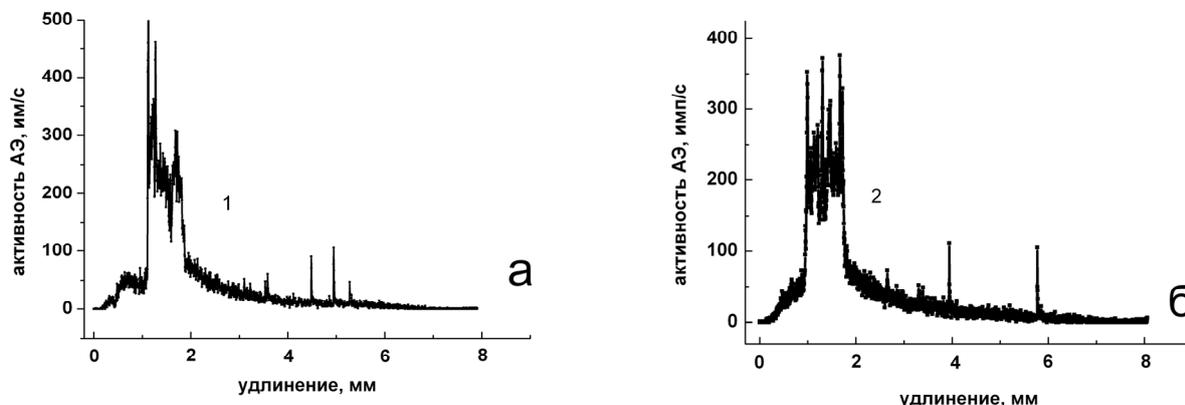


Рис. 2. Зависимость активности АЭ при растяжении образцов стали Ст3  
а - без магнитного поля, б - в магнитном поле

Для понимания радикального влияния МП на процесс деформации был проведен анализ распределения амплитуд сигналов АЭ в области пластического течения. Установлено, что при растяжении без поля на максимуме активности АЭ соотношение низкоамплитудных ( $N_{\min}$ ) и высокоамплитудных импульсов ( $N_{\max}$ ) сравнимо между собой  $N_{\min}/N_{\max}=1,17$ , тогда как при растяжении в МП  $N_{\min}/N_{\max}\sim 2$ .

Одним из основных механизмов пластической деформации является дислокационный механизм. Образование и движение дислокаций сопровождаются излучением упругих колебаний. Эти колебания (упругие волны) регистрируются в виде импульсов АЭ [12]. Иными словами процессы деформации в материале служат источником АЭ, сигналы которой регистрируют с помощью высокочувствительных датчиков.

Принято считать, что амплитуда сигнала АЭ дает информацию об энергии источника излучения [12,13]. В работе [13] сделана оценка энергетических параметров дислокационных источников излучения. Эта оценка позволила сделать вывод о том, что для регистрации акустического излучения необходимо, чтобы энергия источника превышала порог чувствительности акусто-эмиссионной аппаратуры ( $10^{-16}$  Дж). Поэтому аппаратно невозможно зарегистрировать АЭ при движении единичной дислокации (ее энергия  $10^{-23}$  Дж) или небольшого количества движущихся дислокаций, а экспериментально регистрируемое акустическое излучение может быть вызвано только совместным движением достаточно большого количества дислокаций – дислокационным скоплением (дислокационным ансамблем). Поэтому по амплитуде регистрируемых сигналов АЭ мы можем оценить энергию дислокационного ансамбля.

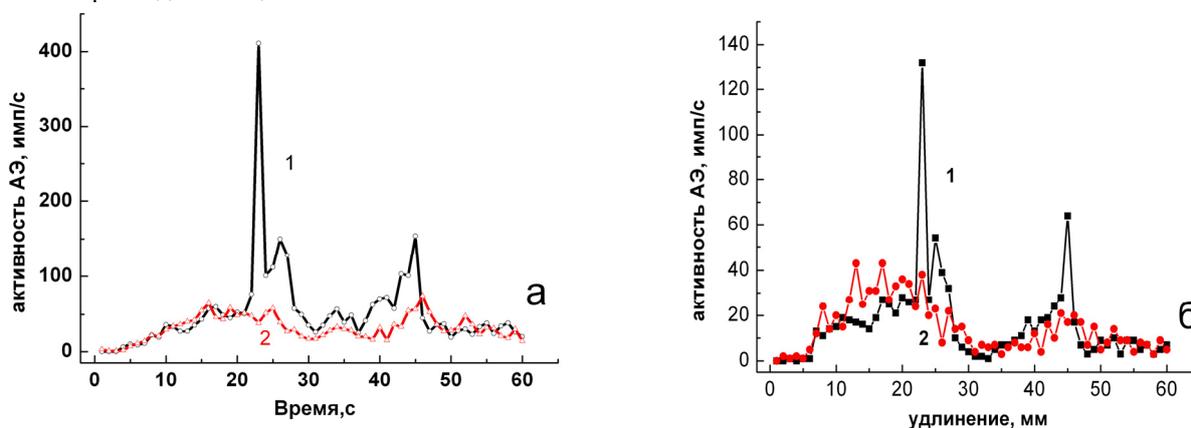


Рис. 3. Кривые активности сигналов АЭ различной амплитуды при растяжении образцов стали Ст 3  
без магнитного поля (кривая 1) и в магнитном поле ( кривая 2)  
а – сигналы АЭ низкой амплитуды, б – высокой амплитуды

На рис. 3 приведена зависимость активности АЭ в области напряжений, соответствующих пределу текучести для низкоамплитудных импульсов (а) и эта же зависимость для высокоамплитудных сигналов АЭ (б) при испытаниях образцов в МП и в его отсутствии. Из рис. 3 видно, что деформация в МП приводит к снижению активности импульсов АЭ. Это снижение наблюдается для сигналов АЭ всех амплитуд, но особенно

заметно для сигналов низкой и высокой амплитуды.

Таким образом, при деформировании стали Ст3 в МП:

- снижается количество импульсов АЭ по всем энергетическим уровням;
- отношение числа импульсов с низкой амплитудой к числу импульсов с высокой существенно растет.

Это позволяет сделать вывод о том, что при деформировании МП приводит к активации более мелких дислокационных ансамблей и к существенному снижению роли крупных дислокационных ансамблей. Кроме того, необходимо учитывать, что работа деформации при растяжении образцов с полем и без него приблизительно одинаковая. Обеспечить равное значение величины работы деформации в МП, которая выполняется менее энергетичными ансамблями дислокаций (меньше дислокаций в скоплении) можно только за счет действия большего числа ансамблей. Фактически мы должны были наблюдать не только рост низкоамплитудных сигналов по отношению к высокоамплитудным, но и абсолютный рост низкоамплитудных сигналов АЭ.

Следует отметить, что аппаратно нерегистрируемая часть низкоамплитудных импульсов АЭ наблюдается визуально: в процессе деформирования материала в МП полоса шумов на осциллографе становится более широкой.

Исчезновение АЭ авторы наблюдали ранее при изучении деформации сверхпластичных сплавов на основе цинка и олова [14].

Таким образом, при деформировании образцов стали Ст3 получены следующие экспериментальные результаты:

- влияние магнитного поля на кривую деформации стали Ст3 и на регистрируемую АЭ наиболее сильно проявляется в районе зуба и площадки текучести. На стационарной стадии течения после окончания площадки текучести магнитное поле практически не влияет: кривые деформации и спектры АЭ здесь практически идентичны у образцов, растягиваемых без поля и в магнитном поле;

- наложение магнитного поля в процессе растяжения образцов существенно (в 1,5 раза) снижает регистрируемую активность АЭ в начале пластического течения (количество импульсов на пределе текучести  $N=350$  против  $>500$ );

- существенно изменяется амплитудное распределение импульсов при растяжении образцов с полем и без поля: при растяжении без поля на максимуме АЭ соотношение низкоамплитудных  $N_{\min}$  и высокоамплитудных импульсов  $N_{\max}$  сравнимо между собой  $N_{\min}/N_{\max}=1,17$ , тогда как при растяжении в магнитном поле  $N_{\min}/N_{\max}\sim 2$ . Иными словами, магнитное поле приводит к активации более мелких дислокационных ансамблей и к существенному снижению роли крупных дислокационных ансамблей;

- при деформировании образцов в МП на экране осциллографа наблюдается расширение полосы шумов, что свидетельствует об увеличении числа низкоамплитудных импульсов. Счетчики акустического комплекса не регистрируют эти импульсы из-за того, что их амплитуда ниже порога срабатывания аппаратуры. Поэтому реальная картина перераспределения дислокационных ансамблей по размерам в магнитном поле может оказаться еще более существенной: скорее всего малоамплитудные импульсы играют доминирующую роль в спектрах АЭ при наложении магнитного поля.

### Нержавеющая сталь 1X18H9T

При деформации немагнитной аустенитной стали 1X18H9T мы обнаружили несколько акусто-эмиссионных эффектов, существенно отличающихся от описанных выше для ферромагнитной стали Ст3. Прежде всего, оказалось, что диаграммы деформации образцов этой стали без поля (рис. 1б кривая 1) и в магнитном поле (рис. 1б, кривая 2) подобны друг другу. Однако, при почти полном подобии деформационных кривых, зависимости параметров АЭ (рис. 4,5) и свойства образцов после деформации без поля и в магнитном поле существенно отличаются. На рис.4а,б и рис. 5 приведены зависимости активности и общей суммы импульсов АЭ при деформировании образцов нержавеющей стали в магнитном поле и при его отсутствии. Как и в случае стали Ст3, для немагнитной стали 1X18H9T был проведен анализ распределения амплитуд сигналов АЭ в области пластического течения. Влияние магнитного поля на изменение соотношения импульсов низкой и высокой амплитуды в интегральной величине суммы регистрируемых сигналов приведен на рис. 6а,б. Характерный вид амплитудного распределения сигналов АЭ при деформировании нержавеющей стали в МП и без МП приведен на рис. 7.

Впервые наблюдаемые акусто-эмиссионные эффекты в нержавеющей стали 1X18H9T состоят в следующем:

- суммарное количество регистрируемых акустическим спектрометром импульсов АЭ при деформации без поля приблизительно в 3 раза ниже, чем при деформации в магнитном поле (рис. 5);

- зависимость суммарного количества импульсов АЭ от деформации без МП (кривая 1 на рис. 5) и в МП (кривая 2 на рис. 5) радикально отличается – в первом случае она плавная и не имеет особенностей, во втором испытывает перегиб в области деформаций  $\epsilon > 10\%$ ;

- на кривой активности АЭ (рис. 4б) наблюдается явно различимый максимум, соответствующий аномалии на рис. 5 и отвечающий области перегиба на кривых суммарного количества импульсов АЭ;

- как и в случае ферритной стали Ст3, существенно меняется характер амплитудного распределения АЭ

при испытании образцов в поле и без поля : при испытании без МП количество низкоамплитудных  $N_{\min}$  и высокоамплитудных импульсов  $N_{\max}$  сравнимо между собой  $N_{\min}/N_{\max}=1,18$ , тогда как при испытании в МП  $N_{\min}/N_{\max}\sim 3$ , то есть низкоамплитудные импульсы доминируют.

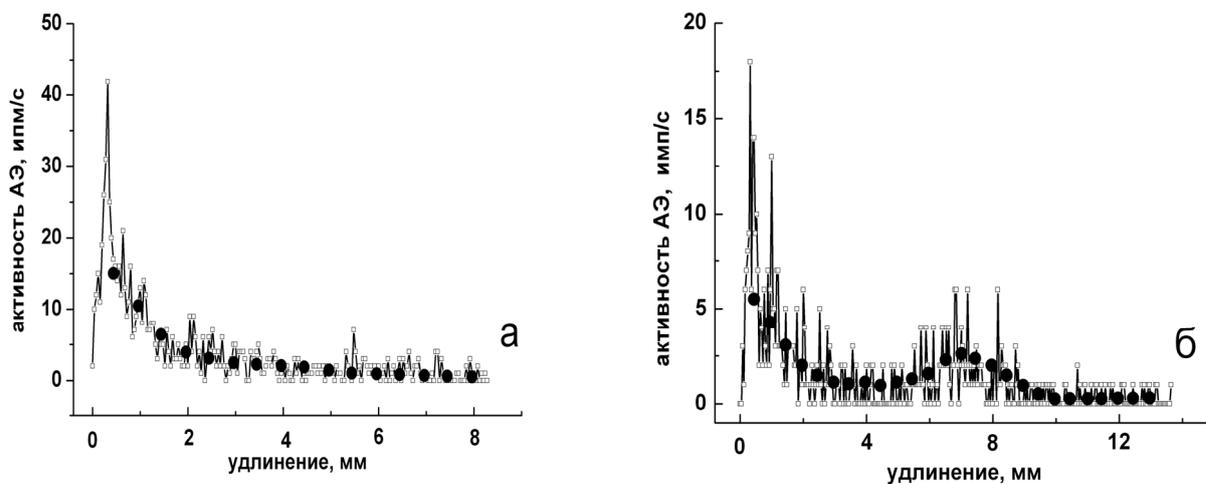


Рис. 4. Зависимость активности АЭ при деформировании образцов нержавеющей стали 1X18H9Т  
а – без МП, б – в МП

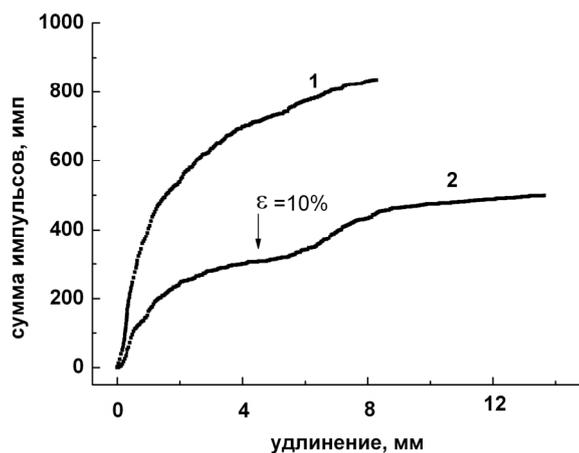


Рис. 5. Кривые зависимости зарегистрированной суммы импульсов АЭ при растяжении образцов нержавеющей стали без МП (кривая 1) и в МП (кривая 2)

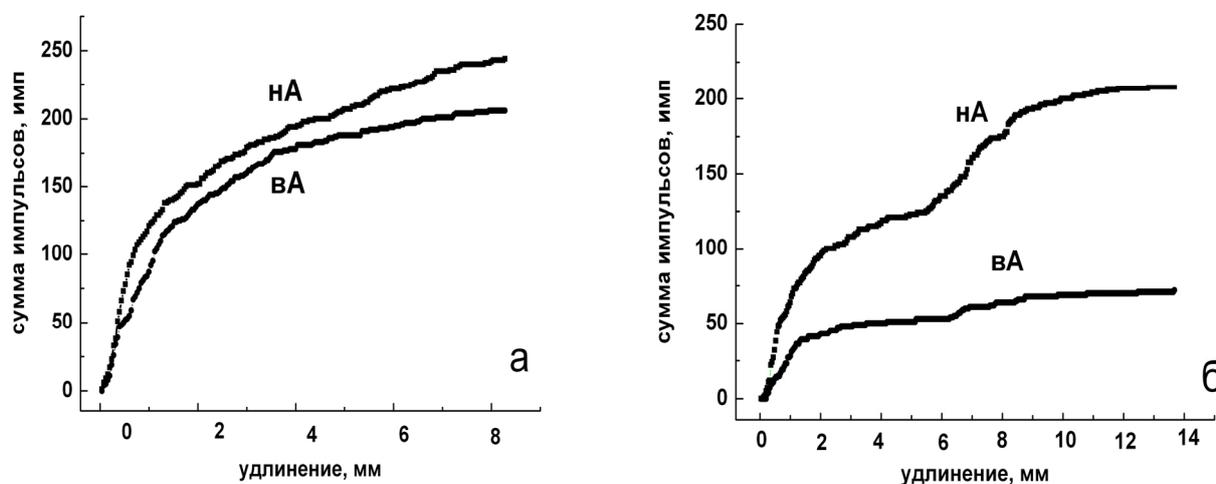


Рис. 6. Кривые суммы импульсов АЭ различной амплитуды (НА–импульсы низкой, ВА–высокой амплитуды) у образцов нержавеющей стали 1X18H9Т при растяжении  
а - без МП, б - в МП

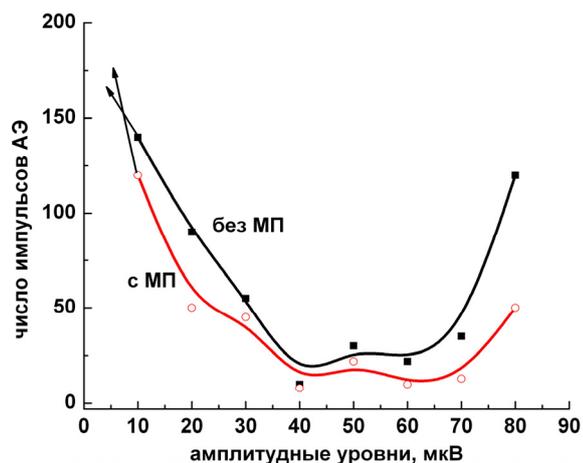


Рис. 7. Амплитудное распределение сигналов АЭ при деформировании в образцов из нержавеющей стали без МП и в МП

процессе деформации аустенита ферромагнитных  $\alpha$ -мартенситных выделений. Это подтверждается прямыми измерениями намагниченности испытанных образцов. При испытании аустенитной стали без магнитного поля измеренная намагниченность образцов после деформации очень слабая (2-3 Э) и практически заметно не влияет на зависимость  $N(\epsilon)$ , тогда как при деформации в магнитном поле она возрастает до 9 Э и увеличивается до 17 Э при дальнейшем увеличении скорости деформации. При этом образование в магнитном поле выделений ферромагнитного  $\alpha$ -мартенсита вызывает повышение числа импульсов АЭ на всех каналах амплитуд регистрируемых сигналов, но особенно — низкоамплитудных ( $N_{\min}$ ) импульсов (рис. 6б).

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Принято считать, что внешние поля влияют на изменение уровня механических напряжений, необходимых для движения дислокаций и способны уменьшать энергию активации их термоактивированного движения, то есть высоту барьеров при взаимодействии дислокаций со стопорами [4,5]. Это связано с тем, что под влиянием внешних полей может измениться величина барьеров, преодолеваемых дислокациями при их движении. Скажем, вокруг точечных дефектов (вакансий или растворенных атомов) кристаллическая решетка деформируется и образуется локальное поле упругих напряжений, способное изменить здесь электрическое поле. Электроны проводимости в металле частично экранируют это поле, образуя электронное облако вокруг дефекта кристаллической решетки. Можно говорить об изменении «упругой» и «электростатической» составляющих энергии преодолеваемого барьера. Оценка влияния электрического и магнитного полей на высоту таких барьеров выполнена в работах [4,5]. В частности, выяснено, что магнитное поле может влиять на константу экранирования, причем результирующая сила зависит от величины поля и того, какой из вкладов, диамагнитный или парамагнитный, преобладает в магнитной восприимчивости электронной подсистемы. Показано также, что для вакансий действие магнитного поля на высоту барьеров является квадратичным по напряженности поля и не зависит от природы стопора дислокации. Для закреплений в виде примесей барьеры линейно зависят от величины магнитного поля и могут достигать заметных величин уже при полях более 100 Э.

Помимо рассмотренного изменения константы экранирования в магнитном поле необходимо отдельно учитывать изменение вклада в энергию взаимодействия дефектов, обусловленных квантовой интерференцией электронных волн. Относительная роль этого эффекта будет увеличиваться с понижением температуры.

Полученные в настоящей работе наблюдения ставят под сомнение получившее широкое распространение представления о влиянии поля на характер термоактивационного движения дислокаций, то есть о влиянии поля на величину активационного объема (понижения уровня барьеров для движения дислокаций). Полученные результаты указывают на то, что главной причиной влияния поля на пластическую деформацию является не изменение термоактивационных параметров пластического течения, а существенная перестройка дислокационных ансамблей, участвующих в этом процессе.

Намагничивание некоторых аустенитных сталей в процессе обработки магнитным полем известно и подробно изучено школой В.Д.Садовского (см. [15]). Известно также, что образованию ферромагнитных  $\alpha$ -мартенситных выделений в парамагнитном аустените способствует деформация материала [15]. Из полученных в данной работе результатов следует, что совместное влияние МП и деформации интенсифицирует процесс образования  $\alpha$ -мартенситных выделений, причем этот эффект растет с деформацией и дополнительно увеличивается с ростом скорости деформации. Можно утверждать, что образующиеся в процессе деформации дислокационные ансамбли способствуют интенсификации образования  $\alpha$ -мартенситных выделений.

Принципиально новыми акусто-эмиссионными эффектами, обнаруженными в настоящей работе,

являются: обнаружение дополнительной АЭ, возникающей при деформации стали в магнитном поле, образование перегиба на кривой  $N(\epsilon)$  (рис. 4,5), связанного с  $\alpha$ -мартенситным переходом, и существенное изменение характера самого спектра АЭ при испытании образцов в МП и без МП. Мы видим, что, как и в случае ферритной стали Ст3, магнитное поле существенно влияет на характер и структуру дислокационных ансамблей, облегчая организацию более подвижных малых скоплений и в несколько раз ограничивая роль крупных скоплений, дающих высокоамплитудные импульсы АЭ.

Физическая природа влияния магнитного поля связана не столько с термоактивируемым движением дислокаций, сколько с безактивационными процессами движения дислокационных ансамблей и с их влиянием на образование  $\alpha$ -мартенситных выделений в аустенитной стали при деформации. Согласно этой концепции, под влиянием внешнего магнитного поля скопления дислокаций открепляются от препятствий безактивационным путем за счет увеличения атермических сил, действующих на скопление дислокаций за счет магнитного поля. Иными словами, внешнее поле благоприятствует механическим напряжениям в движении неравновесных ансамблей дислокаций за счет безактивационного отрыва дислокационных скоплений от стопоров. Полученные данные показывают, что при этом резко меняются сами дислокационные ансамбли: при деформации без поля крупные и малые ансамбли сравнимы по количеству, при деформации в поле доминируют малоамплитудные ансамбли. В свою очередь образующиеся дислокационные ансамбли оказывают влияние на образование  $\alpha$ -мартенситных выделений. Количество таких выделений оказывается не очень большим и не влияет на упрочнение нержавеющей стали (рис. 16).

Еще один эффект, способный повлиять на акустическую эмиссию при деформации образцов в магнитном поле связан с так называемыми баркгаузенским шумом [16,17].

При намагничивании ферромагнетика за счет переворота намагниченности в отдельных доменах процесс сопровождается дискретными шумами, способными дополнительно увеличивать акустическую эмиссию. Это связано с тем, что процесс происходит не плавно, а скачками в отдельных магнитных доменах. Поскольку в данной работе мы не наблюдали дополнительного систематического роста уровня АЭ при деформации ферромагнитного материала в магнитном поле, то, по всей видимости, в данном случае баркгаузенский эффект не превышает уровень шума, образующегося при измерении АЭ. Действительно, объем материала, в котором происходит изменение намагниченности при единичном скачке стенки домена, вычисленный при изучении баркгаузенского шума, составляет  $10^{-8}$ - $10^{-9}$  см<sup>3</sup>. Это означает, что линейный размер скачка доменной стенки имеет величину  $\sim 10$  мкм.

Как мы выяснили ранее, при изучении пластической деформации мелкозернистых материалов [14], амплитуды сигналов АЭ, возникающих в мелкозернистых материалах при сверхпластическом течении, резко уменьшаются и образующиеся при этом сигналы по амплитуде не превышают уровня шума. Таким образом, можно предполагать, что и в данной работе эффект Баркгаузена не превышал приборного порога регистрации малоамплитудных импульсов АЭ, то есть не выходил за пределы регистрируемых шумов. Вместе с тем, в дальнейшем представляет интерес возможность изучения баркгаузенского шума, образующегося за счет смещения доменных стенок, при деформации монокристаллов или крупнозернистых ферромагнетиков без поля и с полем не методами электроники, а с помощью АЭ. Возможно, смещение доменных стенок в крупных доменах в этом случае может быть зарегистрировано с помощью АЭ.

## ВЫВОДЫ

1. Пластическая деформация образцов ферритных и аустенитных сталей в магнитном поле существенно влияет на спектры АЭ, особенно в области предела текучести.
2. В случае стали Ст3 наложение магнитного поля в процессе растяжения образцов приводит к устранению зуба текучести и существенному изменению спектра АЭ по амплитудам.
3. На максимуме АЭ в области начала течения магнитное поле приводит к активации более мелких дислокационных ансамблей с низкой амплитудой и к существенному снижению роли крупных дислокационных ансамблей с высокой амплитудой.
4. На стационарной стадии течения после окончания площадки текучести магнитное поле практически не влияет: кривые деформации и спектры АЭ здесь практически идентичны у образцов, растягиваемых без поля и в магнитном поле.
5. При деформации в магнитном поле аустенитной стали 1X18H9T кривая деформации мало меняется, но магнитное поле радикально меняет зависимость суммарного количества импульсов от деформации – без магнитного поля она плавная и не имеет особенностей, а при испытании в магнитном поле испытывает перегиб в области деформаций  $\epsilon > 10\%$ . Кроме того, в записываемом в процессе деформации спектре АЭ наблюдается явно различимый максимум, соответствующий указанной аномалии. Это связано с активацией магнитным полем мартенситного перехода с образованием ферромагнитной фазы.
6. Как и в случае ферритной стали Ст3, существенно меняется характер самого спектра АЭ аустенитной стали при испытании образцов в поле и без поля: при испытании без магнитного поля количество низкоамплитудных  $N_{\min}$  и высокоамплитудных импульсов  $N_{\max}$  сравнимо между собой  $N_{\min}/N_{\max}=1,18$ , тогда как при испытании в магнитном поле  $N_{\min}/N_{\max}\sim 3$ , то есть низкоамплитудные импульсы доминируют.
7. Полученные результаты связаны не столько с влиянием магнитного поля на термоактивированный

процесс движения дислокаций и снижение высоты барьеров, сколько с безактивационным преодолением препятствий дислокационными скоплениями в результате увеличения сил, действующих на скопление дислокаций за счет магнитного поля.

8. Полученные данные показывают, что при этом резко меняются сами дислокационные ансамбли: при деформации без поля крупные и малые ансамбли сравнимы по количеству, при деформации в поле низкоамплитудные импульсы доминируют.

9. Баркгаузенский шум, связанный с движением доменных стенок в настоящей работе не зафиксирован вследствие малой величины соответствующих им импульсов АЭ.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vonsovskii S.V. Magnetizm. – М: Nauka, 1971.–1032 s.
2. Spitsyn V.I., Troitskii O.A. Elektroplasticheskaya deformatsiya metallov. – М.: Nauka, 1985.– 160 с.
3. Gromov V.E., Zuev L.B., Kozlov E.V., Tsellermaier V.Ya. Elektrostimulirovannaya plastichnost' metallov i splavov. – М.: Nedra, 1996. – 290 s.
4. Roshchupkin A.M., Bataronov I.L. Fizicheskie osnovy elektroplasticheskoi deformatsii metallov // Izv. vuzov. Fizika. –1996. – Т. 39, № 3. – С. 57–65.
5. Bataronov I.L. Mekhanizmy vliyaniya elektricheskogo polya i elektricheskogo toka na plasticheskuyu deformatsiyu metallov //Dissertatsiya na soiskanie uchenoi stepeni doktora fiziko-matematicheskikh nauk.– Voronezh.– 2007.
6. Golovin Yu.I. Magnitoplastichnost' tverdyykh tel. – М: Mashinostroenie, 2003. –108 s.
7. Velikhanov . A.R. Deformatsiya germaniya v usloviyakh sovmestnogo deistviya toka i magnitnogo polya // FTT.– 2011.– Т.53, vyp.3. – S. 504-507.
8. Dunin-Barkovskii L.R., Morgunov R.B., Tanimoto Y. Vliyanie postoyannogo magnitnogo polya 15T na effekt Portevena-Le Shatel'e v kristallakh NaCl // FTT.– 2005.– Т.47, vyp. 7.– S. 1241-1246.
9. Kravchenko V.Ya. Vliyanie elektronov na tormozhenie dislokatsii v metallakh // FTT.– 1966.– Т.8.– S. 927–935.
10. Kaganov M.I., Kravchenko V.Ya., Natsik V.D. Elektronnoe tormozhenie dislokatsii v metallakh // Uspekhi fiz. nauk.– 1993. – Т. 11. – S.655-682.
11. Papirov I.I., Stoev P.I. Akusticheskaya emissiya titana v protsesse deformatsii // Voprosy atomnoi nauki i tekhniki, seriya «Pitannya atomnoi nauki ta tekhniki». –2007.– №4. – S. 184–191.
12. Greshnikov V.A., Drobot Yu.B. Akusticheskaya emissiya. – М: Izd-vo standartov, 1976. – 272 s.
13. Tripalin A.S., Builo S.I. Akusticheskaya emissiya. Fiziko-mekhanicheskie aspekty. – Iz-vo Rostovskogo universiteta, 1986. - 160 s.
14. Papirov I.I., Karpov E.S., Palatnik M.I., Mileshkin M.B. Ischeznovenie akusticheskoi emissii pri sverkhplastichnosti // DAN SSSR.– 1981.– Т. 256, № 2.– S. 392–394.
15. Sagaradze. V.V. Deformatsionno-indutsirumye nizkotemperaturnye diffuzionnye prevrashcheniya v stalyakh. «Razvitie idei akademika V.D. Sadovskogo». – Ekaterinburg, 2008. – S.192-217.
16. Tikadzumi S. Fizika ferromagnetizma.– М.: Mir, 1987.– 154s.
17. Barkhausen N. Zwie mit hilfe der neuen verstärkter entdeckte erschein-ungen // Phis. Z. – 1919. – Vol.20. – P.401.

УДК 691.735

## ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ

**В.Е. Семененко, С.А. Козионов**

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Институт высоких технологий*

*61108, г. Харьков, пр. Курчатова, 31*

*e-mail: [sergejsage@gmail.com](mailto:sergejsage@gmail.com)*

Received August 29, 2013

Рассмотрен механизм образования электронных соединений – структурных составляющих конструкционных материалов новой техники. Проведен анализ влияния плотности квантовых состояний на формирование структуры фаз в системе медь-цинк в широком диапазоне концентраций и физико-механические свойства сплавов. Установлена корреляция экспериментальных и теоретических данных.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** электронные соединения, плотность квантовых состояний, диффузия, фазовая диаграмма, зоны Бриллюэна

### FORMATION FEATURES OF ELECTRON COMPOUNDS IN COMPOSITE MATERIALS

**V.E. Semenenko, S.A. Kozionov**

*V.N. Karazin Kharkov National University., High Technology Institute*

*31 Kurchatov St., 61108, Kharkov, Ukraine*

The article contains observation on the formation of electron compounds of structural composite materials of the new technology. Investigated in copper-zinc influence of quantum states density on the formation of the phase structure and mechanical properties of alloys in a wide range of concentrations. Found the correlation of theoretical and experimental data.

**KEYWORDS:** electron compounds, quantum states density, diffusion, phase diagram, Brillouin zone

### ОСОБЛИВОСТІ УТВОРЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ СПОЛУК У КОНСТРУКЦІЙНИХ МАТЕРІАЛАХ

**В.Є. Семененко, С.А. Козионов**

*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Інститут високих технологій*

*61108, м. Харків, пр. Курчатова, 31*

Розглянуто механізм утворення електронних сполук – структурних складових матеріалів нової техніки. Проведено аналіз впливу щільності квантових станів на формування структури фаз у системі мідь-цинк у широкому діапазоні концентрацій і фізико-механічні властивості сплавів. Проведено кореляцію експериментальних та теоретичних даних.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** електронні сполуки, щільність квантових станів, дифузія, фазова діаграма, зони Бріллюэна

Современные конструкционные материалы гетерофазны, среди них заметное место занимают электронные соединения, существенно влияющие на физико-механические свойства сплавов [1, 2].

В настоящее время нельзя однозначно определить состав сплавов с заданными свойствами, но реальные подходы уже существуют [3]. Диаграммы состояния и состав-свойства – основной теоретический фундамент для выбора оптимальных составов соединений с заданными физико-механическими свойствами. Теоретические методы исследования диаграмм состояния применяют как для сокращения объема экспериментальных работ, так и для сопоставления теоретических и экспериментальных данных. Теоретический анализ диаграмм состояния в основном проводят термодинамическими методами. Для расчета свойств сплавов используется электронная теория металлов и методы квантовой механики, а экспериментальная проверка осуществляется методом просвечивающей электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа [4, 5].

Металлические соединения и фазы, среди которых заметное место занимают электронные соединения, образуются во многих металлических сплавах. Они имеют индивидуальные кристаллические структуры (как правило сложные) и по своим химическим и физическим свойствам отличаются как от чистых металлов, так и от твердых растворов. Химические соединения металлов отличаются от соединений ковалентного типа благодаря преобладанию металлической связи между атомами и характерными металлическими свойствами (электропроводностью, температурным коэффициентом электросопротивления, теплопроводностью и, в определенных условиях, способностью к пластической деформации). Последнее определяет возможность термомеханической обработки сплавов и расширение областей их практического использования [6].

Электронные соединения – кристаллические структуры, образуемые во многих металлических системах при определенных концентрациях валентных электронов на атом и не подчиняются правилу валентности. Во многих литературных источниках электронные соединения определяются теоретической формулой, определяющей существование различных фаз в зависимости от электронной концентрации [7]. При этом дается наибольшее содержание второго компонента (с более высокой валентностью), т.к. данная электронная концентрация является предельно допустимой. В таком случае, при повышении содержания второго компонента сверх предельно допустимого должна была бы появиться следующая фаза, что означает переход на

диаграмме равновесия из области промежуточной фазы в смежную двухфазную область. Однако на реальных диаграммах однофазная область в ряде случаев простирается в обе стороны от состава с определенным отношением количества валентных электронов на атом. Таким образом, исследование влияния электронных концентраций на формирование фаз необходимо для уточнения границ однофазных областей.

Атомы растворителя в металлических кристаллах отдают все свои валентные электроны в общее облако свободных электронов. Изучение распределения валентных электронов в разбавленных растворах меди показывает, что при этом все растворенные атомы (как и атомы растворителя) отдают один электрон в электронное облако. Анализ электрического сопротивления сплавов показывает, что избыточный заряд, остающийся на растворенном атоме, мал. Это означает, что большинство оставшихся валентных электронов локализованы вблизи растворенного атома и находятся в электронных состояниях, энергия которых меньше энергии Ферми [4].

Сплавы медь-цинк легируют, вводя в них алюминий, железо для повышения механических и антикоррозионных свойств. Содержание *Pb* и *Be* в  $\alpha$ -латуни ограничивают тысячными долями процента во избежание разрушения при горячей обработке давлением. Образцы легкоплавких включений в сплавах *Cu* – *Zn* не оказывают вредного воздействия на пластичность так как при приближении  $\alpha + \beta \leftrightarrow \beta$  (40% *Zn*) они располагаются не по границам зерен, а внутри кристаллов  $\alpha$ -фазы, кристаллизующейся на включениях свинца как зародышах [7].

Целью данной работы является изучение влияния электронной структуры на формирование фазового состава медных сплавов, механизмов идентификации фазовых переходов с помощью кривых квантовых состояний.

### МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В качестве исходных материалов использовалась медь высокой чистоты (99,999%) и цинк (99,98%), аналогично [8]. Образцы меди с определенным содержанием цинка подвергались плавке в вакууме  $< 10^{-4}$  Па. В ряде случаев проводился термический отжиг. Химическое травление образцов осуществлялось в водных растворах *HCl* (10%) и *FeCl<sub>3</sub>* (3%). Идентификация фаз осуществлялась методами металлографического (МИМ-8) и рентгеноструктурного (ДРОН-4) анализа. По интенсивности лучей, имеющих данную частоту, определялась плотность квантовых состояний в полосе проводимости. При изучении спектра мягких рентгеновских лучей, исследуемый металл (медь) является антикатодом рентгеновской трубки и бомбардируется электронами. В результате из внутренних оболочек некоторых атомов выбиваются электроны, а другие электроны из полосы проводимости заполняют промежутки, образовавшиеся во внутренних оболочках. Энергия, освободившаяся при перемещении электронов на внутренние оболочки, выделяется в виде рентгеновских лучей, энергия которых измеряется.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Известно, что для описания природы электро- и теплопроводности удобно считать электроны в металле как газ невзаимодействующих частиц. В рамках модели почти свободных электронов рассмотрим свойства исследуемых сплавов исходя из его электронной структуры, плотности квантовых состояний металла.

Число занятых квантовых состояний на единицу объема с энергиями от  $E$  до  $E + dE$  определяется [4]:

$$dN(E) = \frac{2\pi}{h^3} (2m_e)^{3/2} \sqrt{E} dE, \quad (1)$$

где  $h$  – постоянная планка,  $m_e$  – масса электрона. Продифференцировав выражение (1) по энергии, получим плотность квантовых состояний  $n(E)$  на каждом энергетическом уровне  $E$ :

$$n(E) = \frac{2\pi}{h^3} (2m_e)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (2)$$

В случае свободных электронов кривая  $n(E)$  имеет вид ветки параболы, для кристаллов эта зависимость изменяется в связи с наличием зон Бриллюэна [3].

Если электроны заполняют более одной зоны Бриллюэна, то в зависимости от минимальной энергии заполнения последующей зоны и максимальной энергии текущей возможно перекрытие зон, либо же зоны не перекрываются (рис.1).

Если кривые не перекрываются, то между ними наблюдается разрыв, а плотность состояний между точками  $E_1$  и  $E_2$  равна нулю (рис. 1а). Таким образом, в интервале энергий от  $E_1$  до  $E_2$  электронные состояния отсутствуют. Заштрихованная область во второй зоне указывает на то, что количества электронов вполне достаточно для того, чтобы заполнить не всю зону, а только её часть. При перекрытии зон общая кривая  $n(E)$  получается при наложении отдельных  $n(E_i)$ -кривых каждой из зон (рис. 1б) [9].

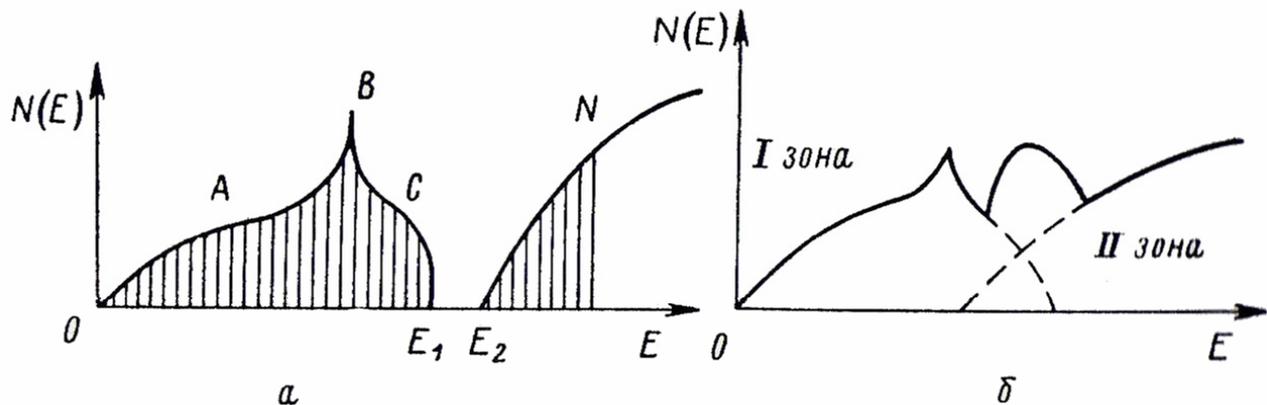


Рис 1. Кривые плотности квантовых состояний.  
а – зоны не перекрываются; б – зоны перекрываются.

Заполняемость квантовых состояний в зонах электронами определяется количеством коллективизированных электронов в объеме металла. Так как рассматриваемые зоны Бриллюэна отвечают S-состояниям, то согласно принципу запрета Паули каждое состояние может содержать по два электрона с противоположно ориентированными спинами. Если количество коллективизированных электронов недостаточно для заполнения всех квантовых состояний, то в первую очередь заполненными окажутся состояния, отвечающие наименьшей энергии. В случае одновалентных металлов (медь) наблюдается заполнение половины квантовых состояний с наименьшей энергией. Для элементов с более высокой валентностью (цинк) заполняемость зон Бриллюэна зависит от степени перекрытия зон. В случае перекрытия заполнение второй зоны не происходит, пока не будет полностью заполнена первая.

Исследование  $n(E)$  кривых актуально при изучении областей гомогенности фаз сплавов конструкционных материалов [9]. Поскольку площадь под кривой  $n(E)$  постоянна, то заштрихованная площадь занятых электронами квантовых состояний пропорциональна числу электронов (рис.2). В результате при постоянном числе коллективизированных электронов повышение энергии занятых квантовых состояний приводит к снижению высоты  $n(E)$  - кривых при постоянстве площади фигур, заключенных внутри области. При рассмотрении кристаллических структур с одним и тем же количеством коллективизированных электронов структура, описываемая более высокой кривой (рис. 2а), более стабильна [10].

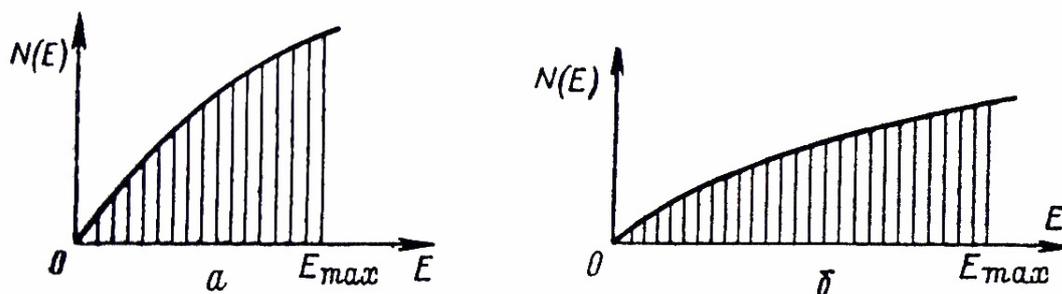


Рис 2. Кривые плотности квантовых состояний кристаллов  
а – стабильное состояние кристалла; б – нестабильное

Рассмотрим первичный одновалентный металл (медь), который имеет гранцентрированную кубическую решетку (ГЦК), отвечающую  $\alpha$ -фазе. Добавление в медь двухвалентного металла цинка приведет к повышению электронной концентрации. В случае чистой меди зона Бриллюэна заполнена на половину электронами, при растворении цинка в меди концентрация электронов повышается: происходит заполнение свободных квантовых состояний с более высокой энергией. Первоначально заполняются квантовые состояния, отвечающие первой зоне В-Е1 (рис. 3). В точке В существование  $\alpha$  и  $\beta$  фазы равновероятно [11].

Однако за точкой А кривая  $\alpha$  фазы поднимается и дает пик в точке В, что соответствует концентрации электронов, при которой граница зоны Бриллюэна касается поверхности Ферми. Для  $\beta$ -фазы кривая следует по параболе, при приближении к концентрации электронов близких к точке С наблюдается подъем. Максимум в точке С отвечает предельной электронной концентрации  $\beta$ -фазы и касанию границей  $\beta$ -фазы зоны Бриллюэна поверхности Ферми.

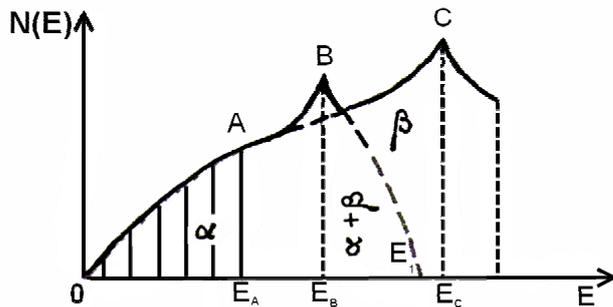


Рис. 3. Вид кривых плотности квантовых состояний для  $\alpha$  -  $\beta$ -фаз медно-цинковых сплавов.

электронов.

Установлена связь, между длиной волной электронов  $\lambda''_{\min}$  и количеством атомов в объеме  $V$ . Так как первая  $\alpha$ -фаза имеет ГЦК-решетку, то наиболее удаленными друг от друга плоскостями являются плоскости [111]. Согласно уравнению Вульфа-Брегга на расстоянии  $d$  между этими плоскостями наблюдается отражение электронной волны:

$$n\lambda = 2d \sin \alpha, \quad (4)$$

где  $\alpha$  — угол отражения,  $n$  — порядок дифракционного максимума. Для отражения первого порядка  $\lambda''$  будет равно  $\lambda''_{\min} = \lambda'' = 2d$  и соответствует точке B (рис. 3).

Обозначим параметр решетки через  $a$ , тогда

$$d = a/\sqrt{3} \Rightarrow \lambda''_{\min} = 2a/\sqrt{3}. \quad (5)$$

Объем элементарной ячейки ГЦК решетки равен  $V_{el} = a^3$  и содержит 4 атома, а в объеме  $V$  содержится  $N_a$  атомов, следовательно:

$$\frac{a^3}{4} = \frac{V}{N_a} \Rightarrow a = \left( \frac{4V}{N_a} \right)^{1/3}. \quad (6)$$

После подстановки величины  $a$  в уравнения (5) и приравнивания длин волн, получаем отношение валентных электронов к числу атомов в  $\alpha$ -фазе, соответствующее стабильному состоянию:

$$\frac{N_e}{N_a} = \pi \frac{\sqrt{3}}{4} \approx 1,36. \quad (7)$$

Аналогично для  $\beta$ -фазы с объемно центрированной решеткой (ОЦК) соотношение валентных электронов к числу атомов равно

$$\frac{N_e}{N_a} = \pi \frac{\sqrt{2}}{3} \approx 1,48. \quad (8)$$

Таким образом, на области стабильности фаз влияет не только отношение валентных электронов к числу атомов, но и разность атомных объемов.

На рис. 4(а) представлена диаграмма состояния системы медь-цинк и структура, полученная в результате диффузии на границе меди и цинка при  $400^\circ\text{C}$  в течении 55 часов (рис. 4б). Горизонтальная линия, проведенная на диаграмме равновесия при  $400^\circ\text{C}$ , указывает определенную экспериментально последовательность в расположении фаз по длине составного образца, в котором происходит диффузия. В образце имеются слои, соответствующие всем однофазным областям, полученные при пересечении диаграммы равновесия изотермой ( $T=400^\circ\text{C}$ ):  $\beta$  ( $\text{CuZn}$  - ОЦК решетка),  $\gamma$  ( $\text{Cu}_5\text{Zn}_8$  - сложная кубическая решетка),  $\varepsilon$  ( $\text{CuZn}_3$  - гексагональная плотноупакованная решетка),  $\alpha$  и  $\eta$  — твердые растворы на основы меди и цинка соответственно.

Однако двухфазные слои, соответствующие двухфазным областям диаграммы, не наблюдаются. Этим областям соответствуют поверхности раздела однофазных слоев. Отсутствие двухфазных слоев при изотермической диффузии объясняется тем, что для протекания диффузии необходим градиент концентраций, который может поддерживаться в двухфазном слое. В результате диффузия идет только через поверхность двух фаз, но не через двухфазную структуру.

Определены критические значения электронных концентраций, отвечающие пределу стабильности фаз [9]. Минимальная длина волны электрона с энергией, соответствующей поверхности Ферми:

$$\lambda'_{\min} = 2(\pi V / 3N_e)^{1/3} \quad (3)$$

где  $N_e$  - число коллективизированных электронов в объеме металла  $V$ . Полученное уравнение связывает минимальную длину волны электронов, обладающих максимальной энергией, с количеством коллективизированных

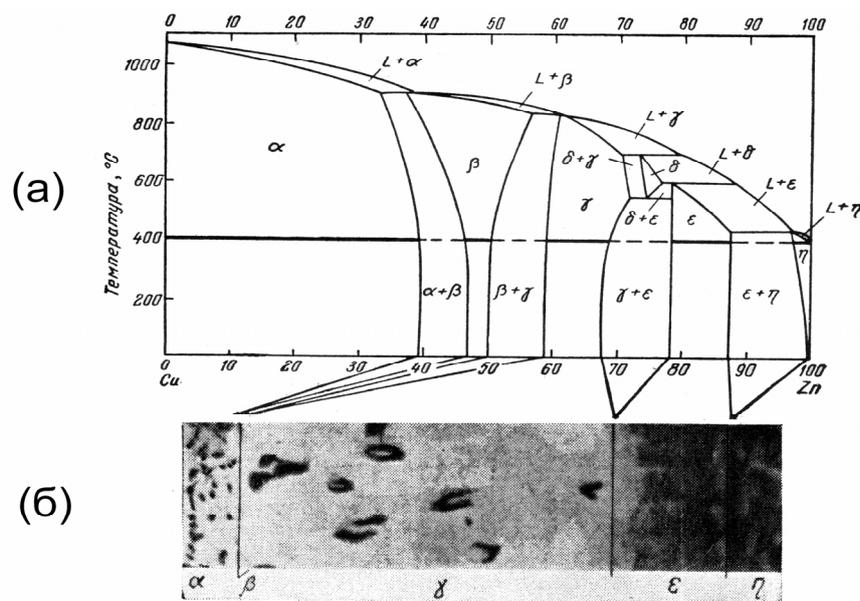


Рис. 4. Диаграмма равновесия и микроструктура слоев сплава  
(а) - диаграмма равновесия системы  $Cu-Zn$   
(б) - микроструктура однофазных слоев, образующихся при диффузии  $Cu$  и  $Zn$ ;  
x150, МИМ-8.

Таким образом, на каждой поверхности раздела имеется скачок концентраций. Определено, что при продолжительной изотермической диффузии ( $\tau > 50$  часов), когда возможно установление равновесного состояния, в зависимости от среднего состава образца образуется однослойная (однофазная) либо двухфазная структура. Действительно, при составе 52% цинка и 48% меди (рис.4б), образец состоит только из зерен  $\beta$  фазы, для образцов  $Cu$  (25%) и  $Zn$  (75%) – из слоя  $\gamma$  фазы и граничащего с ней слоя  $\epsilon$  фазы. По данным металлографического анализа, в слое  $\gamma$  фазы наблюдались овальные поры, образованные из-за различной скорости диффузии цинка и меди. [12-14]. Наблюдаемая более высокая скорость диффузии цинка приводит к тому, что образуются вакансии, которые сливаются в поры, что является следствием наблюдаемого эффекта Киркендалла.

Обнаруженная в слитке фаза  $\beta'$  с большим содержанием цинка, обусловлена упорядочением фазы, которое не удается полностью предотвратить даже при очень быстром охлаждении от температуры выше температуры Курнакова ( $T > 0,6T_{m1}$ ), при этом сплав хрупок [9]. Установлено, что при повышении содержания цинка от 30% до 45% (рис. 5), прочность увеличивается, а пластичность резко уменьшается, особенно в связи с появлением  $\beta'$  фазы [10].

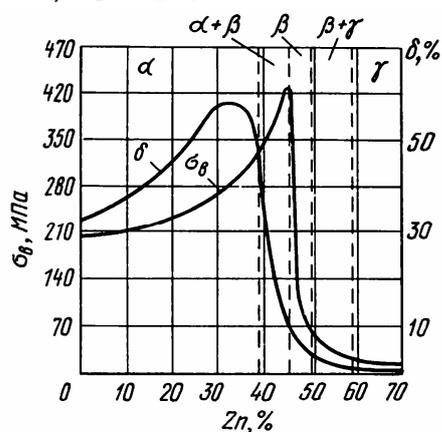


Рис. 5. Влияние содержания цинка на прочность  $\sigma_y$  и пластичность  $\delta$  сплава  $Cu-Zn$

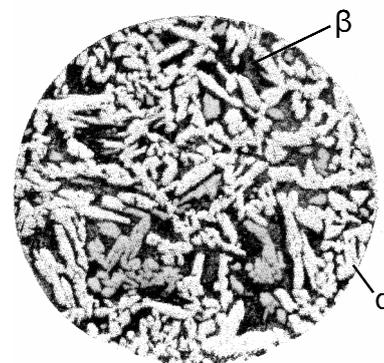


Рис 6. Микроструктура  $\alpha + \beta$  сплава  $Cu+41\%Zn$ :  $\alpha$  -фаза светлая,  $\beta$  – темная; x100, МИМ-8.

Как отмечалось ранее, содержание в меди свинца и висмута в  $\alpha$ -латуни составляет тысячные доли процента [8]. Последнее позволяет избежать разрушения сплава при горячей обработке давлением. В сплаве  $Cu-Zn$  (40%  $Zn$ ), легированном свинцом 1%, приводящим к улучшению обрабатываемости сплава,

наблюдались в структуре слитка легкоплавкие включения.

При фазовом превращении свинец располагается не по границам зёрен, а внутри кристаллов  $\alpha$ -фазы, кристаллизующихся на включениях свинца как на зародышах (рис. 6).

Обнаружено, что в сплавах  $Cu-Zn$  слабо выражена дендритная ликвация в виду малого расстояния между линиями ликвидус и солидус (рис. 4а). Последнее обуславливает склонность сплавов к образованию усадочной раковины при кристаллизации. При этом сплавы с  $\alpha$ -фазой хрупки в интервале  $300^{\circ}C - 700^{\circ}C$ , что обуславливает возможность обработки давлением при температуре ниже  $300^{\circ}C$  или выше  $700^{\circ}C$ . В результате проведенных исследований установлено, что целесообразно осуществлять нагрев сплава  $\alpha + \beta$  до температуры однофазного  $\beta$  состояния для проведения его горячей обработки.

### ВЫВОДЫ

Определено, что при растворении цинка в меди концентрация валентных электронов повышается в результате заполнения свободных квантовых состояний с более высокой энергией. При увеличении концентрации цинка образуется  $\alpha + \beta$ -фаза, благодаря последовательному заполнению зон Бриллюэна.

Проведен анализ и расчет критических значений концентраций валентных электронов в области гомогенности фаз. На ширину области стабильности фазы влияет не только величина средней концентрации валентных электронов на атом  $\frac{N_e}{N_a}$ , но и разность атомных объемов.

Установлено, что при продолжительной изотермической диффузии  $Cu$  и  $Zn$ , в зависимости от среднего состава образца, образуется однослойная (однофазная), либо двухслойная (двухфазная) структура. В процессе изотермического отжига происходит последовательное расположение фаз по длине составного образца.

Хрупкость сплава с большим содержанием цинка (от 40%) обусловлена упорядочением фазы  $CuZn$ . Обнаружено увеличение пластичности сплава, легированного свинцом при фазовом превращении  $\beta \rightarrow \beta'$ , что обусловлено расположением свинца не по границам зёрен, а внутри кристаллов  $\alpha$ -фазы кристаллизующейся на включениях свинца как на зародышах.

Приведенные расчеты представляют интерес при определении областей гомогенности и стабильности электронных соединений в различных сплавах конструкционных материалов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lisheng Zhong et.al. In situ fabrication of titanium carbide particulates-reinforced iron matrix composites // Materials&Design – 2011. – Vol. 32. – Iss.7. – P.3790-3795.
2. Azarenkov N.A., Semenenko V.E, Leonovich A.V. Termicheskaya i razmernaya stabil'nost' struktury tugoplavkikh karbidnykh mikrokompozitov // Problemy prochnosti. - 2013. - № 4. - С.88-96.
3. Kosevich A.M. The crystal lattice: Phonons, Solution, Dislocation, Superlattices. - Willey-Vergand: Weinheim, 2005. - P.241-244.
4. Kottrell A.Kh. Stroenie metallov i splavov. – М.: Metallurgizdat, 1961. – 288 s.
5. Kan R.U., Khaazen P. Fizicheskoe materialovedenie v trekh tomakh, T. 2 / Per. s angl. – М.: Metallurgiya, 1987. - С.58-61.
6. Novikov I.I. Teoriya termicheskoi obrabotki metallov. – М.: Metallurgiya, 1978. – 392 s.
7. Mal'tseva L.A. et al. Influence of impurity on mechanical properties of copper // Metal science and Heat Treatment. – 2010. - Vol.52. - № 1-2. - P.39-45.
8. Semenenko V.E., Lysan D.V., Kovalenko T.A. Osobennosti rekristallizatsii medi vysokoi stepeni chistoty // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2011. - №946. – Iss.1(49). - S.70-74.
9. Azarenkov N.A., Semenenko V.E., Litovchenko S.V. Fazovye равновесия i diagrammy sostoyaniya / Uchebnoe posobie. – Kh.: KhNU, 2006. – 101s.
10. Patterson J., Bailey B. Metals, Alloys and the Fermi Surface // Solid-State Physics. - 2010. – Iss. 22. – P.827.
11. Engel N. Copper, copper alloys and the electron concentration concept // Acta Metallurgica. - 2011. – Vol. 15, № 3. – P. 557–563.
12. Merer Kh. Diffuziya v tverdykh telakh. / Per. s nem. – Dolgoprudnyi: Intellekt, 2011. – 535 s.
13. Shinyayev A.Ya. Diffuzionnye protsessy v splavakh. – М.: Nauka, 1975. – 225 s.
14. Azarenkov N.A., Semenenko V.E, Stervoedov N.G., Kasilov A.A. Vliyanie diffuzionnykh protsessov na strukturnuyu stabil'nost' i iznosostoikost' estestvennykh mikrokompozitov // VANT. Seriya: FRPRM. - 2011. - Vyp. 97. - С.149-154.

УДК 669.297

## РАФИНИРОВАНИЕ ГАФНИЯ МЕТОДОМ ЗОННОЙ ПЕРЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ С УЧЕТОМ ИСПАРЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ

**О.Е. Кожевников, П.Н. Вьюгов, Н.Н. Пилипенко, В.Д. Вирич**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»*

*61108, Харьков, ул. Академическая, 1*

*E-mail: [kozhevnikov@kipt.kharkov.ua](mailto:kozhevnikov@kipt.kharkov.ua)*

*Received September 3, 2013*

Приведен расчет эффективности рафинирования гафния методом бестигельной зонной перекристаллизации в глубоком вакууме с учетом испарения примесей. Вычислены для  $i$ -той примеси эффективный коэффициент распределения  $k_{эф, i}$ , фактор испаряемости  $g_i$  и изменение относительной концентрации  $C_{ngi}/C_{oi}$  после  $n$ -го числа проходов для квазистационарной области слитка. Экспериментально подтверждена эффективность применения зонной перекристаллизации для рафинирования гафния, как от металлических, так и газообразующих примесей. Получены образцы гафния чистотой 99,88 мас %. Разработана технологическая схема получения высокочистых образцов переходных металлов.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** гафний, бестигельная зонная перекристаллизация, примесь, испарение, рафинирование

### THE FLOATING-ZONE REFINING OF HAFNIUM TAKING INTO ACCOUNT THE IMPURITY EVAPORATION

**O.E. Kozhevnikov, P.N. V'yugov, M.M. Pylypenko, V.D. Virich**

*National science center "Kharkov Institute of Physics and Technologies"*

*1 Academicheskaya St., Kharkov, Ukraine, 61108*

The calculation efficiency method of hafnium refining by crucibleless float-zone recrystallization method in high vacuum taking into account the impurity evaporation is conducted. For the  $i$ -th impurity an effective distribution coefficient  $k_{эф, i}$ , an evaporation factor  $g_i$  and a change in the relative concentration  $C_{ngi}/C_{oi}$  after the  $n$ -th number of passes for the quasi-stationary ingot field are calculated. The efficiency of floating-zone method for purification of hafnium from metallic and gas-forming impurities was experimentally confirmed. Hafnium samples with purity 99.88 wt% were obtained. Process obtaining flowsheet of high-purity transition metal samples was developed.

**KEY WORDS:** hafnium, crucibleless float-zone recrystallization, impurity, evaporation, refining

### РАФІНУВАННЯ ГАФНІЮ МЕТОДОМ ЗОННОЇ ПЕРЕКРИСТАЛІЗАЦІЇ З УРАХУВАННЯМ ВИПАРОВУВАННЯ ДОМІШОК

**О.Е. Кожевников, П.Н. Вьюгов, М.М. Пилипенко, В.Д. Вирич**

*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»*

*61108, Харків, вул. Академічна, 1*

Наведено розрахунок ефективності рафінування гафнію методом безтигельної зонної перекристалізації в глибокому вакуумі з урахуванням випаровування домішок. Обчислені для  $i$ -тої домішки ефективний коефіцієнт розподілу  $k_{эф, i}$ , фактор випаровуваності  $g_i$  і зміна відносної концентрації  $C_{ngi}/C_{oi}$  після  $n$ -го числа проходів для квазістаціонарної області злитку. Експериментально підтверджено ефективність застосування зонної перекристалізації для рафінування гафнію, як від металевих, так і газоутворюючих домішок. Отримані зразки гафнію чистотою 99,88 мас%. Розроблено технологічну схему отримання високочистих зразків перехідних металів методом зонної плавки.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** гафній, безтигельна зонна перекристалізація, домішки, випаровування, рафінування

С 80-х годов двадцатого века гафний начал находить большое применение в мировой атомной технике. Производство циркония, используемого в качестве основного конструкционного материала для изготовления тепловыделяющих элементов ядерных энергоблоков, привело к увеличению производства гафния. К настоящему времени накоплен большой опыт по химическому разделению циркония и гафния, усовершенствована технология изготовления материалов с требуемыми физико-механическими характеристиками, накоплена статистика по длительности эксплуатации и эволюции свойств изделий, работающих в активных зонах ядерных реакторов.

Гафний (Hf) относится к элементам IVA группы периодической системы Менделеева, как и титан с цирконием. И хотя химические свойства этих металлов очень сходны, основные применения в реакторостроении не одинаковы вследствие различных нейтронно-физических характеристик. Эффективность гафния характеризуется высоким значением поперечного сечения поглощения тепловых нейтронов ( $105 \pm 5$  барн), что на три порядка больше, чем у циркония. Гафний обладает хорошими механическими и химическими (высокая коррозионная стойкость) свойствами, что позволяет использовать его для изготовления органов регулирования систем управления и защиты реакторов. В условиях радиационного облучения поперечное сечение поглощения Hf снижается очень медленно. Это обусловлено изотопным составом гафния и особенностями трансмутации изотопов Hf в потоке нейтронов.

У экспериментаторов всегда присутствует интерес к получению высокочистых образцов различных металлов. Проводимые исследования на таких образцах дают возможность более правильно оценить различные

физико-механические свойства, связанные с природой металлов.

Процессы кристаллизации из расплавов являются одними из важнейших способов рафинирования металлов и полупроводниковых материалов. Как правило, они применяются на конечной стадии очистки для удаления малых концентраций примесей. При проведении процесса зонной плавки в вакууме, кроме рафинирования основного материала в результате зонного разделения примесей, также происходит испарение примесей, имеющих высокое давление насыщенного пара при температуре плавления основного материала. В проведенных ранее исследованиях по зонной очистке гафния не уделялось достаточного внимания вопросу расчета эффективности метода зонного рафинирования, учитывая испарение легколетучих примесей.

Целью настоящей работы является проведение расчетных и экспериментальных исследований по рафинированию гафния методом зонной перекристаллизации с учетом испарения примесей.

### РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНОСТИ ОЧИСТКИ ГАФНИЯ МЕТОДОМ ЗОННОЙ ПЕРЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Для определения эффективности удаления примесей из гафния методом зонной перекристаллизации авторами был проведен расчет, базирующийся на учете одновременного прохождения процессов зонного перераспределения элементов и испарения летучих примесей.

Принцип зонного рафинирования основан на различной растворимости примесей в жидкой и твердой фазах основного материала [1]. Характеристикой оценки эффективности очистки является коэффициент распределения  $k$ , представляющий отношение концентрации примеси в твердой фазе  $C_T$  к концентрации в расплаве  $C_J$ :

$$k = C_T / C_J. \quad (1)$$

Численное значение параметра  $k$  зависит от ряда факторов: характера фазовой диаграммы, образуемой основным компонентом и примесью, условий затвердевания, скорости перемещения расплавленной зоны, интенсивности перемешивания и т. д. Если  $k < 1$ , то затвердевающий материал становится чище, а расплав насыщается примесью. Различают понятия равновесного и эффективного коэффициента распределения.

Равновесный коэффициент  $k_0$  по одному методу определяют из двойных диаграмм состояния «основа-примесь» по отношению отрезков горизонтальных линий от оси температур до их пересечения с линиями солидуса и ликвидуса. Другим способом является расчет по отношению максимальной растворимости примеси к ее концентрации в точке невариантного превращения. В обоих случаях предполагается, что равновесный коэффициент не зависит от концентрации примеси в основном материале и от температуры [2,3].

Точный расчет  $k_0$  на основе фазовых диаграмм сильно ограничен, так как зонная плавка (ЗП) в основном применяется для очистки от малых концентраций примесей, а имеющиеся фазовые диаграммы недостаточно точны для получения в этой области концентраций удовлетворительных результатов. Поэтому, расчет коэффициентов распределения из диаграмм состояния следует рассматривать как ориентировочную оценку их значения. На практике величина  $k_0$  может быть достигнута лишь при очень медленном перемещении зоны.

При проведении зонной плавки необходимо, чтобы скорость кристаллизации была больше скорости диффузии примеси в твердой фазе основного материала, но и не превышала некоторого оптимального значения. В этом случае движущийся фронт кристаллизации отталкивает растворенную примесь быстрее, чем она успевает равномерно распределиться в расплаве, и перед фронтом кристаллизации возникает обогащенная примесью область, называемая диффузионным слоем. Ширина диффузионного слоя зависит от диффузионной способности примеси, вязкости расплава, характера движения жидкости, скорости кристаллизации. Вне слоя перенос осуществляется в результате движения жидкости, а концентрация примеси в расплаве приближается к значению  $C_J$ .

Поэтому основной характеристикой зонного разделения примесей является эффективный коэффициент разделения ( $k_{эф}$ ), который можно выразить формулой Бартона-Прима-Слихтера [4]:

$$k_{эф} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \cdot e^{-\frac{v\delta}{D}}}, \quad (2)$$

где  $v$  – скорость перемещения зоны,  $\delta$  – ширина диффузионного слоя,  $D$  – коэффициент диффузии примеси в жидкости.

Отношение  $v\delta/D$  является безразмерным и называется приведенной скоростью кристаллизации. Известной величиной обычно является только скорость перемещения зоны  $v$ . Значение коэффициента диффузии  $D$  для большинства практических случаев колеблется от  $10^{-4}$  до  $10^{-5}$  см<sup>2</sup>/с. Ширину диффузионного слоя  $\delta$  определяют экспериментально либо теоретически.

Данные для  $k_0$ , определенные из диаграмм состояния по методу растворимости, могут быть более достоверными, поскольку значения предельной растворимости примеси и точка невариантного превращения определены экспериментально. Однако надо иметь в виду, что при таком методе расчета значения коэффициента распределения определяются для значительных концентраций примеси в основе, а параметр  $k_0$  обычно является характеристикой для примесей с малым содержанием в основном компоненте. Более подходящим является использование теоретических методов расчета равновесного коэффициента  $k_0$ , исходя из термодинамических кон-

стант. Полагая, что примесь с малой концентрацией образует твердый раствор с основой, равновесный коэффициент распределения можно определить из частного случая уравнения Вант-Гоффа [5]:

$$\ln \frac{C_{жi}}{C_{тви}} = -\frac{\Delta H_i}{R} \left( \frac{1}{T_{осн}^{пл}} - \frac{1}{T_i^{пл}} \right) = \lambda, \quad (3)$$

и тогда

$$\frac{C_{жi}}{C_{тви}} = e^{\lambda}, \quad k_0 = 1/e^{\lambda}. \quad (4)$$

$C_{жi}$  и  $C_{тви}$  – концентрации  $i$ -той примеси в жидкой и твердой фазах;  $\Delta H_i$  – мольная теплота плавления  $i$ -той примеси (Дж/моль);  $R$  – универсальная газовая постоянная ( $R = 8,314$  Дж/моль·К);  $T_{осн}^{пл}$  – температура плавления основы;  $T_i^{пл}$  – гипотетическая температура плавления  $i$ -той примеси, значение которой выбирается в зависимости от вида диаграммы состояния.

Для диаграмм состояния, образующих непрерывный ряд твердых растворов, диаграмм перитектического типа во всем интервале концентраций, а также для примесей, диаграммы которых с основным металлом неизвестны,  $T_i^{пл}$  соответствует температуре плавления примесного элемента. В случае диаграмм состояния, имеющих ряд эвтектических и перитектических превращений, значение  $T_i^{пл}$  выбирается соответствующим минимальной температуре превращения эвтектического или перитектического типа [5-7].

Таким образом, определив значения  $k_0$  по соотношениям (3,4), можно рассчитать значение эффективного коэффициента распределения  $k_{эф}$  по формуле (2).

При зонной плавке в вакууме, кроме очистки материала в результате разделения примесей, также происходит испарение примесей, имеющих высокое давление насыщенного пара при температуре плавления основного материала. Так, при температуре плавления гафния ( $T_{Hf}^{пл} = 2500$  К) можно ожидать уменьшения концентрации целого ряда примесей (Al, Ca, Cu, Fe, Mn, Ni, Si и др.) (рис. 1).

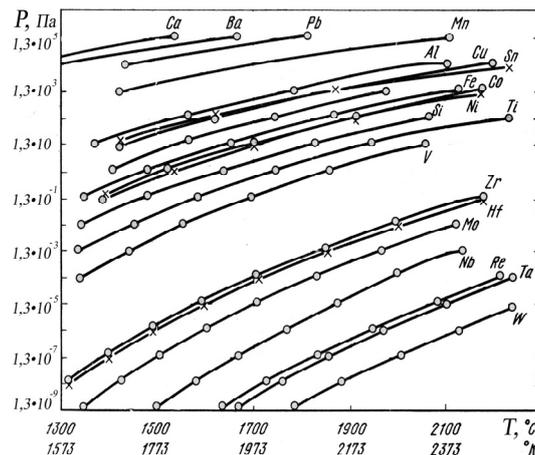


Рис. 1. Зависимость давления пара различных металлов от температуры [8,9].

Среди существующих методов расчета изменения концентраций примесей в основном материале в ходе прохождения процесса испарения наиболее удобной представляется методика, предложенная в работе [10]. Согласно материалам этой статьи, приведенный коэффициент испарения  $i$ -той примеси  $g_i$  (являющийся безразмерной величиной) выражается формулой:

$$g_i = \frac{2\alpha_i \gamma_i p_i^0 V l}{17,16 v r \sqrt{\frac{A_i T_i^{пл}}{i_{осн}} \eta_i}}, \quad (5)$$

в которой (по отношению к  $i$ -той примеси):  $\alpha_i$  – коэффициент Ленгмюра;  $p_i^0$  – давление насыщенного пара при температуре  $T$ , тор;  $\gamma_i$  – коэффициент активности;  $A_i$  – атомный вес в конденсированной фазе;  $\eta_i$  – число атомов в молекуле пара;  $V = A_{осн}/\rho_{осн}$  – атомный (мольный) объем основного компонента;  $r$  – радиус расплавленной зоны,  $l$  – длина зоны,  $v$  – скорость перемещения зоны.

При небольших скоростях перемещения зоны (от 2 до 8 мм/мин) в средней части рафинируемого образца устанавливается область квазистационарной концентрации. Концентрация  $i$ -той примеси после  $n$ -го числа проходов  $C_{ngi}$  в квазистационарной области связана с начальной концентрацией  $C_{oi}$  простым соотношением, которое является допустимым только при рассмотрении малых концентраций примесей:

$$C_{ng_i}/C_{oi} = \left( \frac{k_{эф_i}}{k_{эф_i} + g_i} \right)^n \quad (6)$$

Анализ диаграмм состояния двойных металлических систем с гафнием [11] показал, что при проведении ЗП вследствие различной растворимости примесей в жидкой и твердой фазе гафния будет происходить рафинирование от всех металлических примесей и большинства примесных элементов внедрения (исключение составляет кислород), т.е. при зонной плавке Hf равновесный коэффициент распределения  $i$ -той примеси  $k_{oi} < 1$ .

Известно, что значительная степень очистки от легколетучих примесей достигается при высоких скоростях передвижения зоны (больше 16 мм/мин). Обычно проведение двух проходов ЗП гафния на высокой скорости является достаточным для того, чтобы металлические примеси, имеющие высокое давление насыщенного пара, испарились. Для очистки от труднолетучих примесей требуется проведение зонной перекристаллизации на малой скорости. Как правило, имеется оптимальная скорость передвижения зоны по слитку, при которой время очистки может существенно сократиться. При проведении экспериментов на установке ЗП было установлено, что оптимальной скоростью перемещения зоны для рафинирования гафния является 2 мм/мин.

Используя формулы (2-6), были произведены расчеты значения эффективного коэффициента распределения  $k_{эф_i}$  и коэффициента испарения  $g_i$  для металлических примесей, а также изменения отношения концентраций примесей  $C_{ng_i}/C_{oi}$  с учетом испарения и зонной перекристаллизации в квазистационарной области после различного числа проходов со скоростью 2 мм/мин (значения приведены в таблице 1).

При проведении расчетов были приняты во внимание условия, характерные при бестигельной зонной плавке тугоплавких металлов с малым содержанием примесей:  $\gamma_i=1$ , т.к. при температуре плавления гафния не ожидается взаимодействия между атомами примесного металла и Hf с образованием каких-либо устойчивых связей; испарение металлических примесей происходит в молекулярном режиме в виде одноатомных молекул из умеренно перемешиваемого расплава ( $\alpha_i=1$ ,  $\eta_i=1$ , параметр  $\delta/D \approx 200$  с/см [10]).

Расчеты показывают, что очистка гафния от металлов IVA и VA группы, образующих непрерывные твердые растворы с высокотемпературной  $\beta$ -фазой Hf на всем промежутке концентраций, является затруднительной. Некоторое уменьшение содержания Ti, Zr, Nb будет возможным лишь в результате некоторого испарения и медленного смещения этих примесей в конечную часть образца после многократных процессов ЗП.

Таблица 1.

Расчетные значения эффективного коэффициента распределения  $k_{эф_i}$ , фактора испаряемости  $g_i$  и изменения относительных концентраций  $C_{ng_i}/C_{oi}$  для  $i$ -той примеси после  $n$ -го числа проходов ЗП квазистационарной области образца

№ п/п	Элемент	$T^{пл}$ , K	$T^{пл}_i$ , K	$\Delta H_i$ , кДж/моль	$k_{oi}$ (расч)	$k_{эф_i}$ (расч)	$g_i$ (расч) при $v=2$ мм/мин	$C_{ng_i}/C_{oi}$		
								n=1	n=2	n=3
1.	Гафний	2500	2500	25,1	1	1	0,001	–	–	–
2.	Цирко-	2125	2125	19,2	0,8496	0,91668	0,0099	0,9892	0,9786	0,9681
3.	Алюми-	933,5	933,5	10,75	0,4198	0,58498	402,854	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$2,1 \cdot 10^{-6}$	$3,05 \cdot 10^{-9}$
4.	Вольф-	3653	2223	35	0,8107	0,89297	$2,8 \cdot 10^{-5}$	0,9999	0,9999	0,9999
5.	Железо	1812	1573	13,8	0,6762	0,80267	11,454	$6,5 \cdot 10^{-2}$	$4,3 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-6}$
6.	Кальций	1112	1112	9,2	0,5755	0,72534	1502,38	$4 \cdot 10^{-4}$	$2,32 \cdot 10^{-7}$	$1,12 \cdot 10^{-10}$
7.	Кремний	1688	1603	50,6	0,2561	0,40139	89,73	$4 \cdot 10^{-3}$	$1,98 \cdot 10^{-5}$	$8,8 \cdot 10^{-8}$
8.	Магний	923	923	9,2	0,4694	0,63281	$3,85 \cdot 10^4$	$1,64 \cdot 10^{-5}$	$2,7 \cdot 10^{-10}$	$4,4 \cdot 10^{-15}$
9.	Марганец	1517	1483	13,4	0,6427	0,77794	$3,84 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-8}$	$8,24 \cdot 10^{-12}$
10.	Медь	1356	1243	13,01	0,5310	0,68803	95,45	$7,1 \cdot 10^{-3}$	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$3,66 \cdot 10^{-7}$
11.	Молиб-	2890	2139	28	0,7966	0,88413	$7,7 \cdot 10^{-3}$	0,99128	0,98265	0,97409
12.	Никель	1726	1423	17,61	0,5267	0,68425	11,174	$5,7 \cdot 10^{-2}$	$3,3 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$
13.	Ниобий	2741	2338	26,8	0,9145	0,95422	$8,8 \cdot 10^{-4}$	0,99907	0,99721	0,99535
14.	Титан	1943	1913	18,8	0,7577	0,85894	1,3745	0,3845	$1,4 \cdot 10^{-1}$	$5 \cdot 10^{-2}$
15.	Хром	2130	1773	21	0,6608	0,79145	79,14	$9,9 \cdot 10^{-3}$	$9,8 \cdot 10^{-5}$	$9,7 \cdot 10^{-7}$

Тугоплавкие металлы VIA группы молибден и вольфрам имеют с гафнием ограниченные твердые раство-

ры. Очистка от этих примесей будет осуществляться только при многократном прохождении процесса зонной перекристаллизации, но все равно будет незначительной. Хром (VIA группа) характеризуется высоким давлением насыщенного пара при  $T=2500$  К, поэтому уменьшение содержания Cr будет происходить в процессе испарения.

Металлы IIА, VIIА, VIIIА, IB, IIIB групп периодической системы (магний, кальций, марганец, железо, никель, медь, алюминий) имеют высокое давление насыщенного пара при температуре плавления гафния и будут испаряться с различной степенью интенсивности при плавке.

Кремний (IVB группа) удаляется как в процессе испарения, так и при зонной перекристаллизации.

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАФИНИРОВАНИЯ ГАФНИЯ

Получение высокочистых образцов гафния проводили с использованием метода бестигельной зонной плавки в вакууме  $4 \times 10^{-4}$  Па с электронно-лучевым нагревом. К преимуществам такого вида ЗП можно отнести возможность проводить рафинирование образцов и выращивание монокристаллов тугоплавких металлов и сплавов с температурой плавления свыше  $2200$  К, отсутствие тигля, создание узкой области нагрева путем фокусирования пучка электронов, высокая удельная концентрация мощности. Подробное описание установки ЗП для рафинирования гафния и материалы некоторых исследований получаемых образцов приведены в более ранней работе авторов [12].

Процесс рафинирования Hf проводили в несколько этапов. В ходе первого этапа, включающего прогрев исходной заготовки йодидного гафния с целью обезгаживания и зонную плавку на высокой скорости (16 мм/мин и 8 мм/мин), получали образцы в виде стержней с круглым сечением диаметром  $\approx 8$  мм. Во второй части экспериментов проводили зонную перекристаллизацию Hf в несколько проходов на оптимальной скорости (2 мм/мин) (рис. 2,3).



Рис. 2. Исходная заготовка йодидного гафния



Рис. 3. Вид гафния после зонной плавки

При выполнении эксперимента требуется соблюдение следующих технологических условий: 1) обязательное проведение процесса в высоком вакууме из-за способности переходных металлов IVA группы адсорбировать газовые примеси (в наших экспериментах вакуумное давление в рабочей камере во время процесса поддерживалось на уровне  $4 \times 10^{-4}$  Па); 2) обеспечение стабильности процесса перекристаллизации с целью предотвращения возможного локального перегрева стержня и проплавления; 3) выдерживание расплавленной зоны без движения в нижней точке стержня в течение 10 минут.

После проведения рафинирования из полученных слитков гафния были вырезаны образцы, на которых провели исследование содержания примесей. Для определения примесного состава образцов гафния применялся метод лазерной масс-спектрометрии с регистрацией на фотопленку, для чего использовались лазерный масс-спектрометр высокого разрешения с двойной фокусировкой ЭМАЛ-2 и регистрирующий микрофотометр ИФО-451. Результаты анализа представлены в таблице 2.

По результатам проведенного химического анализа видно, что предварительные расчеты оказались, в основном, верными. Полностью подтвердились предположения о незначительном содержании в образцах Al, Ca, Si, Mg, Mn, Cu, Cr, Ti, которые испарились в результате проведения нескольких проходов зонной плавки.

Рафинирование от Fe и Ni происходит и в виде испарения, и также смещением этих примесей в концевую часть образца. После нескольких этапов ЗП на разных скоростях улучшения чистоты по W и Nb практически не наблюдается, что согласуется с расчетами [12,13].

Исследование процесса газовой выделения при зонной плавке показало, что испарение газовых примесей на различных этапах эксперимента происходит вследствие таких процессов: азот испаряется в виде молекул газа  $N_2$  при ЗП; углерод улетучивается в виде газовых молекул CO и  $CO_2$ ; водород полностью уходит на этапах предварительного прогрева и плавки на высокой скорости в виде газов  $H_2$  и  $H_2O$ ; некоторое уменьшение содержания кислорода происходит на этапах предварительного прогрева и при ЗП в результате образования газообразных молекул CO,  $CO_2$ ,  $H_2O$ , а также вследствие возможного образования испаряемых оксидов металлов (например, AlO,  $Al_2O$ ) и смещаемых к концевой части образца при перекристаллизации тугоплавких оксидов (например,  $HfO_2$ ,  $ZrO_2$  и др.).

Чистота полученных методом ЗП образцов гафния равнялась 99,81 - 99,88 мас. %. Измерения микротвердости образцов показали, что если у исходного йодидного гафния значение равнялось  $HV=2840$  МПа, то для зонноочищенного (после трех переплавов) значение HV изменялось в пределах от 1200 до 1400 МПа.

Таблица 2.

Результаты химического анализа исходного йодидного гафния и образцов после двух проходов ЗП на оптимальной скорости

№ п/п	Элемент	Исходный йодидный Hf	Квазистационарная часть образца после ЗП	Концевая часть образца после ЗП
		Содержание, мас. %	Содержание, мас. %	Содержание, мас. %
1	Гафний	99,58	99,81 - 99,88	99,6
2	Цирконий	0,23	0,065 - 0,12	0,15
3	Азот	0,003	0,0004	0,0008
4	Алюминий	0,003	<0,00001	<0,00001
5	Вольфрам	0,0002	0,0001 - 0,0002	0,00021
6	Железо	0,007	0,00004	0,008
7	Кальций	0,01	<0,000007	<0,000007
8	Кислород	0,03	0,021 - 0,023	0,024
9	Кремний	0,004	<0,00004	<0,00004
10	Магний	0,003	<0,000005	<0,000005
11	Марганец	0,0003	<0,00001	<0,00001
12	Медь	0,002	<0,00002	<0,00002
13	Молибден	0,06	0,005 - 0,02	0,07
14	Никель	0,01	0,0001 - 0,00015	0,001
15	Ниобий	0,006	0,004 - 0,005	0,006
16	Титан	0,003	0,0002	0,0002
17	Углерод	0,04	0,022 - 0,028	0,04
18	Хром	0,003	<0,00002	0,0002

### ВЫВОДЫ

Расчетами показана и экспериментально подтверждена эффективность применения зонной перекристаллизации с учетом испарения примесей для рафинирования гафния, как от металлических, так и газообразующих примесей. Разработана технологическая схема получения чистых образцов гафния методом зонной плавки. Получены образцы гафния чистотой 99,88 мас. %. Представленная методика позволяет получать образцы и проводить исследования с другими тугоплавкими и переходными металлами.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pfann V. Zonnaya plavka. – М.: Mir, 1970. – 366 s.
2. Belyaev A.I. Fiziko-khimicheskie osnovy ochistki metallov i poluprovodnikovykh materialov. – М.: Metallurgiya, 1973. – 224s.
3. Parr N. Zonnaya ochistka i ee tekhnika. – М.: Metallurgizdat, 1963. – 210s.
4. Burton J., Prim R., Slichter W. The Distribution of Solute in Crystals Grown from the Melt // J. Chem. Phys. – 1953. - Vol.21, №11. - P.1987-1991.
5. Bartel I., Burig E., Khain K., Kukharzh L. Kristallizatsiya iz rasplavov. – М.: Metallurgiya, 1987. – 320s.
6. Vigdorovich V.N. Ochistka metallov i poluprovodnikov kristallizatsiei. – М.: Metallurgiya, 1969. – 296s.
7. Lodiz R., Parker R. Rost monokristallov. – М.: Mir, 1974. – 540s.
8. Nesmeyanov A.N. Davlenie para khimicheskikh elementov. – М.: Izd-vo AN SSSR, 1961. – 396s.
9. Ratnikov D.G. Bestigel'naya zonnaya plavka. – М.: Metallurgiya, 1976. – 224s.
10. Peizulaev Sh.I. Uchet ispareniya primesei pri zonnoi plavke // Izv. AN SSSR. Ser. Neorg. Materialy. – 1967. – Т.3, № 9. – С.1523-1532.
11. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskikh sistem. Spravochnik: 1-4 t. Pod red. N.P. Lyakisheva. – М.: Mashinostroenie, 1996-2000.
12. V'yugov P.N., Kozhevnikov O.E., Rudycheva T.Yu. Poluchenie vysokochistykh obratsov gafniya metodom bestigel'noi zonnoi plavki // Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Seriya: Vakuum, chistye materialy, sverkhprovodniki. – 2009, № 6. - С.19-24.
13. Kozhevnikov O.E., V'yugov P.N., Pilipenko N.N., Tantsyura I.G. Rafinirovanie gafniya metodom zonnoi plavki // Materialy dokladov 2-i Mezhdunarodnoi konferentsii «Vysokochistye metally: poluchenie, primeneniya, svoist-va» (17-20 sentyabrya 2013 g.). Khar'kov: NNTs KhFTI. – 2013. – С.17.

УДК 534.2:534.6

## ОСОБЕННОСТИ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ГАФНИЯ

**П.И. Стоев, А.А. Васильев, К.В. Ковтун**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт*

*61108, Харьков, ул.в Академическая 1*

*e-mail: [kkovtun@kipt.kharkov.ua](mailto:kkovtun@kipt.kharkov.ua)*

*Received September 2, 2013*

Исследована акустическая эмиссия (АЭ) прокатанного гафния ГФЭ-1 при деформации растяжением в зависимости от направления вырезки образцов и режимов термообработки. Для неотожженных образцов с разным направлением вырезки АЭ гафния регистрируется только на стадиях, предшествующих разрушению. Ориентационный эффект на кривых активности АЭ проявляется только в различии величины деформации до начала резкого изменения активности. Ориентационный эффект у отожженных образцов проявляется в различной величине регистрируемых импульсов АЭ (после отжига при 1123К) и различной средней амплитуде импульса (после отжига при 1373К). После рекристаллизационных отжигов в материале сохраняется анизотропия механических свойств, характерная для гексагональных металлов, подвергнутых деформации, которая коррелирует с особенностями структуры материала и параметрами АЭ.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** акустическая эмиссия, гафний, механические свойства, термообработка

### THE FEATURES ACOUSTIC EMISSION DURING PLASTIC DEFORMATION OF HAFNIUM

**P.I. Stoev, A.A. Vasiliev, K.V. Kovtun**

*National Science center "KIPT"*

*Akademicheskaya Str. 1, 61108, Kharkov, Ukraine*

The dependence of the acoustic emission (AE) rolled hafnium HPE-1 under tensile strain on the direction investigated of cutting the samples and heat treatment. For unannealed samples with different directions clippings AE hafnium registered only at stages preceding the destruction. Orientation effect on the curves of the AE activity occurs only in the difference between the amount of deformation before the abrupt change in activity. Orientation effect in the annealed samples at high temperatures is shown in a different magnitude of pulses registered AE (after annealing at 1123K) and different average pulse amplitude (after annealing at 1373K). After recrystallization annealing of the material stored anisotropy of mechanical properties, typical of hexagonal metals subjected to strain, which correlates with the features formed by the material structure and the parameters of the active element.

**KEYWORDS:** acoustic emission, hafnium, mechanical properties, heat treatment

### ОСОБЛИВОСТІ АКУСТИЧНОЇ ЕМІСІЇ ПРИ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ ГАФНІЮ

**П.І. Стоєв, А.О. Васильєв, К.В. Ковтун**

*Національний Науковий Центр «ХФТІ»*

*61108, Академічна 1, Харків, Україна*

Досліджено залежність акустичної емісії (АЕ) прокатаного гафнію ГФЕ-1 при деформації розтягом в залежності від напрямку вирізки зразків і режимів термообробки. Для невідпалених зразків з різним напрямом вирізки АЕ гафнію реєструється тільки на стадіях, передуючих руйнуванню. Орієнтаційний ефект на кривих активності АЕ проявляється тільки в розходженні величини деформації до початку різкої зміни активності. Орієнтаційний ефект у відпалених при високих температурах зразках проявляється в різній величині реєстрованих імпульсів АЕ (після відпалу при 1123К) і різної середньої амплітуди імпульсу (після відпалу при 1373К). Після рекристалізаційних відпалів в матеріалі зберігається анізотропія механічних властивостей, характерна для гексагональних металів, підданих деформації, яка корелює з особливостями структури матеріалу і параметрами АЕ.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** акустична емісія, гафній, механічні властивості, термообробка

Благодаря уникальному сочетанию физико-механических свойств - высокой прочности, коррозионной стойкости, высокому поперечному сечению захвата нейтронов, хорошей пластичности гафний является перспективным конструкционным материалом ядерной энергетики [1,2]. Жесткие условия эксплуатации гафния в устройствах атомной техники предъявляют высокие требования к уровню его механических свойств. Одним из основных способов их повышения является формирование в материале определенного структурного состояния, которое создается различными методами механико-термической обработки [3]. В процессе этих обработок в материале возникает геометрическая направленность зерен и субзерен и ориентированные микронапряжения, которые в значительной мере определяют особенности пластической деформации и механические свойства металла. Для оптимизации процессов получения заготовок и изделий необходимо понимание механизмов пластической деформации и разрушения. Одним из перспективных методов анализа пластической деформации является метод акустической эмиссии [4-6]. В настоящее время для многих конструкционных материалов изучено влияния структурных факторов и условий испытаний на особенности пластической деформации с использованием метода акустической эмиссии. Однако для металлов с ГПУ кристаллографической решеткой, к которым относится гафний, и в которых при деформации развивается текстура, количество исследований

акустической эмиссии в процессе деформирования ограничено. Влияние ориентационных эффектов на акустическую эмиссию при деформации циркония приведено в работе [7], а для образцов из листов коммерческих магниевых сплавов в [8]. Влияние механизмов пластической деформации на акустическую эмиссию цинка описано в [9], а пластическая деформация титана и сплава Ti-6Al-4V изучена с помощью акустической эмиссии в работах [10-12]. Впервые данные по акустической эмиссии гафния при деформации растяжением представлены авторами в [13], а данная работа является развитием этих исследований.

Целью работы является изучение АЭ в процессе деформирования растяжением образцов листового гафния, вырезанных в различных направлениях относительно направления прокатки, в исходном состоянии и после отжига при температурах 973-1373 К.

### МАТЕРИАЛ И МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЙ

В качестве материала для исследований использовали гафний ГФЭ-1, полученный методом кальцийтермического восстановления. Первоначальные слитки металла получали электроннолучевой плавкой, которые затем подвергали горячей ковке и прокатке в полосу. Прокатанную полосу толщиной 5 мм отжигали в вакууме, а затем повторно прокатывали при температуре 673 К до получения листа толщиной 2,2 мм (общая деформация при этом составляла 54 %). Методом электроискровой резки из листа вырезали образцы для испытаний на растяжение. Образцы в рабочей части имели сечение 2,2×4 мм, длину 27 мм и были вырезаны продольно, перпендикулярно и под углом 45° к направлению прокатки. Для получения различного структурного состояния образцы отжигали в вакууме (10<sup>-5</sup> мм.рт.ст.) при температуре 973 К – 1 час, 1123 К – 1 час и 1373 К – 5 часов. Макроструктуру и текстуру образцов деформированного и отожженного гафния контролировали оптическими и рентгеновскими методами.

Испытания образцов гафния на растяжение проводили при комнатной температуре на универсальной испытательной машине 1958 У10-1 по стандартной методике со скоростью деформации 1×10<sup>-3</sup>сек<sup>-1</sup>. При растяжении образцов синхронно регистрировали параметры деформирования и акустической эмиссии. Для регистрации акустической эмиссии использовали многоканальный акустический комплекс М 400, который позволял разделять записываемые сигналы АЭ по 8 амплитудным уровням (каналам). В качестве датчика АЭ использовали пьезокерамический преобразователь из керамики ЦТС-19 с резонансной частотой 180 кГц. Для обеспечения надежного акустического и механического контакта, датчик крепился к исследуемому образцу через слой смазки специальным держателем, который обеспечивал одинаковое усилие прижатия. Сбор, обработка, анализ результатов, включающих информацию об акустической эмиссии и информацию о параметрах деформирования, проводили с помощью ЭВМ.

Для оценки среднего энергетического вклада одного сигнала в любой момент времени испытания рассчитывали среднюю амплитуду импульса АЭ. Методика расчета этого параметра приведена в работе [11].

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1-7 приведены зависимости активности АЭ, общей суммы зарегистрированных импульсов и средней амплитуды импульса АЭ от деформации для образцов гафния, вырезанных вдоль, поперек и под углом 45° к направлению прокатки, в деформированном состоянии и после отжига при температурах 1123 и 1373 К. В таблице представлены значения механических характеристик для образцов гафния вырезанных вдоль, поперек и под углом 45° к направлению прокатки в деформированном и отожженном (рекристаллизованном) состояниях. Анализ результатов, приведенных в таблице, показывает, что как в деформированном, так и в отожженном состоянии для образцов гафния характерна анизотропия механических свойств. Так, все испытанные образцы гафния имели более высокую прочность на разрыв в продольном направлении по сравнению с поперечными и, вырезанными под углом 45°, образцами. Предел текучести выше у образцов, вырезанных поперек направления прокатки. С увеличением температуры отжига разница в абсолютных значениях предела прочности уменьшается, а у предела текучести – растет. Удлинение в исходном и отожженном состоянии всегда выше у продольных образцов. Аналогичный характер анизотропии механических свойств гафния наблюдали и ранее [14].

Рассмотрим особенности механических и акустических характеристик гафния в исходном состоянии и после термообработок. В исходном состоянии образцы гафния с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки обладают высокой прочностью и небольшим относительным удлинением (максимальное удлинение ~ 8 % у образцов, вырезанных вдоль направления прокатки). Активность АЭ в течение всего процесса растяжения этих образцов очень низкая и начинает увеличиваться только на стадии разрушения образца, вероятно из-за образования и распространения трещин (рис.1). Также в процессе деформации не отожженных образцов изменяется и общая сумма регистрируемых импульсов АЭ (рис.2).

Отжиг при 973 К в течение 1 часа приводит к снижению пределов прочности и текучести испытанных образцов гафния и росту их удлинения. Зависимость активности АЭ от деформации у отожженных при 973 К образцов гафния с различной ориентацией вырезки имеет такой же вид, как и у образцов исходного прокатанного материала: низкие абсолютные значения активности АЭ в течение всего процесса растяжения и резкий ее рост в области предразрушающих нагрузок. Ориентационный эффект на кривых активности АЭ у исходных и отожженных при 973 К образцов гафния с различной ориентацией вырезки проявляется только в различии

величины деформации до начала резкого изменения активности.

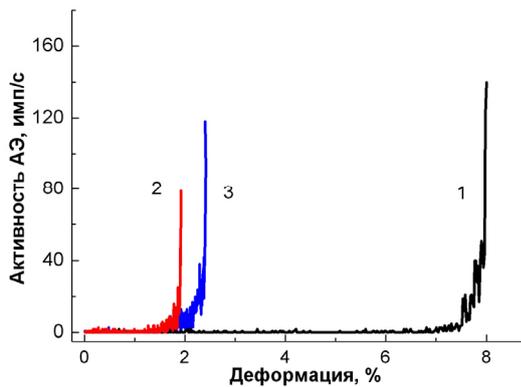


Рис. 1. Зависимость активности АЭ от деформации для образцов гафния в исходном состоянии для различного направления вырезки относительно направления прокатки:

1 - для образца, вырезанного вдоль направления прокатки; 2 - перпендикулярно направлению; 3 - под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки

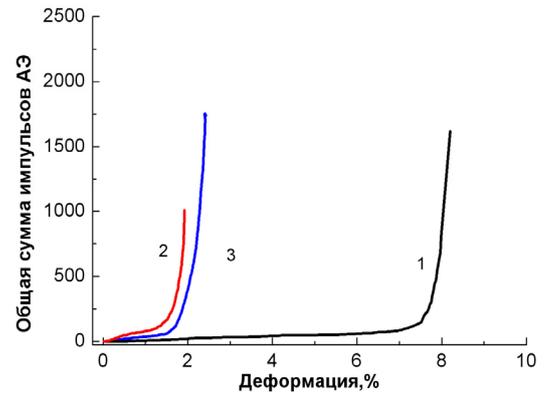


Рис. 2. Зависимость общей суммы импульсов АЭ от деформации для образцов гафния в исходном состоянии для различного направления вырезки относительно направления прокатки

1 - для образца, вырезанного вдоль направления прокатки; 2 - перпендикулярно направлению; 3 - под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки

Таблица

Механические свойства образцов листового гафния, с различной ориентацией вырезки после прокатки и отжигов при температурах 973 К, 1123 К и 1373 К

Направление вырезки образцов	$\sigma_b$ , МПа				$\sigma_T$ , МПа				$\epsilon$ , %			
	прокат исход.	отж 973К	отж 1123К	отж 1373К	прокат исход.	отж 973К	отж 1123К	отж 1373К	прокат исход.	отж 973К	отж 1123К	отж 1373К
Вдоль направления прокатки	767,0	640,6	561,4	509,5	679,0	498,0	235,3	154,8	7,95	19,0	35,18	9,26
Поперек направления прокатки	758,0	637,4	553,6	484,0	708,0	538,4	345,0	271,0	1,85	5,0	13,7	4,82
Под углом $45^\circ$ к направлению прокатки	731,5	---	537,8	327,7	687,0	---	291,5	245,7	2,4	---	25,5	2,03

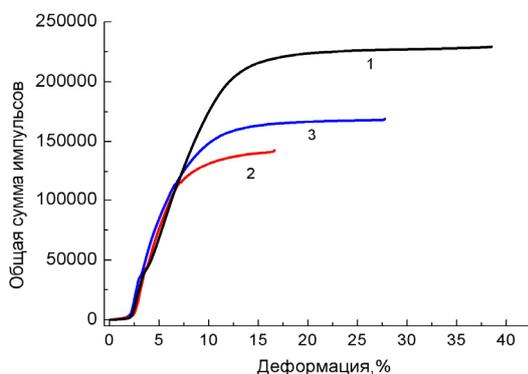


Рис. 3. Зависимость общей суммы импульсов АЭ от деформации для образцов гафния, отожженных при температуре 1123 К в течение 1 часа с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки

1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2-перпендикулярно направлению; 3- под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки

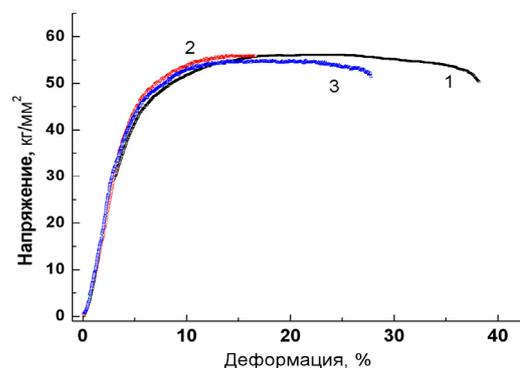


Рис. 4. Кривые деформации для образцов гафния, отожженных при температуре 1123 К в течение 1 часа с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки

1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2-перпендикулярно направлению; 3- под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки

Низкие абсолютные значения активности АЭ у исходных и отожженных при 973К образцов гафния и ее рост при высоких значениях приложенных напряжений (в области разрушения), по нашему мнению, связан с особенностью структуры, которая формируется в листах гафния в процессе предварительной механико-термической обработки и последующих отжигах, и проявлением эффекта Кайзера (отсутствие генерации сигналов АЭ до момента достижения повторной нагрузки максимального значения первого нагружения) [15]. В нашем случае эффект Кайзера связан с тем, что первичное нагружение в материале создается при деформации в процессе прокатки гафния. Поэтому отсутствие сигналов АЭ у исходных образцов гафния при растяжении свидетельствует о том, что в течение всего процесса растяжения абсолютные значения внешней нагрузки, которая прикладывается к материалу, не превосходит уровень нагрузки, заданный прокаткой. Наблюдаемое увеличение активности АЭ перед разрушением, по нашему мнению, вызвано появлением новых источников генерации сигналов АЭ в материале, которые связаны с началом процессов трещинообразования и распространения трещин.

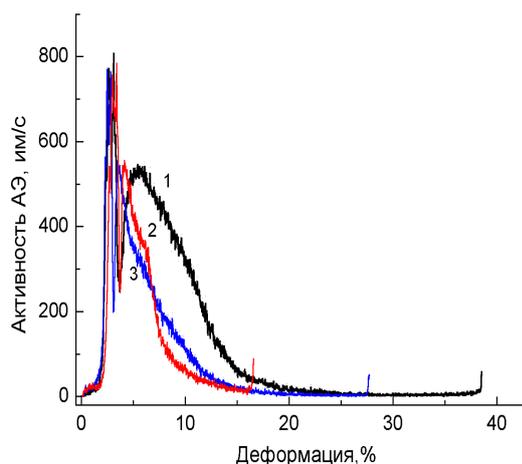


Рис. 5. Зависимость активности АЭ от деформации для образцов гафния отожженных при температуре 1123 К в течение 1 часа с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки листа  
1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2 - перпендикулярно направлению; 3- под углом 45° к направлению прокатки

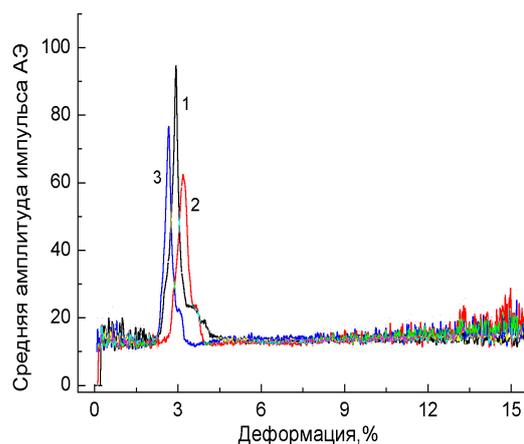


Рис. 6. Зависимость средней амплитуды импульса АЭ от деформации для образцов гафния, отожженных при температуре 1123 К в течение 1 часа с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки листа  
1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2 - перпендикулярно направлению; 3- под углом 45° к направлению прокатки

Выполненные ранее исследования структуры [13] показали, что для образцов гафния в состоянии после прокатки характерна структура, состоящая из сплетенных дислокаций, плотность которых составляет  $1 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ . Отжиг деформированного гафния при 973К приводит к образованию ячеистой структуры с размером ячеек  $\sim 0,3 \text{ мкм}$ , при этом плотность дислокаций уменьшается. Из анализа электронограмм и полюсных фигур, установлено, что угловая разориентировка между возникающими блоками очень мала (несколько градусов) и ориентация плоскости базиса ГПУ решетки гафния близка к плоскости прокатки листа. Пластическая деформация, при растяжении таких образцов, осуществляется за счет скольжения внутри сформировавшихся ячеек ( $\sim 300\text{-}500 \text{ нм}$ ). Малые пути скольжения не приводят к большим смещениям в кристаллической решетке и не сопровождаются существенной АЭ. В этом случае, деформация материала сопровождается генерацией сигналов АЭ низкой амплитуды, которая ниже порога чувствительности регистрирующей аппаратуры. Подобное явление наблюдается в материалах с мелкозернистой структурой при исследовании процессов сверхпластической деформации [16].

Отжиг предварительно прокатанного гафния при температурах выше 1023 К приводит к собирательной рекристаллизации. Размер зерен у образцов гафния увеличивается с повышением температуры отжига. Так, после отжига при 1123 К в течение 1 часа и 1373 К 5 часов средний размер зерен составляет  $\sim 11 \text{ мкм}$  и  $35 \text{ мкм}$  соответственно. Структура рекристаллизованных образцов гафния характеризуется низкой плотностью дислокаций внутри зерен  $\sim 10^8 \text{ см}^{-2}$  и наличием выделений по границам и внутри зерен.

Особенность кривых активности АЭ для образцов различной ориентации отожженных при температуре 1123 и 1375 К (рис. 5 и рис. 7) проявляется в том, что акустические сигналы начинают регистрироваться уже на стадии упругой деформации. В области напряжений до предела текучести скорость нарастания активности АЭ более высокая у продольных образцов, чуть меньше у поперечных и еще ниже у образцов, вырезанных под углом 45°. Это свидетельствует о том, что в изучаемом материале процессы пластической деформации начинаются при напряжениях ниже предела текучести. В материале имеются зерна, наиболее благоприятно ориентированные для процесса скольжения дислокаций, и деформация в них начинается при более низких напряжениях, чем предел

текучести всего поликристаллического объема. Подобные процессы наблюдаются и в других металлах со сформированной структурой зерен [12].

С увеличением деформации активность АЭ у образцов гафния различной ориентации резко возрастает и достигает наибольшего значения в области напряжений соответствующих пределу текучести и точки излома на кривой растяжения (рис. 9).

Необходимо отметить очень важную особенность, которая наблюдается в момент достижения напряжений, соответствующих пределу текучести: необычно высокий темп роста активности сигналов АЭ всех амплитуд. Дальнейшая деформация образцов приводит к резкому снижению активности АЭ в области пластической деформации из-за уменьшения источников генерации сигналов АЭ (плотности подвижных дислокаций) (рис. 5). У образцов гафния отожженных при 1123 К течение 1 часа значения активности АЭ в пластической области остаются достаточно низкими вплоть до разрушения образца.

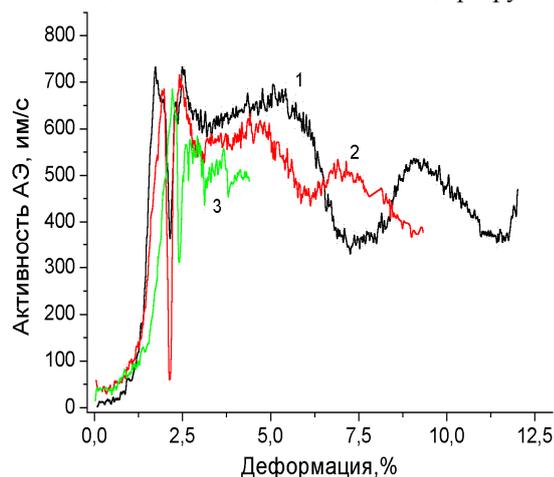


Рис. 7. Зависимость активности АЭ от деформации для образцов гафния, отожженных при температуре 1373 К в течение 5 часов с различной ориентацией относительно направления прокатки листа 1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2-перпендикулярно направлению; 3- под углом 45° к оси прокатки.

АЭ от степени деформации (рис. 6,10).

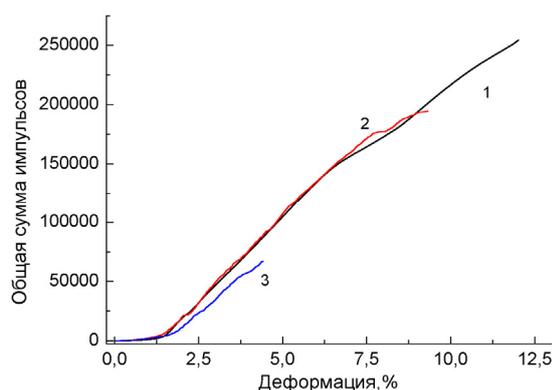


Рис. 8. Зависимость общей суммы зарегистрированных импульсов АЭ от деформации для отожженных при температуре 1373 К течение 5 часов образцов гафния с различной ориентацией относительно направления прокатки

1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2 - перпендикулярно направлению; 3- под углом 45° к направлению прокатки

Так, рис. 3 хорошо иллюстрирует существенное различие в динамике накопления суммы импульсов АЭ в области пластического деформирования у образцов с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки, отожженных при температуре 1123 К.

На стадии пластического деформирования характер изменения и абсолютные значения  $A_{cp}$  у продольных и

После отжигов при 1373 К на зависимости активности АЭ от деформации появляется максимум в области 10, 5 и 3 % деформации для продольных, поперечных и вырезанных под углом 45° образцов, соответственно (рис. 7). Появление такого максимума, может быть связано либо с началом процесса скольжения дислокаций по вторичным системам скольжения (базисным), либо с тем, что имеющиеся в материале атомы примесей закрепляют некоторую часть дислокаций. При достижении определенного уровня напряжений, дислокации отрываются от точек закрепления, увеличивая при этом количество подвижных дислокаций и, соответственно, число регистрируемых сигналов АЭ. Также следует отметить, что абсолютные величины активности вторых пиков АЭ приблизительно одинаковы для образцов всех ориентаций. На заключительной стадии деформирования (перед разрушением) у рекристаллизованных образцов гафния не наблюдается резкого увеличения активности АЭ, в отличие от неотожженных образцов (рис. 1).

Для образцов гафния, испытанных после высокотемпературных отжигов, влияние ориентационного фактора проявляется и на зависимостях общей суммы импульсов АЭ (рис. 3, 8) и средней амплитуды импульса

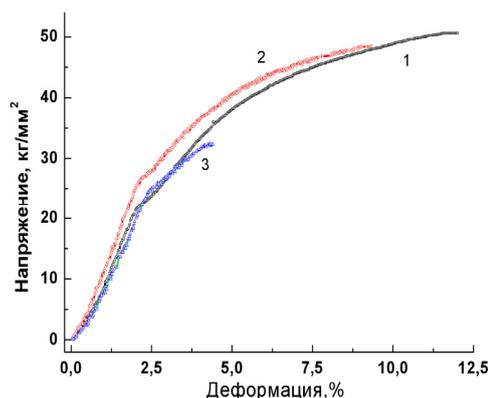


Рис. 9. Кривые деформации для отожженных при температуре 1373 К течение 5 часов образцов гафния с различной ориентацией относительно направления прокатки

1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2 - перпендикулярно направлению; 3- под углом 45° к направлению прокатки

поперечных образцов аналогичен, а у образцов, вырезанных под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки, на этой стадии абсолютные величины приблизительно в 1,5 раза выше. Для определения доминирующего механизма деформации при растяжении образцов гафния с различной структурой и ориентацией, дополнительно к анализу полученных зависимостей средней амплитуды импульса АЭ в процессе испытаний, был проведен анализ амплитудного распределения сигналов АЭ. Комплекс АЭ М400 дает возможность получать амплитудное распределение в любой момент проведения испытания или в течение выбранного интервала времени. Амплитудный анализ позволяет установить вклад сигналов различной амплитуды в спектр АЭ и характер их изменения на всех этапах деформирования материала.

Из рис. 6 видно, что для образцов гафния, отожженных при температуре 1123 К, зависимость средней амплитуды импульсов  $A_{cp}$  от деформации практически одинакова для всех направлений вырезки на всех стадиях деформирования материала. Это может быть свидетельством того, что механизмы, которые контролируют деформацию материала, в данном структурном состоянии, по различным направлениям относительно направления прокатки одни и те же. У образцов гафния отожженных при температуре 1373 К (рис. 10) характер изменения средней амплитуды импульса АЭ в области напряжений ниже предела текучести у образцов различной ориентацией имеет одинаковую тенденцию.

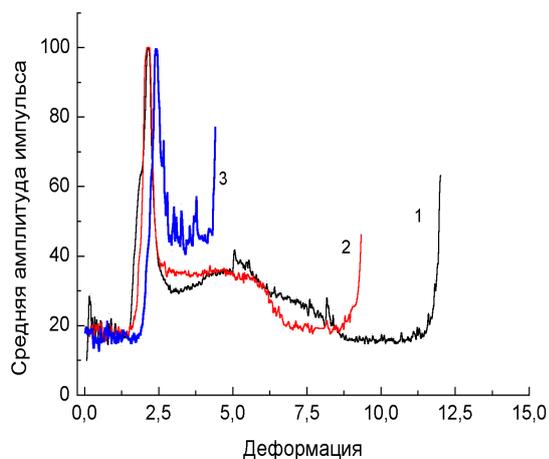


Рис. 10. Зависимость средней амплитуды импульса АЭ от деформации для отожженных при температуре 1373 К в течение 5 часов образцов гафния с различной ориентацией вырезки относительно направления прокатки: 1 - для образца вырезанного вдоль направления прокатки; 2-перпендикулярно направлению; 3- под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки

показал, что в общей сумме регистрируемой АЭ доминируют сигналы низких амплитуд и активность низкоамплитудных источников сигналов АЭ практически не изменилась в процессе растяжения по сравнению с образцами, которые отжигались при 1123 К (рис. 11а,б,в). Однако, следует отметить, что количество высокоамплитудных сигналов в спектре АЭ у образцов отожженных при температуре 1373 К заметно увеличилось: у продольных и поперечных в 5-7 раз, у образцов с ориентацией  $45^\circ$  в 10-15 раз. Тенденция регистрации большего числа высокоамплитудных сигналов АЭ в образцах с ориентацией  $45^\circ$  к направлению прокатки после отжига 1123 К сохраняется и для образцов отожженных при 1373 К.

Поэтому, можно предположить, что в деформации материала в данном структурном состоянии в отличии от исходных образцов, вероятно, принимают участие два механизма: дислокационное скольжение и двойникование. Доминирующим механизмом является дислокационное скольжение, которое и дает больший вклад в общую сумму регистрируемых импульсов АЭ. В тоже время увеличение количества высокоамплитудных сигналов в спектре регистрируемых сигналов АЭ может быть вызвано увеличением размера зерен в процессе высокотемпературной обработки (рекристаллизационного отжига).

Все особенности изменения кривых зависимостей активности АЭ в процессе растяжения образцов гафния различной ориентации относительно направления прокатки листа взаимосвязаны с параметрами скольжения (количеством работающих систем скольжения, числом благоприятно ориентированных кристаллов, субструктурой материала), которые определяют сопротивление деформированию.

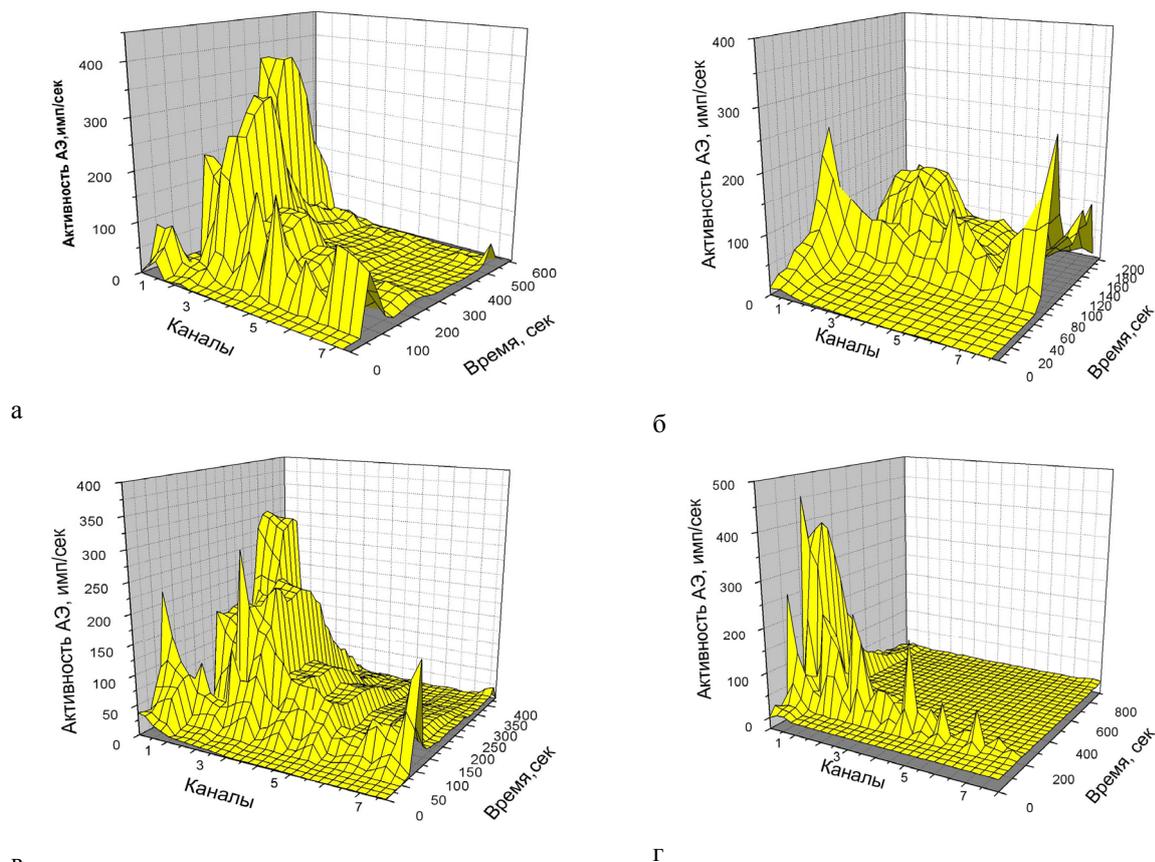
Как показали результаты исследований механических, структурных и акустических параметров отжига при различной температуре и разной продолжительности привели к существенному изменению макро- и микроструктуры материала, уменьшению внутренних микронапряжений, ослаблению деформационной текстуры. Однако примененной термообработкой полностью устранить влияние кристаллографической текстуры не удалось. Так, рекристаллизованные при температуре 1373К в течение 5 часов образцы гафния при испытаниях на

На рис. 11 приведены трехмерные графики «активность АЭ - амплитудный канал - время деформирования». Анализ этих графиков позволяет проследить изменение во времени активности АЭ для импульсов каждого из восьми регистрируемых амплитудных уровней. По доминирующему вкладу амплитуды сигнала АЭ в интегральной величине сигнала АЭ можно высказать предположения о механизме пластической деформации материала. При растяжении образцов гафния в области напряжений выше предела текучести постоянно регистрируется небольшое количество высокоамплитудных сигналов АЭ (3-5 импульсов в секунду). По абсолютному количеству высокоамплитудных сигналов АЭ их несколько больше наблюдается в образцах с ориентацией  $45^\circ$  к направлению прокатки.

В спектре амплитудного распределения сигналов АЭ деформируемых образцов в этих состояниях существенно преобладают сигналы АЭ низких амплитуд, которые и дают основной вклад в спектр сигналов АЭ (рис. 11г).

Анализ амплитудного распределения сигналов АЭ образцов гафния, которые были отожжены при 1373К

растяжение продолжали показывать анизотропию прочностных и пластических характеристик.



а

б

в

г

Рис. 11. Зависимость активности и амплитуды по каналам АЭ от времени деформирования для образцов с различной ориентацией, отожженных при температуре 1123 и 1373К

а) - вдоль направления прокатки,  $T_{отж} - 1373\text{K}$ , б) - под углом  $45^\circ$ ,  $T_{отж} - 1373\text{K}$ , в) - поперек направления прокатки,  $T_{отж} - 1373\text{K}$ , г) - поперек направления прокатки,  $T_{отж} - 1123\text{K}$

## ВЫВОДЫ

1. Изучена акустическая эмиссия прокатанного гафния ГФЭ-1 в процессе механических испытаний на растяжение в зависимости от структурного состояния материала и направления вырезки образцов относительно направления прокатки.

2. У образцов гафния с нерекристаллизованной структурой при деформировании растяжением практически отсутствует генерация сигналов АЭ, поэтому активность АЭ и общая сумма регистрируемых импульсов имеют низкие абсолютные значения. Ориентационный эффект на кривых активности АЭ для исходных образцов гафния с различной ориентацией вырезки проявляется только в различии величин деформации до начала резкого изменения активности.

3. Ориентационный эффект у отожженных при высоких температурах образцов проявляется в различной величине регистрируемых импульсов АЭ (после отжига при 1123К) и различной средней амплитуде импульса (после отжига при 1373К) на стадии их пластического деформирования, а также в различии величины деформации до разрушения.

4. У образцов гафния со сформированной структурой зерен в результате отжига для всех ориентаций генерация сигналов АЭ начинается в упругой области. При достижении напряжений, соответствующих пределу текучести у всех образцов наблюдается необычно высокий темп роста активности АЭ и увеличивается доля сигналов высокой амплитуды в суммарном спектре регистрируемой АЭ.

5. Проведенные термообработки приводят к существенному изменению макро- и микроструктуры материала, уменьшению внутренних микронапряжений, ослаблению деформационной текстуры, но при этом анизотропия механических свойств у листов гафния не исчезает из-за сохранения кристаллографической текстуры.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Azhazha V.M., Kovtun K.V., Starolat M.P. Gafnii v atomnoi energetike: Obzor. - Khar'kov: NNTs KhFTI, 2004. - 70s.
2. Neklyudov I.M., Azhazha V.M., Kovtun K.V., Vasil'ev A.A., Azhazha R.V., Starolat M.P., Stetsenko S.P., Lindt K.A., Bolkov A.F., Popov V.I., Mochalov Yu.V. Podgotovka proizvodstva konstruktsionnykh materialov iz gafniya // Nauka ta innovatsii. -

2009. - T. 5, № 2. - S. 23–31.
3. Cerreta E., Yablinsky C.A., Gray G.T., Vogel S.C., Brown D.W. The influence of grain size and texture on the mechanical response of high purity hafnium // *Materials Science and Engineering*. – 2007. – Vol. A456. – R. 243–251.
  4. Yudin A.A., Ivanov V.I. Akusticheskaya emissiya pri plasticheskoi deformatsii metallov (obzor) // *Problemy prochnosti*. – 1985. - №6. – S.92-107.
  5. Skal'skii V.R., Andreikiv O.C., Sergienko O.M. Doslidzhennya plastichnogo deformuvannya materialiv metodom akustichnoi emisii. (Oglyad) // *Fiziko-khimichna mekhanika meterialiv*. – 2003. - №1. – S.77-94.
  6. Perspektivnye materialy. Struktura i metody issledovaniya. Glava 12. Primenenie metoda akusticheskoi emissii v fizicheskom materialovedenii // S.417-456. Ucheb. Posobie. Pod red.Mersona D.L. TGU, MISiS, 2006. – 536s.
  7. Stoev P.I., Papirov I.I. Issledovaniya akusticheskikh spektrov tsirkoniya // *VANT. Seriya «Fizika radiatsionnykh povrezhdenii i radiatsionnoe materialovedenie»*. – 1997. – Vyp.1–2 (65–66). – S. 135–139.
  8. Bohlen J. et al. Orientation effects on acoustic emission during tensile deformation of hot rolled magnesium alloy AZ31 // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2004. – Vol.378. – R. 207–213.
  9. Melekhin V.P., Mints R.I., Krugler A.M. Vliyanie mekhanizmov plasticheskoi deformatsii tsinka na akusticheskuyu emissiyu // *Izvestiya vuzov. Tsvetnye metally*. – 1971. - № 1. – S.128-131
  10. Tanaka H., Horiuchi R. Acoustic emission due to deformation twinning in titanium and Ti-6Al-4V alloy // *Scripta Metallurgica*. - 1975. – Vol.9. – P. 777-780.
  11. Stoev P.I., Papirov I.I. Akusticheskaya emissiya titana v protsesse deformatsii // *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. “Vakuum, chistye materialy, sverkhprovodniki”*. – 2007. - №4. – S. 184-191.
  12. Stoev P.I., Papirov I.I. Vliyanie uslovii termicheskoi obrabotki na akusticheskuyu emissiyu listovogo titana // *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki, Seriya: Vakuum, chistye materialy, sverkhprovodniki*. – 2007. - № 4. – S.119 - 127.
  13. Stoev P.I., Starolat M.P., Vasil'ev A.A., Khovrich S.V., Kovtun K.V. Akusticheskaya emissiya gafniya pri deformatsii rastyazheniem // *Problemy prochnosti*. – 2011. - №2. – S.160-168.
  14. Starolat M.P., Vasil'ev A.A., Stetsenko S.P., Azhazha R.V., Kovtun K.V. Vliyanie otzhiga na svoistva i strukturu deformirovannogo gafniya // *The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”*. – 2010. - №899. – Iss.2(46). - S.83-86.
  15. Keiser J. Untersuchung uber das Auftreter Gerausher beim Zugversuch, Ph.D Thesis. Munich, Germany: Technische Hochschule Munchen. – 1950, 123 p.
  16. Papirov I.I., Karpov E.S., Palatnik M.I., Mileshekin M.B. Ischeznoenie akusticheskoi emissii pri sverkhplasticheskoi deformatsii Zn-0,4%Al i Sn-38%Pb // *Fizika metallov i metallovedenie*. – 1982. – T.54, Vyp.3. – S.581-586.

УДК 669.054;539.1.074

## АНАЛИЗ ДИАГРАММ СОСТОЯНИЯ ДВОЙНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ В ОБЛАСТИ НИЗКИХ КОНЦЕНТРАЦИЙ КОМПОНЕНТОВ

**А.П. Щербань, О.А. Даценко**

*Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"*

*ул. Академическая 1, г. Харьков, 61108, Украина*

*E-mail: [shcherban@kipt.kharkov.ua](mailto:shcherban@kipt.kharkov.ua)*

Received October 11, 2013

Предложен расчетный метод графического представления диаграмм состояния двойных металлических систем в области низких концентраций примесей (<0,1 ат. %) для систем с неограниченной и ограниченной растворимостью второго компонента. Для систем с неустановленной или предельно низкой растворимостью примесных элементов разработан алгоритм построения и анализа диаграмм состояния в области низких концентраций примесных элементов. Приведены результаты исследования двойных систем основа-примесь для кадмия, цинка и теллура в области низких концентраций свинца, сурьмы и магния.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** металлы, диаграммы состояния, растворимость, коэффициенты распределения, температурный интервал кристаллизации (плавления)

## ANALYSIS OF THE PHASE DIAGRAMS OF BINARY METALLIC SYSTEMS AT LOW CONCENTRATIONS OF THE COMPONENTS

**A.P. Shcherban', O.A. Datsenko**

*National Scientific Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"*

*1, Akademicheskaya st., Kharkov 61108, Ukraine*

The computational approach to graphical representation of the phase binary metallic diagrams at low impurities concentrations (<0.1 at. %) for systems with unlimited and limited solubility of the second component was considered. The algorithm for design and analysis of phase diagrams at the low concentration of impurity elements for systems with unidentified or negligibly low solubility of impurity elements has been developed. The investigations results of binary systems of base-admixture for cadmium, zinc and tellurium at low concentrations of lead, antimony and magnesium have been submitted.

**KEY WORDS:** metals, phase diagrams, solubility, distribution coefficients, a temperature range of crystallization (melting)

## АНАЛІЗ ДІАГРАМ СТАНУ ПОДВІЙНИХ МЕТАЛІЧНИХ СИСТЕМ В ОБЛАСТІ НИЗЬКИХ КОНЦЕНТРАЦІЙ КОМПОНЕНТІВ

**О.П. Щербань, О.А. Даценко**

*Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"*

*вул. Академічна 1, м. Харків, 61108, Україна*

Розглянуто розрахунковий підхід графічного представлення діаграм стану подвійних металічних систем в області низьких концентрацій домішок (<0,1 ат. %) для систем з необмеженою і граничною розчинністю другого компонента. Для систем з невстановленою або незначно низькою розчинністю домішкових елементів розроблений алгоритм побудови і аналізу діаграм стану в області низьких концентрацій домішкових елементів. Приведені результати дослідження подвійних систем основа-домішка для кадмію, цинку і телуру в області низьких концентрацій свинцю, сурми і магнію.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** метали, діаграми стану, розчинність, коефіцієнти розподілення, температурний інтервал кристалізації (плавлення)

Анализ известных диаграмм состояния (ДС) бинарных металлических систем [1,2] показывает, что в большинстве случаев системы образуют со стороны основного компонента эвтектику или перитектику как на основе чистых элементов, так и твердых растворов, а также эвтектику на основе чистого компонента или раствора на его основе с химическим соединением.

Сплавы-смеси, состоящие из жидкой и твердой фаз, должны представлять твердые растворы или химические соединения во взаимном сочетании, однако как предельный случай можно допустить в качестве фаз, входящих в сплав-смесь, и чистые компоненты (элементы), если каждый из них в твердом состоянии не образует твердого раствора. Как известно, случаев полной нерастворимости элементов друг в друге не существует в природе и потому чистые компоненты в сплаве маловероятны и могут быть приняты условно в тех случаях, когда растворимость другого компонента в них ничтожно мала. Для большинства бинарных систем взаимная растворимость компонентов в твердом состоянии до сих пор или совсем не изучена, или изучена в ограниченной области концентраций [1,2]. Например, к таким системам относятся отдельные двойные системы кадмия, цинка и бинарные системы теллура практически со всеми элементами периодической системы. В некоторых двойных системах (Zn-Mg, Zn-Sn, Cd-Pb, Cd-Sn, Te-Pb, Te-Sb и др.) установленные области твердых растворов настолько узкие (< 1 ат. %), что точное экспериментальное определение интервала кристаллизации (плавления) твердого раствора не представляется возможным (отсутствие линии солидуса на ДС) [1,2].

Информация о поведении второго компонента при низком его содержании в основе представляет интерес с точки зрения разработки методов глубокой очистки металлов или равномерного распределения второго элемента при формировании сплавов для обеспечения однородности электрофизических, механических и других физических свойств материалов.

Одним из примеров использования расчетных данных влияния низкой (< 0,1 ат. %) концентрации примеси на температуру плавления металла может быть компьютерное моделирование возникновения концентрационного переохлаждения на фронте кристаллизации при низком содержании примеси [3–5]. Известно, что эффективность кристаллизационной очистки металлов в значительной мере зависит от морфологии фронта кристаллизации.

Переход от плоского фронта кристаллизации к ячеистой и дендритной морфологии вызывает резкое изменение эффективного коэффициента распределения до значений близких к единице, что приводит к существенному снижению эффективности очистки при направленной кристаллизации. Чалмерс и др. [3,4] теоретически предсказали, что переход макроскопически гладкой морфологии межфазной границы раздела к ячеистой структуре происходит при определенном критическом отношении температурного градиента  $G_L$  в жидкости на межфазовой границе раздела к скорости кристаллизации  $R_{кр}$ . В определение отношения  $G_L/R_{кр}$  входит величина градиента температуры на линии ликвидуса (тангенса угла наклона равновесной линии ликвидуса при низкой концентрации второго компонента,  $m = q_{LB}$ , см. (3)) и значение равновесного коэффициента распределения примесного элемента  $k_{0B}$ , переходящее при низком значении второго компонента в его предельное значение  $k_{0\lim B}$ . Вычисление этих параметров позволяет выполнять описанный в этой работе подход к анализу ДС.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В обычном представлении ДС нельзя получить соотношения между температурой и концентрацией в области низких [1,2] концентраций примеси (области сверхчистых веществ). На рис. 1 схематично представлены диаграммы состояния систем А-В с ограниченной (а), неограниченной (б) и с неуставленной или ничтожно малой растворимостью компонентов (в).

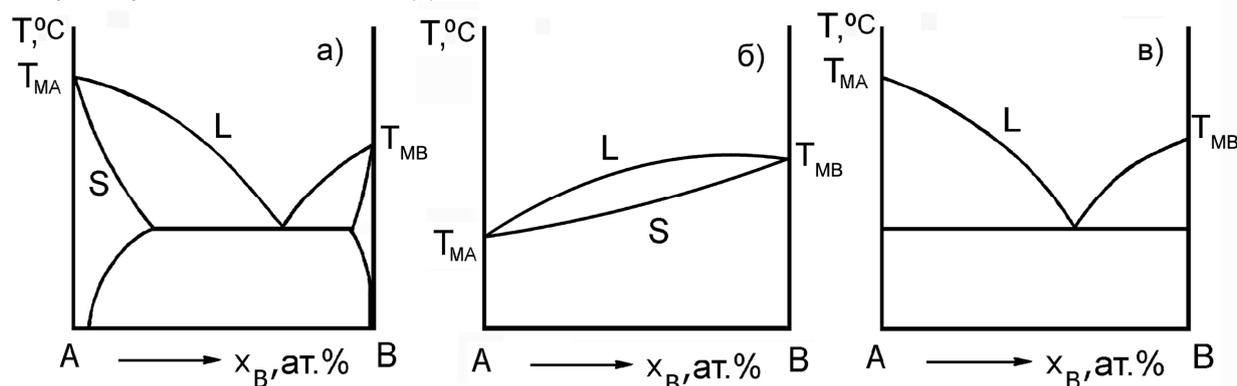


Рис. 1. Диаграммы состояния систем А-В (схематично)

а) – ограниченная растворимость компонентов в твердом состоянии; б) – неограниченная растворимость элементов в твердом состоянии. в) – неуставленная или ничтожно малая растворимость компонентов друг в друге.

Для систем с ограниченной и неограниченной растворимостью примесного элемента в основе (рис. 1а,б) в работах [6,7] описан метод представления ДС в области низких концентраций.

В предложенном методе формы линий солидуса и ликвидуса, как функций их температур от концентраций в исследуемых ДС представляются полиномами второго порядка:

$$T_S = p_{SB} \cdot x_{SB}^2 + q_{SB} \cdot x_{SB} + T_{MA}, \quad (1)$$

$$T_L = p_{LB} \cdot x_{LB}^2 + q_{LB} \cdot x_{LB} + T_{MA}, \quad (2)$$

где  $T_S$  и  $T_L$  – температуры солидуса и ликвидуса диаграмм состояния;  $x_{SB}$ ,  $x_{LB}$  – концентрации примесей твердой и жидкой фаз, ат. %;  $p_{SB}$ ,  $q_{SB}$ ,  $p_{LB}$ ,  $q_{LB}$  – коэффициенты регрессии.

Коэффициенты регрессии рассчитываются по разработанному алгоритму методом наименьших квадратов по взятым из ДС [1,2] парам значений:  $T_S(i)$ ,  $x_{SB}(i)$  и  $T_L(j)$ ,  $x_{LB}(j)$ ; где  $i, j = 1, 2, 3, \dots$

Получаемые таким образом аппроксимирующие уравнения линий солидуса и ликвидуса позволяют графически представить ДС двойных систем в области сверхнизких концентраций второго элемента. Для этого используется логарифмический масштаб изображения изменения температуры плавления чистого компонента ( $\Delta T_{MA}$ , °C) в зависимости от концентрации второго компонента ( $x_B$ , ат. %). Уравнения (1) и (2) применяли также для определения предельных коэффициентов распределения (КР) примесей  $k_{0\lim B}$  [6,7].

Однако для систем с неуставленной или ничтожно низкой растворимостью компонентов (рис. 1в) невозможно применение выше описанной методики представления ДС в области малых концентраций. В связи с

этим возникает проблема решения такой задачи.

Целью данной работы является разработка подхода к построению и анализу диаграмм состояния в области низких концентраций для систем с различной низкой растворимостью примесных компонентов.

#### МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ, РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В качестве примера на рис. 2 представлены ДС систем Zn – Li и Cd – Sn в логарифмических координатах, построенные по полученным аппроксимирующим уравнениям линий солидуса и ликвидуса (1) и (2).

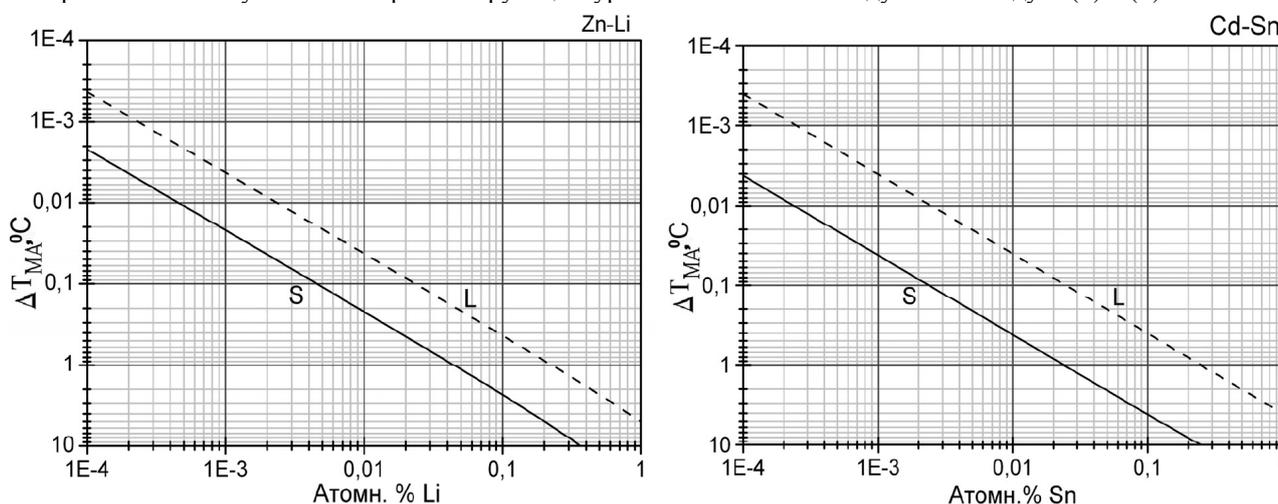


Рис. 2. Зависимость изменения температуры кристаллизации (плавления) расплава цинка и кадмия от содержания Li и Sn в области низких концентраций второго компонента.

При построении использовали параметры (таблица 1), полученные в ходе математического приближения методом наименьших квадратов линий солидуса и ликвидуса экспериментальных диаграмм состояний к полиномам второго порядка.

Таблица 1.

Значения коэффициентов регрессии для линий солидуса и ликвидуса ДС систем Zn-Li, Cd-Sn и расчетные значения предельных КР примесей  $k_{0 \text{ limB}}$

Система	$p_{SB}$	$q_{SB}$	$p_{LB}$	$q_{LB}$	$k_{0 \text{ limB}}$
Zn-Li	- 15,0546	- 21,8824	- 0,7632	- 4,2685	0,2
Cd-Sn	7,1146	- 42,0949	0,0440	- 4,0603	0,096

Такое представление ДС в области низких концентраций компонентов позволяет определять температуру начала плавления (кристаллизации) основного компонента в зависимости от концентрации примесного компонента, а также температурный интервал кристаллизации (плавления) при низких концентрациях второго компонента. В качестве примера в таблице 2 приведен анализ этих параметров для кадмия и цинка в зависимости от содержания в них Sn и Li в малых количествах. Из рис. 2 можно также определять и концентрационные интервалы плавления (кристаллизации) при определенных значениях отклонения температуры расплавов Zn-Li и Cd – Sn от температуры плавления чистых Zn и Cd.

Таблица 2.

Изменение температуры плавления  $\Delta T_L$ , °C, температуры кристаллизации  $\Delta T_S$ , °C и температурный интервал кристаллизации (плавления)  $\Delta T$ , °C кадмия и цинка в зависимости от концентрации примесных элементов Sn и Li, ат. %.

Концентрация, ат. %	Cd – Sn			Zn- Li		
	$\Delta T_S$ , °C	$\Delta T_L$ , °C	$\Delta T$ , °C	$\Delta T_S$	$\Delta T_L$	$\Delta T$ , °C
0,1	4,14	0,40	3,74	2,38	0,43	1,95
0,05	2,09	0,20	1,89	1,14	0,22	0,92
0,01	0,42	0,04	0,38	0,22	0,04	0,18
0,005	0,21	0,004	0,206	0,11	0,021	0,089

Из рис. 1в видно, что выше описанный подход представления ДС в области низких значений второго компонента не представляется возможным для систем с неустановленной или ничтожно низкой растворимостью компонентов друг в друге. Поэтому в данной работе для таких систем предлагается подход к определению максимальной растворимости второго компонента в твердом состоянии при концентрациях  $x_B < 0,1$  ат. %, ис-

пользующий предельные значения коэффициентов распределения примеси  $k_{0 \text{ limB}}$  и последующего построения ДС в этой области концентраций.

Ранее авторами этой работы был предложен подход для определения  $k_{0 \text{ limB}}$  [7, 8]. Данный подход заключается в сочетании теоретических расчетов определения равновесных КР  $k_{0B}$  по термодинамическим параметрам и математического анализа только линии ликвидуса двойных диаграмм состояния. Это позволило получить для определения  $k_{0 \text{ limB}}$  следующее выражение:

$$k_{0 \text{ limB}} = 1 + \frac{100 \cdot q_{LB} \cdot \Delta H_{MA}}{R \cdot T_{MA}^2}, \quad (3)$$

где  $k_{0 \text{ limB}}$  – предельный коэффициент распределения компонента В;  $\Delta H_{MA}$  – энтальпия плавления основного вещества;  $q_{LB} = (d\Delta T_{MA}/dx_{LB})_{x_{LB} \rightarrow 0}$  – градиент температуры на линии ликвидус (коэффициент регрессии уравнения линии ликвидуса);  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $\Delta T_{MA} = T_{MA} - T$ ;  $T_{MA}$  – температура плавления основного компонента;  $T$  – температура жидкого раствора;  $x_{LB}$  – концентрация компонента В на линии ликвидуса, ат. %.

Полученное выражение использовали для расчетов  $k_{0 \text{ limB}}$  в кадмии, цинке и теллуре. Для расчетов брали следующие термодинамические параметры:  $R = 8,31 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{град}^{-1}$ ,  $\Delta H_{MCd} = 6,2 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ ,  $\Delta H_{MZn} = 7,33 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ ,  $\Delta H_{MTe} = 17,5 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ ;  $T_{MCd} = 594 \text{ К}$ ,  $T_{MZn} = 693 \text{ К}$ ,  $T_{MTe} = 723 \text{ К}$  [6]. В таблице 3 приведены значения коэффициентов регрессии для линий ликвидуса в системах Cd, Zn, Te – В и рассчитанные по (3)  $k_{0 \text{ limB}}$  для приведенных систем основа–примесь.

Таблица 3

Значения коэффициентов регрессии для линий ликвидуса ДС систем Cd-Pb, Te-Sb, Zn-Mg и расчетные значения предельных КР примесных компонентов  $k_{0 \text{ limB}}$  (В = Pb, Sb, Mg) [7]

Система	$q_{LB}$	$q_{LB}$	$k_{0 \text{ limB}}$
Cd – Pb	0,1617	- 3,8333	0,19
Te – Sb	- 0,2210	- 2,4389	0,03
Zn – Mg	0,0458	- 4,8035	0,12

Используя известное выражение для определения равновесного коэффициента распределения  $k_{0 \text{ limB}} = x_{SB}/x_{LB}$  и определенные выше упомянутым методом значения предельных КР примесей  $k_{0 \text{ limB}}$ , были построены предполагаемые линии солидуса при концентрациях  $x_B < 0,1$  ат. % для систем Cd-Pb, Te-Sb, Zn-Mg.

На рис. 3 приведены диаграммы состояния систем Cd-Pb, Te-Sb, Zn-Mg в логарифмических координатах, которые позволяют определить температурные зависимости кристаллизации и плавления расплавов от содержания низкого количества вторых компонентов.

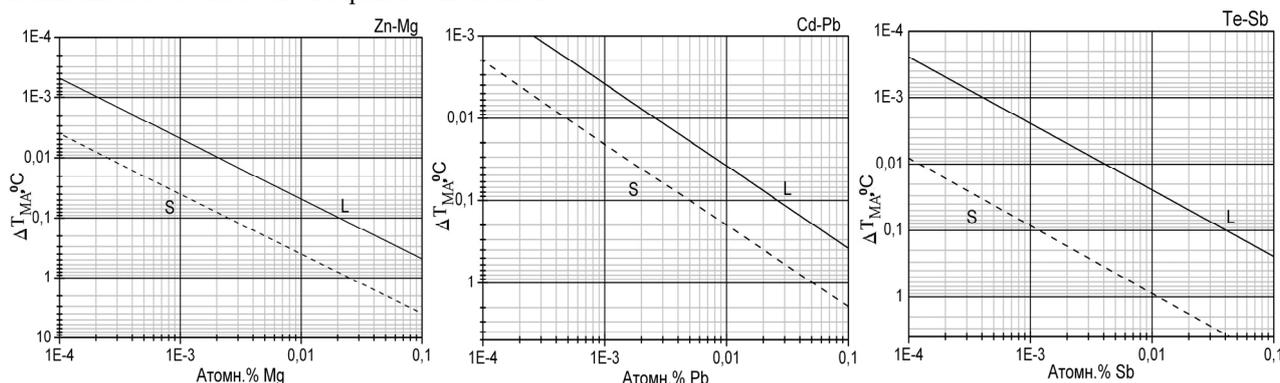


Рис. 3. Зависимость изменения температуры кристаллизации (плавления) расплава теллура, кадмия и цинка от содержания Sb, Pb и Mg в области низких концентраций второго компонента в логарифмических координатах.

Все проводимые в этой работе расчетные исследования выполняли с помощью математических пакетов программ Maple 14 и Mathcad 14, а графические построения с помощью программы Origin Pro8.

В таблице 4 приведены, определенные с помощью данного метода изменения температуры кристаллизации  $\Delta T_S$ , °С, температуры плавления  $\Delta T_L$ , °С и температурный интервал кристаллизации (плавления)  $\Delta T$ , °С кадмия, теллура и цинка в зависимости от концентрации примесных элементов Pb, Sb и Mg, ат. %.

Необходимо также отметить, что вышеуказанные системы обладают низкой взаимной растворимостью при эвтектических превращениях. Предварительные оценки предельной растворимости Sb и Mg при температуре эвтектического превращения в системах Te – Sb и Zn – Mg составляют 0,26 и 0,71 ат. % соответственно.

Таблица 4

Изменение температуры кристаллизации  $\Delta T_s$ , °C, температуры плавления  $\Delta T_L$ , °C, и температурный интервал кристаллизации (плавления)  $\Delta T$ , °C кадмия, теллура и цинка и в зависимости от концентрации примесных элементов Pb, Sb и Mg, ат. %.

Концентрация, ат. %	Cd – Pb			Te - Sb			Zn - Mg		
	$\Delta T_s$ , °C	$\Delta T_L$ , °C	$\Delta T$ , °C	$\Delta T_s$ , °C	$\Delta T_L$ , °C	$\Delta T$ , °C	$\Delta T_s$ , °C	$\Delta T_L$ , °C	$\Delta T$ , °C
0,1	1,95	0,38	1,57	9,52	0,24	9,28	3,95	0,48	3,47
0,05	1,01	0,19	0,82	4,53	0,12	4,41	1,97	0,24	1,73
0,01	0,20	0,04	0,16	0,89	0,02	0,87	0,40	0,05	0,35
0,005	0,10	0,02	0,08	0,44	0,01	0,43	0,20	0,02	0,18

Таким образом исследуемые области концентраций второго компонента  $x_B < 0,1$  ат. % относятся к областям не насыщенных твердых растворов на ДС. Представляет интерес построения линий солидуса ДС вплоть до температуры эвтектического превращения, что будет являться следующим этапом исследований в этом направлении.

#### ВЫВОДЫ

Предложен расчетный метод построения диаграмм состояния в области низких концентраций примесей ( $< 0,1$  ат. %) для систем с неограниченной и ограниченной растворимостью второго компонента. Приведены примеры анализа некоторых систем такого типа растворимости при низком ( $< 0,1$  ат. %) содержании второго компонента.

Для систем с неустановленной или предельно низкой растворимостью элементов разработан алгоритм построения и анализа ДС при концентрациях второго компонента  $x_B < 0,1$  ат. %. Приведены результаты анализа некоторых двойных систем основа-примесь для кадмия, цинка и теллура. Рассмотрено влияние содержания примесного элемента на температуру начала плавления (кристаллизации) расплава и определены температурные интервалы кристаллизации (плавления)  $\Delta T$ , °C кадмия, теллура и цинка в зависимости от концентрации примесных элементов Pb, Sb и Mg.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hansen M., Anderko K. *Struktury dvoynyh splavov.* - Vol. 1,2. – М.: Metallurgiya, 1962. – 1480s.
2. Liakishev N.P. *Diagrammy sostoyaniya dvoynyh metallicheskih sistem.* – Vol.1. – М.: Mashinostroenie, 1996. - 992s.; *Diagrammy sostoyaniya dvoynyh metallicheskih sistem.* - Vol.2. – М.: Mashinostroenie, 1997. – 1024s.; *Diagrammy sostoyaniya dvoynyh metallicheskih sistem.* - Vol. 3. - М.: Mashinostroenie, 2001. – 872s.
3. Tiller. W.A., Rutter J. W. The effect of growth conditions upon the solidification of a binary alloy // *Canad. J. Physics.*- 1964. - Vol. 34, № 1.- P. 96-121.
4. Chalmers B. The preparation of single crystals and bicrystals by the controlled solidification of molten metals // *Canad. J. Physics.* - 1953. - Vol.31, № 1. - P. 132-146.
5. Kovtun G.P., Shcherban' A.P. Kondrik A.I. Vliyanie uslovy napravlennoy kristallizatsii na glubokuyu ochestku metallov // *Voprosy atomnoy nauki i tehniki.* Ser. Vacuum, chistye materialy, sverhprovodniki. - 2007. - № 6 (14). - С. 19-23.
6. Barthel J., Buring E., Hein K., Kuharzh L. *Kristallizatsiya iz rasplavov.* – М.: Metallurgiya, 1987. – 320p.
7. Shcherban' A.P. Predelnye koeffitsienty raspredeleniya malorastvorimyyh primesey v metallah // *The Journal of Kharkiv National University, physical series "Nuclei, Particles, Fields".* – 2011. - №946. – Iss.1(49). - S.75-80.
8. Kovtun G.P., Shcherban' A.P. Datsenko O.A. Raschetny metod opredeleniya predelnyh koeffitsientov raspredeleniya primesey  $k_0 \lim_B$  pri napravlennoy kristallizatsii metallov // *Voprosy atomnoy nauki i tehniki.* Ser. " Vacuum, chistye materialy , sverhprovodniki." - 2003. - № 5 (13). - С. 3-6.

**ИГОРЬ НИКОЛАЕВИЧ АДАМЕНКО**  
(к 75-летию со дня рождения)

1 октября 2013 года исполнилось 75 лет доктору физико-математических наук, лауреату Государственной премии, заслуженному профессору Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина, Игорю Николаевичу Адаменко.

Игорь Николаевич родился в 1938 году в Полтаве. В 1956 году с серебряной медалью окончил школу № 131 в Харькове. В том же году поступил на физико-математический факультет Харьковского государственного университета имени А.М. Горького, который закончил с отличием в 1961 году. В 1962 – 1964 годах учился в аспирантуре. В 1964 году с должности ассистента начинается преподавательская работа И.Н. Адаменко в Харьковском университете на кафедре теоретической ядерной физики.

Кандидатскую диссертацию, выполненную под руководством М.И. Каганова, Игорь Николаевич успешно защитил в 1968 году. С середины 60-ых годов начинается период активного сотрудничества И.Н. Адаменко с лабораторией квантовых жидкостей и кристаллов ФТИНТ. Работая в тесном сотрудничестве с экспериментаторами, Игорь Николаевич существенно развил теорию сверхтекучих растворов  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$ , обнаружив новый двухэтапный механизм релаксации в фонон-примесной системе сверхтекучих растворов  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$ . Это позволило ему, в частности, рассчитать все диссипативные коэффициенты, устранив существовавшее на то время значительное расхождение между теорией и экспериментом.

И.Н. Адаменко были найдены новые механизмы релаксации в He II при повышенных давлениях, обусловленные процессами поглощения и излучения фононов ротонами за счет неопределенности энергии последних. Это позволило рассчитать теплопроводность и вязкость He II, а также поглощение первого звука, объяснив результаты экспериментов.

Блестящими являются работы И.Н. Адаменко по поглощению третьего звука в пленках He II, а также работы по особенностям переноса по пленке He II при наличии переменного электрического поля.

В 1986 году И.Н. Адаменко защищает докторскую диссертацию по специальности теоретическая и математическая физика. Уже в 1988 году Игорь Николаевич становится профессором кафедры теоретической ядерной физики ХГУ. Известна замечательная характеристика, которую дал его научной работе И.М. Халатников, признанный классик гелиевой науки. Вот выдержка из этой характеристики: «...Игоря Адаменко знаю давно и слежу за его работой. У нас есть одна совместная работа. Его работы в области гелия II отличает глубина и надежность результатов. Вообще, в нашем кругу у него очень хорошая репутация, как говорится, его результатам всегда можно верить. Несомненно он – высококвалифицированный теоретик...»

Под руководством Игоря Николаевича была разработана кинетическая теория процессов релаксации концентрации и температуры в сверхтекучих растворах  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$ , которая применима в общем случае, а также в предельных гидродинамическом, кинетическом и переходном режимах.

Научные и педагогические достижения И.Н. Адаменко не остаются незамеченными и в 1996 году за цикл работ «Кинетические процессы в квантовых жидкостях и кристаллах» он получает государственную премию Украины в области науки и техники, а в 2002 год – звание заслуженного профессора ХНУ имени В.Н. Каразина. С середины 90-х годов начинается плодотворное сотрудничество теоретической группы, возглавляемой И.Н. Адаменко, с экспериментальной группой, руководимой академиком А.Ф.Ж. Вайтом из университета г. Эксетер (Великобритания). Из полученных в группе результатов отметим теоретическое объяснение эффекта рождения горячих фононов в пучке холодных фононов в сверхтекучем гелии, что позволило в результате серии работ рассчитать форму сигнала горячих фононов, объяснив ряд экспериментальных данных. Предсказаны уникальные термодинамические свойства фононных и ротонных пучков в сверхтекучем гелии. Проведены

систематические расчеты частот различных процессов релаксации фононов в анизотропных системах сверхтекучего гелия. Это позволило дать теорию эффекта образования горячей линии в результате пересечения фононных пучков в He II. Развита теория звуковых мод в анизотропных квазичастичных системах в сверхтекучем гелии.

В 2008 году был завершен первый этап исследований рассеяния тепловых возбуждений с границами веществ. Был найден целый ряд необыкновенных эффектов и предсказана возможность отрицательного давления. Этот результат сейчас ждет экспериментального подтверждения.

С 2009 по 2013 года были проведен второй этап исследований взаимодействия тепловых возбуждений с границами веществ. В результате этих исследований была разработана теория учитывающая вклад неупругого взаимодействия фононов гелия с границей твердого тела в скачок Капицы и в распределение фононов, излученных нагретым твердым телом в сверхтекучий гелий.

И.Н. Адаменко – член двух научных советов по защите докторских диссертаций (ФТИНТ НАНУ и ННЦ ХФТИ). Он – член редколлегии международного журнала “International Journal of Theoretical Physics, Group Theory and Nonlinear Optics” (Нью-Йорк, США) и Вестника ХНУ «Ядра, частицы, поля».

И.Н. Адаменко является высококвалифицированным преподавателем высшей школы. Он подготовил и прочитал семь курсов фундаментальных дисциплин. За высокие достижения в учебно-методической работе неоднократно признавался лучшим преподавателем физико-технического факультета. Студенты знают, что Игорь Николаевич всегда готов ответить на любые вопросы аудитории. Стиль его преподавания отличается ясностью и доходчивостью изложения, а также четкостью организации учебного процесса.

И.Н. Адаменко – соавтор около 200 научных работ, опубликованных в ведущих научных журналах. Особенно следует отметить недавнюю серию публикаций в журналах “Physical Review Letters” и “Physical Review”. Научные результаты, полученные И.Н. Адаменко, известны всем физикам, работающим в области квантовых жидкостей и кристаллов. Высокую оценку достижений И.Н. Адаменко подтверждают 8 индивидуальных грантов, полученных от различных научных международных организаций. На протяжении 9 лет И.Н. Адаменко получал гранты Engineering and Physical Sciences Research (EPSR) (Великобритания) для проведения научных исследований совместно с физиками университета Эксетера (Великобритания).

Игорь Николаевич создал научную школу физиков-теоретиков, работающих в области квантовых жидкостей и кристаллов. Он подготовил 6 кандидатов и одного доктора физико-математических наук. В настоящее время И.Н. Адаменко руководит аспирантом и консультирует работы по докторской диссертации. Для Игоря Николаевича характерна демократичность общения с его учениками на любые и не только научные темы. Игорь Николаевич всегда в курсе дел его учеников, будучи готов помочь не только советом по любому вопросу, но и делом.

Коллеги, друзья и ученики Игоря Николаевича Адаменко искренне поздравляют его с юбилеем и желают ему здоровья и дальнейших успехов.

*Н.А. Азаренков, В.С. Бакиров, Ю.А. Бережной, И.А. Гирка, Ю.А. Кирочкин,  
В.Ф. Клепиков, К.Э. Немченко, С.В. Пелетминский, В.А. Слипко,  
В.Д. Ходусов, Н.Ф. Шульга*

**СЛЬОЗОВ ВІТАЛІЙ ВАЛЕНТИНОВИЧ****9.III.1930 – 30.X.2013**

30 жовтня 2013 року пішов з життя Віталій Валентинович Сльозов - доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України, головний науковий співробітник відділу дифузійних та електронних явищ в твердих тілах Інституту теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ, Заслужений діяч науки і техніки України (2003), багаторічний викладач та професор кафедри матеріалів реакторобудування фізико-технічного факультету нашого університету.

Віталій Валентинович Сльозов народився 9 березня 1930 року в місті Сокіл Вологодської області. 1941 року його було евакуйовано з блокадного Ленінграда з однією з останніх груп дітей. 1948 року він вступив на фізико-механічний факультет Ленінградського політехнічного інституту, який з відзнакою закінчив у 1954 році.

З того часу наукова діяльність В.В. Сльозова нерозривно пов'язана з Українським фізико-технічним інститутом - нині ННЦ ХФТІ. Він став науковим співробітником відділу теорії твердого тіла, яким керував І.М. Ліфшиць, та у 1959 р. захистив кандидатську дисертацію, у 1969 р. - дисертацію на здобуття вченого ступеня доктора фізико-математичних наук. Саме тут В.В. Сльозовим були виконані роботи, що принесли йому визнання як у нашій країні, так і далеко за її межами.

Теорія коалесценції Ліфшиця-Сльозова стала важливим внеском до фізики твердого тіла та матеріалознавства. "Закон Ліфшиця-Сльозова" міцно увійшов до наукової літератури та до "арсеналу" фізиків, які працюють у галузі фізики конденсованого стану та її застосувань.

В 60-і роки В.В. Сльозовим разом із А.М. Косевичем та З.К. Саралідзе була побудована модель дифузійного плинну кристала, у якому дислокаційні петлі є джерелами та стоками точкових дефектів. Була встановлена залежність швидкості плинну матеріалу від зовнішнього навантаження. Був також запропонований метод визначення швидкості дифузійного росту пор і дислокаційних петель за наявності об'ємних джерел точкових дефектів (наприклад, при радіаційному опроміненні).

Протягом 70-х років В.В. Сльозовим були виконані теоретичні дослідження дифузійного розпаду пересичених багатокомпонентних систем, у співпраці з В.В. Сагаловичем була розвинена теорія коалесценції в багатокомпонентних багатофазних системах.

1978 року за цикл робіт із теорії неідеальних кристалів В.В. Сльозову, А.А. Смирнову, М.О. Криволазу та А.М. Косевичу було присуджено Державну премію в галузі науки і техніки. 1993 року В.В. Сльозову разом з О.М. Івасишиним, В.Г. Гаврилюком, В.В. Кокоріним і Р.В. Телевичем присуджено Державну премію України за цикл робіт "Фазові та структурні перетворення у твердих розчинах з мікро- і субмікронеоднорідним розподілом елементів, а також їхнє використання для одержання нових металевих матеріалів".

В 1990-2000-і роки В.В. Сльозовим були виконані значні цикли досліджень кінетики фазових перетворень першого роду у твердих розчинах і грузлих рідинах, з теорії сегрегації домішок у полікристалах, з теорії утворення нової фази складної стехіометричної сполуки з урахуванням взаємодії домішок у твердому розчині, еволюції мікрорельєфу на поверхні матеріалів під опроміненням.

В останні роки В.В. Сльозов активно працював над розробкою теорії кінетики перетворень на всіх стадіях від зародження нової фази до коалесценції (переконденсації). Основною особливістю теоретичних робіт Віталія Валентиновича є їхня спрямованість на розв'язання актуальних фізичних проблем, які мають велике практичне

значення.

У 1995 році В.В. Сльозов обраний членом-кореспондентом Національної Академії Наук України.

В.В. Сльозов є автором і співавтором 4 монографій, понад 200 статей. Він багато років працював професором кафедри матеріалів реакторобудування Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна.

Світла пам'ять про Віталія Валентиновича Сльозова збережеться в серцях його студентів, учнів, колег, друзів, рідних та близьких людей.

*І.М. Адаменко, М.О. Азаренков, О.С. Бакай, В.С. Бакіров, Ю.А. Бережної, В.М. Воеводін, І.О. Гірка,  
В.Ф. Зеленський, І.М. Карнаухов, А.М. Кондратенко, С.В. Литовченко, В.І. Муратов,  
І.М. Неклюдов, Ю.В. Слюсаренко, В.Д. Ходусов, М.Ф. Шульга*

## ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРІВ

“Вісник Харківського національного університету” (серія: фізична «Ядра, частинки, поля») є збірником наукових робіт з фізики елементарних частинок, ядерної фізики, фізики плазми та плазмових технологій, фізики твердого тіла та радіаційної фізики. Журнал публікує наукові статті, короткі повідомлення, оглядові статті та рецензії на книги. До публікації у збірнику приймаються статті, які підготовлені у відповідності до правил для авторів і які отримали дві позитивні рецензії. Рукописи, які не відповідають правилам не розглядаються.

Для редагування тексту у MS Office Word можна застосовувати шаблон з готовими стилями, який розміщений на сайті журналу:

<http://www-nuclear.univer.kharkov.ua>.

**Об'єм статті, мова, супровідні документи.** До редакції подається рукопис об'ємом не менше 3-х сторінок українською, російською або англійською мовами в двох екземплярах з направленням закладу і актом експертизи, а також повний електронний варіант статті у форматі MS Office Word, а також ОКРЕМО електронні варіанти усіх рисунків у форматах "bmp", "tiff" або "jpg". Безпосередня вставка рисунків з інших програм не допускається. Якість рисунків повинна бути достатньою для відтворення тонких ліній, градацій відтінків та кольорів при чорно-білому друці. Редакція залишає за собою право вимагати поліпшення якості малюнків для отримання задовільної якості чорно-білого друку.

**Папір, формат, поля.** Текст друкується на білих листах формату А4 через один інтервал. Рекомендується використовувати редактор MS Word, шрифт Times New Roman (Cyr), редактор формул MathType версія 5.0 і вище. Поля справа, зліва і знизу по 2 см, зверху - 3 см.

**Нумерація сторінок.** Сторінки нумеруються послідовно на зворотному боці листа олівцем.

**Підписи авторів.** Один екземпляр рукопису повинен бути підписаним на зворотному боці листа усіма авторами.

## ПОСЛІДОВНІСТЬ РОЗМІЩЕННЯ МАТЕРІАЛУ

**Індекс класифікації.** На першій сторінці зверху пропускаються два рядка; у третьому рядку у лівому верхньому куті друкується УДК (*курсив*, 9 pt.) і/або PACS і значення індексу.

**Назва статті, список авторів статті.** Нижче індексу класифікації після пропуску одного рядка розміщується назва статті (прямий напівжирний шрифт, 12 pt., усі букви прописні, вирівнювання по центру). Нижче назви статті після пропуску одного рядка друкуються ініціали і прізвища авторів (прямий напівжирний шрифт, 12 pt., вирівнювання по центру).

**Назва і адреса організації, що представляють автори.** Нижче списку авторів у наступному рядку друкуються повні назви і адреси організацій, які представляють автори (шрифт *курсив*, 9 pt., вирівнювання по центру), у наступному рядку - адреса електронної пошти для переписки. Якщо організацій декілька, то для вказівки відповідності авторів і організацій слід застосовувати виноски зірочкою або цифрами.

**Дата представлення статті в редакцію.** Нижче адреси електронної пошти друкується дата представлення статті в редакцію: число - цифрами, місяць - прописом, рік - цифрами (шрифт прямий, 9 pt., вирівнювання по центру).

**Реферати, ключові слова іншими мовами\*.** Після пропуску одного рядка друкується реферат мовою статті об'ємом не менше ніж 500 знаків без відступів, з коротким викладом постановки задачі, методів, що були використані та основних результатів (шрифт прямий 9 pt., вирівнювання по ширині). Слово "реферат" не друкується. У наступному рядку після слів (мовою статті) "КЛЮЧОВІ СЛОВА:" (прописом, шрифт прямий напівжирний, 9 pt., без відступу) мовою статті розміщуються ключові слова (5-8 слів, шрифт прямий 9 pt., вирівнювання по ширині). Далі після пропуску одного рядка двома іншими мовами друкується назва статті (шрифт прямий напівжирний 9 pt., вирівнювання по центру), список авторів (шрифт прямий напівжирний 9 pt., вирівнювання по центру), список організацій, що представляють автори (шрифт *курсив* 9 pt., вирівнювання по центру), текст реферату та ключові слова.

**Основний текст статті, абзацний відступ.** Нижче реферату після пропуску одного рядка друкується основний текст статті (шрифт прямий 10 pt.). Абзацний відступ 0,75 см.

**Розбиття статті на розділи.** Рекомендується розбиття статті на такі розділи: вступ (назва цього розділу не друкується) **МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИ** (обов'язково для експериментальних робіт), **РЕЗУЛЬТАТИ І ОБГОВОРЕННЯ, ВИСНОВКИ.**

Для теоретичних робіт допускається більш вільний розподіл матеріалу на розділи, наприклад, замість розділу **МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИ** рекомендуються розділи **ПОСТАНОВКА ЗАВДАННЯ, МОДЕЛЬ** і тому подібне. Розділи не нумеруються, в назвах розділів усі букви прописні і виділяються напівжирним шрифтом, вирівнювання по центру. При необхідності розділи діляться на підрозділи. Назви підрозділів друкуються з великої літери і виділяються напівжирним шрифтом, вирівнювання по центру. Після кожного розділу чи підрозділу залишається один пустий рядок.

**Фонди, гранти.** Наприкінці тексту статті після пропуску одного рядка, якщо потрібно, вказується назва фонду, який фінансував роботу, і номер гранту.

**Формули, таблиці, малюнки, підписи, нумерація.** Математичні і хімічні символи, рівняння і формули друкуються в тексті статті за допомогою програми Math Type. Рисунки вставляються в текст статті у форматах: «bmp», «tiff» або «jpg». Всі надписи на рисунках і осях друкуються шрифтом не менше 8 pt. Підписи під рисунками друкуються шрифтом 9 pt. Формули, таблиці і рисунки послідовно нумеруються арабськими цифрами, наприклад: (1); Табл. 1; Рис. 1. Назва таблиць і рисунків є обов'язковими.

**Посилання і список літератури.** Використані у рукопису літературні джерела нумеруються в порядку цитування в тексті, номер посилання друкується в квадратних дужках. Список літератури (шрифт прямий 9 pt.) розміщується відразу за основним текстом статті і виділяється як розділ **СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ** (шрифт прямий напівжирний 9 pt.). Не допускаються посилання на неопубліковані роботи.

\* For foreign authors is sufficient to provide abstracts in Russian and English.

Для зарубěžных авторов достаточно рефератов на русском и английском.