ISSN 2221-7754

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ

ВІСНИК

ХАРКІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ

імені В.Н. Каразіна

№ 1001

серія: фізична

«Ядра, частинки, поля»

Заснована у 1998 р.

Випуск **2** /54/

The Journal of Kharkiv National University

№ 1001

physical series

«Nuclei, Particles, Fields»

Issue **2** /54/

Харків

2012

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 book reviews.
Issues per year – 4.

EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief - Zalubovsky I.I., Corresponding member of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor
Deputy Chief Editor - Azarenkov N.A., Academician of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor
Executive Secretary - Girnyk S.A., PhD

Adamenko I.N., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin
Berezhnoy Yu.A., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin
Bizyukov A.A., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin
Budagov Yu.A., D.Sc., Laboratory of nuclear problems, Joint Institute of Nuclear Research, Dubna, Russia
Duplij S.A., D.Sc., Kharkiv national university named V.N. Karazin
Garkusha I.E., D.Sc., Professor, Director of Institute of Plasma Physics NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"
Girka I.A., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin
Khodusov V.D., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin
Kondratenko A.N., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin
Lazurik V.T., D.Sc., Kharkiv national university V.N. Karazin
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"
Slyusarenko 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"
Tolok V.T., Corresponding member of Ukrainian National Academy of Science, D.Sc., Professor, NPTC, Ministry of Education and Science of Ukraine
Tovstiak V.V., D.Sc., Professor, Kharkiv national university named V.N. Karazin

Editorial office address
High Technology Institute
Kharkov National University V.N. Karazin
Kurchatov av., 31, office 402, Kharkiv, 61108, Ukraine
Phone: +38-057-335-18-33
E-mail: visnyk@pht.univer.kharkov.ua, visnykhnu@gmail.com
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 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.
Періодичність випуску збірника – 4 рази на рік.

Затверджено до друку рішенням Вченої ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна (протокол № 2 від 24 лютого 2012 р.)

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Головний редактор – Залюбовський І.І. – чл.-кор. НАН України, д. ф.-м. наук, професор
Заступник головного редактора – Азарєнков М.О. – академік НАН України, д. ф.-м. наук, професор
Відповідальний секретар – Гірник С.А. – к. ф.-м. наук

Адаменко І.М. – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна
Бережной Ю.А. – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна
Бізюков 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. Джелєпова, ОІЯД м.Дубна, Росія
Дуплій С.А. – д. ф.-м. наук, член Американської і Европейської физичної спілки, член Ассоціації математичної фізики, ХНУ імені В.Н. Каразіна
Гаркуша І.Є. – д. ф.-м. наук, професор, директор Інституту фізики плазми ННЦ ХФТІ
Гірка І.О. – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна
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
Меренков М.П. – д. ф.-м. наук, ННЦ ХФТІ
Жан-Мари 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 О. – 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
Товстяк В.В. – д. ф.-м. наук, професор, ХНУ ім. В.Н. Каразіна
Толок В.Т. – чл.-кор. НАН України, д. ф.-м. наук, професор, НФТЦ МОН, НАНУ
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, Харків, 61108 Україна
Телефон: +380-57-335-18-33
E-mail: visnyk@pht.univer.kharkov.ua, visnykhnu@gmail.com
Web-сторінка: http://www-nuclear.univer.kharkov.ua

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

© Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, оформлення, 2012

PACS: 52.55.Pi

FIRST ORBIT LOSSES OF CHARGED FUSION PRODUCTS IN TOKAMAK: FLUX CALCULATION

A.O. Moskvitin[1], V.O. Yavorskij[2,3], V.Ya. Goloborod'ko[2,3], Yu.K. Moskvitina[4]
[1] *V.N. Karazin Kharkiv National University*
Ukraine, Kharkiv, Svobody sq. 4, 61022
[2] *Institute for Nuclear Research, Ukrainian Academy of Sciences*
Ukraine, Kyiv, prospekt Nauky b.47, 03680
[3] *Association EURATOM-OEAW, Institute for Theoretical Physics*
Austria, Innsbruck
[4] *National Science Centre "Kharkov Physics and Technology Institute"*
Ukraine, Kharkiv, Akademicheskaya St. 1, 61108
E-mail: Anton.Moskvitin@gmail.com
Received 29 March 2012, accepted 21 May 2012

Technique of calculation the pitch-angle, energy and poloidal distributions of the flux of charged fusion products (CFPs) lost to the first wall of axisymmetric tokamak due to first orbit (FO) loss mechanism is developed. This technique extends the approach for evaluation the poloidal distributions of FO loss of CFPs in tokamaks proposed by [*Kolesnichenko Ya.I. et al. Sov. J. Plasma Phys* ***2*** *(1976) 506*]. The upgraded technique enables to calculate distributions of lost fast ions in wide class of tokamak magnetic configurations. Analytical model of the magnetic field used in this study [*Yavorskij V.A. et al. Plasma Phys. Control. Fusion* ***43*** *(2001) 249*] takes into account Shafranov shift, elongation, triangularity and up-down asymmetry. Usage of the drift constant of motion space allows substantial reducing the computational efforts for simulation the lost particles flux at a given point of the first wall. The developed approach is useful for simulation the pitch-angle and energy distributions of fast ions lost to the scintillator detector [*Zweben S.J. et al. Nucl.Fusion* ***30*** *(1990) 1551*] in present-day tokamaks [*Kiptily V.G. et al. Nucl.Fusion* ***49*** *(2009) 065030*] as well as for calculation of the CFP fluxes to the plasma-facing wall in future tokamak-reactors.
KEYWORDS: first orbit losses, charged fusion product, axisymmetric tokamak, non-circular flux surface, scintillator detector.

МГНОВЕННЫЕ ПОТЕРИ ЗАРЯЖЕННЫХ ПРОДУКТОВ СИНТЕЗА В ТОКАМАКЕ: ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОТОКА

А.А. Москвитин[1], В.А. Яворский[2,3], В.Я. Голобородько[2,3], Ю.К. Москвитина[4]
[1] *Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина*
Украина, Харьков, пл. Свободы 4, 61022
[2] *Институт ядерных исследований Национальной академии наук Украины*
Украина, Киев, пр. Науки 47, 03680
[3] *Ассоциация Евроатом-ААН, Институт теоретической физики*
Университет Инсбрука, Австрия
[4] *Национальный научный центр Харьковский физико-технический институт*
Украина, Харьков, ул. Академическая 1, 61108
Разработан метод для расчета распределений по питч-углу, энергии и полоидальному углу потока заряженных продуктов синтеза (ЗПС), теряемых на первой стенке осесимметричного токамака вследствие мгновенных потерь (МП). Этот метод расширяет подход для расчета полоидального распределения МП ЗПС в токамаках, который был предложен в [*Kolesnichenko Ya.I. et al. Sov. J. Plasma Phys* ***2*** *(1976) 506*]. Усовершенствованный метод позволяет рассчитывать распределений теряемых быстрых ионов для широкого класса магнитных конфигураций токамаков. Используемая в этом исследовании аналитическая модель магнитного поля учитывает шафрановский сдвиг, эллиптичность, треугольность и асимметрию «верх-низ» [*Yavorskij V.A. et al. Plasma Phys. Control. Fusion* ***43*** (*2001) 249*]. Использование пространства инвариантов движения дает возможность значительно уменьшить вычислительные усилия при моделировании потока теряемых частиц в заданную точку на первой стенке. Разработанный подход полезен для моделирования распределения по питч-углу и энергии теряемых быстрых ионов, которые попадают в сцинтилляционный детектор [*Zweben S.J. et al. Nucl.Fusion* ***30*** *(1990) 1551*] в современных токамаках [*Kiptily V.G. et al. Nucl.Fusion* ***49*** *(2009) 065030*], а также рассчитывать потоки ЗПС на первую стенку в будущих токамаках реакторах.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: мгновенные потери, заряженные продукты синтеза, осесимметричный токамак, некруглые потоковые поверхности, сцинтилляционный детектор.

МИТТЄВІ ВТРАТИ ЗАРЯДЖЕНИХ ПРОДУКТІВ СИНТЕЗУ В ТОКАМАЦІ: РОЗРАХУНОК ПОТОКУ

А.О. Москвітін[1], В.О. Яворський[2,3], В.Я. Голобородько[2,3], Ю.К. Москвитина[4]
[1] *Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна*
Україна Харків, пл. Свободи 4, 61022
[2] *Інститут ядерних досліджень Національної академії наук України*
Україна, Київ, пр. Науки 47, 03680
[3] *Асоціація Євроатом-ААН, Інститут теоретичної фізики*
Університет Інсбрука, Австрія
[4] *Національний науковий центр Харківський фізико-технічний інститут*
Україна, Харків, вул. Академічна 1, 61108

© Moskvitin A.O., Yavorskij V.O., Goloborod'ko V.Ya., Moskvitina Yu.K., 2012

Розроблено метод обчислення розподілів по пітч-куту, енергії та полоїдного куту потоку заряджених продуктів синтезу, які втрачаються на першій стінці осесиметричного токамака внаслідок миттєвих втрат (МВ). Цей метод розширює підхід для обчислення полоїдного розподілу МВ ЗПС в токамаках, який був запропонований в [*Kolesnichenko Ya.I. et al. Sov. J. Plasma Phys* ***2*** *(1976) 506*]. Покращений метод дозволяє розраховувати розподіли швидких іонів, що втрачаються, для широкого класу магнітних конфігурацій токамаків. Аналітична модель магнітного поля, яка використовується в цьому дослідженні, враховує шафранівський зсув, еліптичність, трикутність та асиметрію «верх-низ» [*Yavorskij V.A. et al. Plasma Phys. Control. Fusion* ***43*** *(2001) 249*]. Використання простору інваріантів руху дає можливість значно зменшити обчислювальні зусилля при моделюванні потоку частинок, що втрачаються, в заданій точці на першій стінці. Розроблений підхід є корисним для моделювання розподілу за пітч-кутами та енергіями швидких іонів, що втрачаються, та досягають сцинтиляційного детектора [*Zweben S.J. et al. Nucl.Fusion* ***30*** *(1990) 1551*] у сучасних токамаках [*Kiptily V.G. et al. Nucl.Fusion* ***49*** *(2009) 065030*], а також обчислювати потоки ЗПС на першу стінку в майбутніх токамаках-реакторах.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: миттєві втрати, заряджені продукти синтезу, осесиметричний токамак, некруглі потокові поверхні, сцинтиляційний детектор.

Charged fusion product (CFP) losses together with neutron fluxes are expected to cause main damage of a fusion reactor first wall. One of the conventional loss mechanisms of CFP is the first orbit (FO) losses. The thorough review on theoretical study of this loss mechanism is presented in [1]. Review on experimental research activities can be find in [2]. Analytical approaches for first orbit flux calculation were derived in [3,4]. It should be noted that these models were provided for poloidal distributions of FO loss of CFPs in tokamak with circular cross-section. The approach developed in [5] gives an opportunity to calculate the poloidal distribution of FO loss flux in tokamak with elliptic cross-section. The numerical code presented in current study in addition to poloidal distributions allows also examination of pitch-angle and energy distributions of the FO loss in tokamaks with elliptic and triangular flux surfaces.

First systematic experimental research of the FO losses of CFPs was carried out in TFTR (Tokamak Fusion Test Reactor) [6]. The main diagnostic system in this research was the scintillator detector of charged particle. It was able to measure a pitch-angle and energy distribution of the escaped fast ions due to the design of the detector. The scintillator detector is widely used on nowadays tokamaks JET (Joint European Torus) [7,8], ASDEX-Upgrade [9], DIII-D [10] mainly for studying losses of energetic particles caused by either plasma MHD activity, either complex symmetry-breakings [11, 12, 13]. It is assumed that complex symmetry breakings are the magnetic perturbations that break axial symmetry of the tokamak magnetic configuration, e.g. toroidal field ripples, magnetic perturbations caused by Edge Localized Modes (ELMs) mitigation coils, magnetic perturbations caused by Test Blanket Modules in ITER etc. In the framework of these studies, first orbit losses usually cause an unavoidable background signal.

After the first experiments in TFTR, it became obvious that first orbit losses can be decreased significantly due to increasing plasma current above $3MA$, e.g. in ITER with plasma current of order $15MA$ and minor radius $2m$ these losses are believed to be negligibly small (below 0.1%) [11]. Besides that, these experiments showed that these losses are in good agreement with theoretical predictions. Nevertheless, interest to these losses in this study is caused by necessity to develop common approach for simulation of first orbit loss signal in scintillator probe in order to distinguish contributions from the studied processes and from the FO losses. Thus toroidal field ripple induced losses were observed in addition to the conventional first orbit losses of DD CFPs in JET [14].

The crucial point of this study is to use magnetic field model, which could cover variety of the existing tokamak configurations, in order to provide crosscheck for different experimental setups. The appropriate model was developed in [15]. Using this model, it is also possible to carry out test particle simulations using the same numerical model of the magnetic configuration [16].

Description of CFP dynamics needs accurate accounting for the Larmor radius of the orbit. For typical parameters of a reactor scale closed magnetic traps this radius can exceed about 10 cm for CFP. Larmor motion of CFP can be taken into account in the developed approach by appropriate modification of the boundary values of motion invariants. However, to simplify the analysis of FO loss distributions in this paper we neglect the finite Larmor orbit width. Additionally, test particle simulations were carried out using the same magnetic configuration in order to provide a cross-check. The results showed good agreement for 2D smooth profile of the axially symmetric first wall. Nevertheless, the same simulation for real 3D wall will need to take into account the finite Larmor orbit width. Developing of such extended approach is underway now.

Thus, the main aim of this study is to develop the theoretical approach for simulation spatial and velocity distributions of first orbit losses in order to model the scintillator probe signal of pure first orbit losses. This approach should cover variety of existing magnetic configurations, the magnetic field model should be flexible for predictive modeling, and should maintain test particle simulations for crosscheck validation. Smooth, axially symmetric wall is assumed. The finite Larmor orbit width has been neglected yet, in order to introduce the main ideas of developed approach.

In this paper, the theoretical basis of the developed code is presented along with results of the test runs of this code. The test particle validation and comparative analysis of the experimental data is underway now. The rest of the paper is organized in the following way. In the first section, the analytical model of the axisymmetric magnetic configuration is specified. Next section is devoted to the calculation technique of flux density of the first orbit losses,

including flux calculation model, drift orbit equations in terms of constants-of-motion and drift orbit topology analysis. Results of the test runs and concluding remarks are presented in the last section.

MAGNETIC FIELD MODEL

In current study, magnetic configuration of tokamak is assumed to be axisymmetric with non-circular flux surfaces. The analytical model for such configurations is described in details in [15]. It is supposed that flux surfaces are determined by the parametric dependence of the cylindrical coordinates

$$R(\rho,\chi)=R_0+\Delta(\rho)+\rho\cos(\chi), \tag{1}$$

$$Z(\rho,\chi)=Z_{ax}-k(\rho)\rho\sin(\chi)\left[1-\Lambda(\rho)\cos(\chi)\right]^{\alpha}, \tag{2}$$

where R and Z represent the spatial variables of the cylindrical coordinates $\{R,\varphi,Z\}$, ρ and χ represent variables of the new flux-like coordinates $\{\rho,\chi,\varphi\}$ with clear physical meaning, $\Delta(\rho)$, $k(\rho)$ and $\Lambda(\rho)$ are flux surface parameters: the Shafranov's shift, the elongation parameter and the triangularity parameter respectively, and α is a flux surface model parameter, R_0 is vacuum vessel major radius, Z_{ax} is a Z coordinate of the magnetic axis. The physical meaning of $\{\rho,\chi,\varphi\}$ - coordinates can be understood from Fig.1. The coordinate ρ is a flux surface label and its value is equal to distance between the magnetic axis and the flux surface in the equatorial midplane, and χ is the analog of poloidal angle. The angle φ is the toroidal angle, and its value and direction coincide in both coordinate systems $\{R,\varphi,Z\}$ and $\{\rho,\chi,\varphi\}$.

According to used model, the flux surface parameters can be evaluated using expressions

$$\Delta(\rho)=\Delta_e(\rho), \tag{3}$$

$$k(\rho)=k_e(\rho)M\left[1+\left(1-M^2\right)/\alpha\right]^{\alpha}, \tag{4}$$

$$\Lambda(\rho)=\Lambda_e(\rho)M^2/\left(1-M^2+\alpha\right), \tag{5}$$

where $M=1/\sqrt{1-\Lambda_e^2(\rho)}$, $\Delta_e=\Delta_{e0}\left[1-\left(\rho/a_{pl}\right)^2\right]$, $k_e(\rho)=k_{e0}+k_{e1}\left(\rho/a_{pl}\right)^2$, $\Lambda_e(\rho)=\Lambda_{e0}\left(\rho/a_{pl}\right)^2$.

Quantities Δ_e, k_e and Λ_e for each prescribed flux surface can be derived from the geometrical parameters of flux surface shape. The procedure of such derivation is described in [15]. Numerical values of constants a_{pl}, Δ_{e0}, k_{e0}, k_{e1} and Λ_{e0} are presented in Table 1. It should be noted that the explicit form of the expressions (3), (4) and (5) depends on the certain model of the magnetic configuration. Here it is used one of the three analytical models developed in [15]. These models cover the variety of observed flux surface shapes for axisymmetric toroidal magnetic configurations including up-down asymmetry.

The components of the axisymmetric magnetic field in coordinates $\{R,\varphi,Z\}$ are given by

$$B_R=\frac{J\langle Y\rangle}{\sqrt{g}q(\rho)}\frac{\partial R(\rho,\chi)}{\partial\chi}, \tag{6}$$

$$B_\varphi=\frac{J}{R(\rho,\chi)}, \tag{7}$$

$$B_Z=\frac{J\langle Y\rangle}{\sqrt{g}q(\rho)}\frac{\partial Z(\rho,\chi)}{\partial\chi}, \tag{8}$$

where $J=(\mu_0/2\pi)NJ_{TFC}$ total poloidal current parameter, μ_0 magnetic constant, N number of toroidal field coils (TFC), J_{TFC} poloidal current in single TFC, $q(\rho)$ safety factor, $\sqrt{g}$ Jacobian of coordinate system $\{\rho,\chi,\varphi\}$, $Y(\rho,\chi)$ flux surface geometry factor, $\langle...\rangle=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\chi...$ denotes the averaging over poloidal angle χ. The explicit expression for $Y(\rho,\chi)$ depends on magnetic configuration analytical model, and can be evaluated using definition

$$Y=\sqrt{g}/R^2. \tag{9}$$

Magnetic configuration calculated using parameters given in Table 1 is in good agreement with typical axisymmetric equilibrium magnetic configuration in JET. These values for the magnetic configuration parameters are used below, if contrary isn't pointed. As an example, flux surfaces calculated using this analytical model are presented in Fig.1.

Table 1.

Parameters of the magnetic configuration analytical model

Parameter name, unit	Parameter value
Vacuum vessel major radius, *m*	$R_0 = 2.89$
Magnetic axis Z coordinate, *m*	$Z_{ax} = 0.323$
Flux surface model parameter	$\alpha = -0.5$
Maximum minor plasma radius in equatorial plane, *m*	$a_{pl} = 0.961$
Magnetic axis Shafranov shift, *m*	$\Delta_0 = 0.11$
Elongation profile parameters	$k_{e0} = 1.36$, $k_{e1} = 0.315$
Triangularity profile parameter	$\Lambda_{e0} = 0.174$
Total poloidal current parameter, *T·m*	$J = -7.58$

MODEL OF THE FLUX OF CFP LOST FROM THE TOKAMAK PLASMA DUE TO THE FO LOSS MECHANISM

Flux calculation model

Commonly total flux of lost particles Γ_{loss} can be written as

$$\Gamma_{loss} = \int\limits_{Loss\ domain} R_{fus}(\mathbf{r},\mathbf{v})\, d\mathbf{r} d\mathbf{v}\,, \tag{10}$$

where $R_{fus}(\mathbf{r},\mathbf{v})$ source of charged fusion product particles, $\mathbf{r}$ and $\mathbf{v}$ radius vector and velocity vector respectively. The integration domain '*Loss domain*' is defined by full set of particle orbits, which intersects confinement boundary, e.g. last closed flux surface or vacuum vessel wall. Here we assume that particle is lost if its trajectory intersects plasma boundary $\rho = a_{pl}$.

Generally, the integration domain is six-dimensional. However, taking into account axial symmetry of the problem and using guiding center approximation, this domain becomes four-dimensional. This means that a full set of lost particle trajectories can be described by only four variables. Thus, the concrete set of four numbers defines only one specific orbit. Certainly, it is true if effect of Coulomb collisions is neglected.

Diagnostic techniques, such as scintillator probe or Faraday cup, give a tip to choose the set of variables in following way $\{a, \chi_a, \xi_a, V\}$, where a, χ_a define the position of probe in $\{\rho, \chi\}$ coordinates, and ξ_a, V describe orbit parameters (pitch $\xi = V_{\|}/V$ and particle speed V, where $V_{\|}$ is parallel particle velocity). Nevertheless, it is possible to derive alternative representation of lost particle flux in terms of variables $\{a, \chi_a, \xi_a, V\}$

$$\Gamma_{loss} = \int\limits_{Loss\ domain} R_{fus}(\rho, \xi_a, V)\sqrt{g}\,\frac{\partial(\rho,\chi,\xi,V)}{\partial(a,\chi_a,\xi_a,V)}\, 2\pi d\rho d\chi_a 2\pi V^2 d\xi_a dV\,, \tag{11}$$

where it is supposed that source of charged fusion product particles R_{fus} in real space depends only on flux label ρ and it is axially symmetric in velocity space regarding to the direction of magnetic field. First assumption is based on the thesis that R_{fus} depends only on plasma specie densities and temperatures, which are commonly supposed to be constant on the flux surface. The second one is a consequence of the fast phase mixing due to cyclotron gyration.

In order to establish relationship between $\{a, \chi_a, \xi_a, V\}$ and $\{\mathbf{r}, \mathbf{v}\}$ variables, and derive the expression for the Jacobian of coordinates transition $\partial(\rho,\chi,\xi,V)/\partial(a,\chi_a,\xi_a,V)$ it is necessary to provide drift orbit analysis.

Drift constants of motion

There are three constants of motion for charged particle in axisymmetric toroidal magnetic field: the total energy $W = mV^2/2$, the magnetic moment $\mu = mV_{\perp}^2/2B$ and the toroidal angular momentum $P_\varphi = R(mV_{\|} - eA_\varphi)$, where m and e are particle mass and electric charge (not necessarily the electron charge), V is particle speed, $V_{\|}$ and $V_{\perp}$ are particle velocity components respectively parallel and perpendicular to the magnetic filed, $\mathbf{B}$, $B = |\mathbf{B}|$, R is radial component of the $\{R, \varphi, Z\}$ cylindrical coordinates, A_φ is a toroidal component of a vector potential $\mathbf{A}$.

Taking into account the invariance of μ and P_φ, guiding center motion equations take the form

$$\left(1-\xi^2\right)R=\left(J/W\right)\mu_a, \tag{12}$$

$$\Psi+\left(mV/e\right)\xi R=P_{\varphi a}/e, \tag{13}$$

where $\left(J/W\right)\mu_a$ and $P_{\varphi a}/e$ are constants, which define certain orbit, subscript 'a' points that invariants μ and P_φ are expressed in terms of variables $\mathbf{c}_a=\{\chi_a,\xi_a,V\}$ and $\Psi=-A_\varphi$. Finally, one can get

$$\left(1-\xi^2\right)R(\rho,\chi)=\left(1-\xi_a^2\right)R_a, \tag{14}$$

$$\Psi(\rho)+C\xi R(\rho,\chi)=\Psi_a+C\xi_a R_a, \tag{15}$$

where $R_a=R(a,\chi_a)$, $\Psi_a=\Psi(a)$ and $C=mV/e$. These equations implicitly define particle trajectory $\rho(\chi,\mathbf{c}_a)$ and pitch-angle variation along orbit $\xi(\chi,\mathbf{c}_a)$. Nevertheless, not only χ can be chosen as the independent parameter, it is also possible to consider ρ or ξ as independent variable.

In order to exclude the dependence on χ these equations can be rewritten as

$$R(\rho,\mathbf{c}_a)=\left(B_\xi+D_\xi\right)/2C, \tag{16}$$

$$\xi(\rho)=\left(B_\xi-D_\xi\right)/2A_\xi, \tag{17}$$

where $A_\xi=\Psi(\rho)-\Psi(a)-C\xi_a R_a$, $B_\xi=\left(1-\xi_a^2\right)R_aC$ and $D_\xi=\sqrt{B_\xi^2+4A_\xi^2}$, these designations are made for convenience reasons.

Under given orbit parameters $\{a,\chi_a,\xi_a,V\}$ it is possible to reconstruct the guiding center trajectory for particle with speed V, which passes through point $\{a,\chi_a\}$ with pitch ξ_a. For this purpose, one can change ρ continuously and evaluate R from Eq. (16). Then using R and ρ it is possible to derive χ

$$\chi=\arccos\left\{\left[R(\rho)-R_0-\Delta(\rho)\right]/\rho\right\}. \tag{18}$$

Finally, using Eq. (2) coordinate Z can be obtained.

Examples of reconstructed trajectories are in Fig.2. Taking into account up-down symmetry of magnetic configuration, and supposing that point $\{a,\chi_a\}$ is the final point of trajectory, independent parameter ρ should be changed only in segment $[\rho_{\min},a]$, where $\rho_{\min}$ is value of variable ρ at the point of intersection of trajectory with equatorial midplane (see Fig.2).

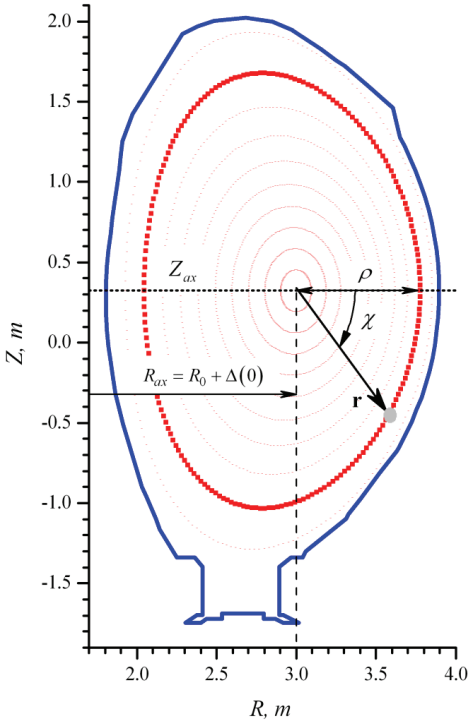


Fig. 1. Flux surfaces, coordinates $\{R,\varphi,Z\}$ and $\{\rho,\chi,\varphi\}$

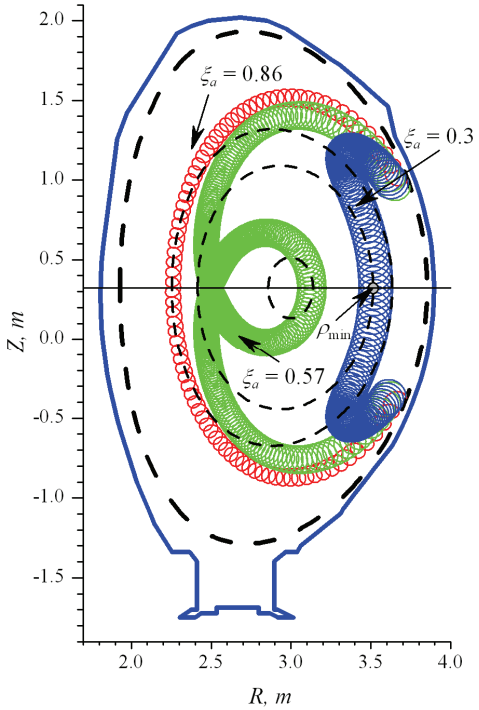


Fig. 2. Typical orbits of charged particles in axisymmetric tokamak configuration .

To find $\rho_{\min}$ one can derive the equation

$$C^2R^2\left(\rho_{\min},\chi_{\min}\right)-A_\xi^2\left(\rho_{\min}\right)+B_\xi CR\left(\rho_{\min},\chi_{\min}\right)=0, \tag{19}$$

where $\chi_{\min}=0$ for intersection point at the '*low field side*' and $\chi_{\min}=\pi$ for the '*high field side*'. Strictly saying, these two types of orbits are separated by the extreme trapped orbit, so called, '*the widest banana orbit*'. It is demonstrated in Fig.2. by bold line. Analysis of the drift orbit topology in axisymmetric magnetic configuration is presented in next subsection.

Drift orbit topology analysis

First of all, let us introduce commonly used charged particle orbits classification: 'co-passing', 'counter-passing' and trapped orbits [17]. Examples of orbits, which reach the detector, are presented in Fig.2 (from left to right): 'co-passing' ($\xi_a=0.86$), 'the fattest banana' ($\xi_a\approx 0.59$), 'banana' ($\xi_a=0.3$). Simulation parameters: tritons with energy $W=1MeV$, probe position $a=0.961m$, $\chi_a=\pi/6$. Dashed lines correspond to flux surfaces, bold dash line represents the outermost flux surface $\rho=a=0.961m$.

In order to give analytical description of the orbit variety and to determine boundaries of the appropriate domains in phase space, we will consider the set of orbits with fixed set of variables $\{a,\chi_a\}$ and we will analyze the position of trajectory intersection point with equatorial midplane $\rho_{\min}$ as a function of parameter values $\{\xi_a,V\}$.

In order to find $\rho_{\min}$ let us consider Eq.(19). In general, this equation doesn't have analytical solution taking into account magnetic configuration considered in this paper. In order to treat this equation numerically it is necessary to localize roots. Dependence of the left hand side of Eq. (19) versus $\rho_{\min}$ for different parameter values $\{\xi_a,V\}$ is presented in Fig.3. For present study, firstly, we are interested in dependence on ξ_a under fixed V. This interest is caused by experimental reasons.

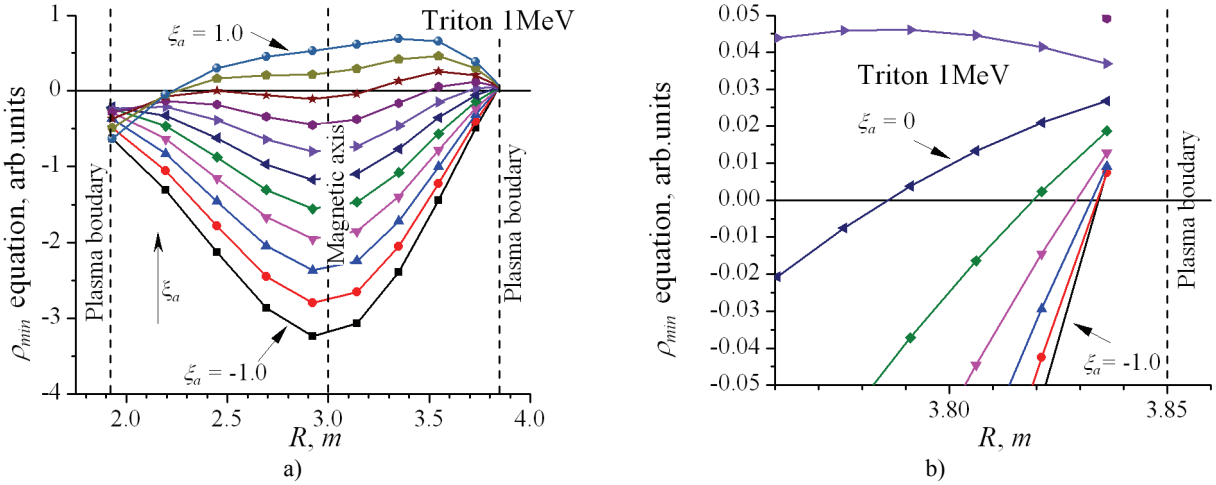


Fig.3. Graph presentation of the LHS of Eq. (19) for $\rho_{\min}$.

a) pitch ξ_a varies from -1 to 1 with step 0.2; b) enlarged fragment of a) for $\xi_a<0$

It is seen from Fig.3b. that for orbits with $\xi_a<0$ only one root for each orbit exists at the 'high field side' near plasma edge. In Fig.2. these orbits lie to the right of orbit with $\xi_a=0$. It is obvious that particles with such trajectories can't give any significant flux at point $\{a,\chi_a\}$, because they pass through plasma periphery with low density. That is why we won't pay attention to these orbits further.

The 'banana' orbits also have only one root. The most problematic are potato orbits, because they have two roots, and these roots don't necessary lie on both sides from magnetic axis. In order to distinguish these roots one should find $\rho_{\min}$ for 'the widest banana' orbit. Further it is denoted as $\rho_{\min}^{wb}$. And ξ_a^{wb} is the value of the orbit invariant ξ_a, which corresponds to the 'widdest banana' orbit. Then two roots of the 'potato orbits' will lie on both sides of $\rho_{\min}^{wb}$. Besides that there is very narrow class of 'twins' orbits. Under '*twins*' here we understand orbits with different set of parameters $\{a,\chi_a,\xi_a,V\}$ but the same coefficients $\{A_\xi,B_\xi,C\}$ and thus the same equation for $\rho_{\min}$. These orbits have three roots: two roots lies at the 'high field side' and one – at the 'low field side'. The leftmost root belongs to 'co-passing' orbit which moves down to point $\{a,\chi_a\}$. And two others belong to closed orbit of 'counter-passing' particle, which

doesn't loss because it doesn't pass through point $\{a,\chi_a\}$. Nevertheless, these orbits can be distinguished too with the help of $\rho_{\min}^{wb}$.

To find $\rho_{\min}^{wb}$ it is necessary to find the root of the first derivative of P_φ. The matter is that the toroidal angular moment under given $\{a,\chi_a,V\}$ has an extremum for 'the widest banana' orbit. Thus it is possible to find ξ_a^{wb} (or corresponding $\rho_{\min}^{wb}$) using equation

$$\frac{\partial\left(P_\varphi/e\right)}{\partial\rho_{eq}}=\frac{2\Psi'\left(\rho_{eq}\right)\xi_{eq}+C\left(1+\xi_{eq}^2\right)R'\left(\rho_{eq},\pi\right)}{2\left(\xi_{eq}-\xi_a\right)}, \tag{20}$$

where 'prime' denotes derivative $d/d\rho_{eq}$ and ρ_{eq} is a coordinate of the intersection point of the drift orbit and equatorial plane, ξ_{eq} is the value of the pitch at the equatorial plane. In fact, variable ρ_{eq} is equal to $\rho_{\min}$ for 'co-passing' and 'the widest banana' orbits, but here it is considered as independent variable, which labels drift orbit. The variables ξ_{eq} and ξ_a in Eq. (20) are functions of ρ_{eq} only. The explicit expressions for $\xi_{eq}\left(\rho_{eq}\right)$ and $\xi_a\left(\rho_{eq}\right)$ can be derived from Eqs. (14) and (15):

$$\xi_{eq}\left(\rho_{eq}\right)=\left(-b_\xi+\sqrt{b_\xi^2-4a_\xi c_\xi}\right)\Big/\left(2a_\xi\right), \tag{21}$$

where $a_\xi=C^2R\left(\rho_{eq},\pi\right)\left[R\left(\rho_{eq},\pi\right)-R_a\right]$, $b_\xi=2CR\left(\rho_{eq},\pi\right)\left[\Psi\left(\rho_{eq}\right)-\Psi_a\right]$ and $c_\xi=C^2R_a\left[R\left(\rho_{eq},\pi\right)-R_a\right]+\left[\Psi\left(\rho_{eq}\right)-\Psi_a\right]^2$; and

$$\xi_a\left(\rho_{eq}\right)=\left(-b'_\xi+\sqrt{b'^2_\xi-4a'_\xi c'_\xi}\right)\Big/\left(2a'_\xi\right), \tag{22}$$

where $a'_\xi=C^2R_a\left[R\left(\rho_{eq},\pi\right)-R_a\right]$, $b'_\xi=2CR_a\left[\Psi\left(\rho_{eq}\right)-\Psi_a\right]$ and $c'_\xi=C^2R\left(\rho_{eq},\pi\right)\left[R\left(\rho_{eq},\pi\right)-R_a\right]-\left[\Psi\left(\rho_{eq}\right)-\Psi_a\right]^2$. It should be noted that all quantities in Eq. (20) - (22) corresponds to equatorial midplane at the 'high-field side'.

The plots of $\xi_a\left(\rho_{eq}\right)$ given by Eq. (22) for different values of the particle energy W are presented in Fig.4. The corresponding orbit types are illustrated in Fig.5 for triton with energy $W=1MeV$. It should be noted that the case $W=2MeV$ in Fig.4 corresponds the situation when all orbits of trapped particles with $\xi_a>0$ are 'potato' orbits.

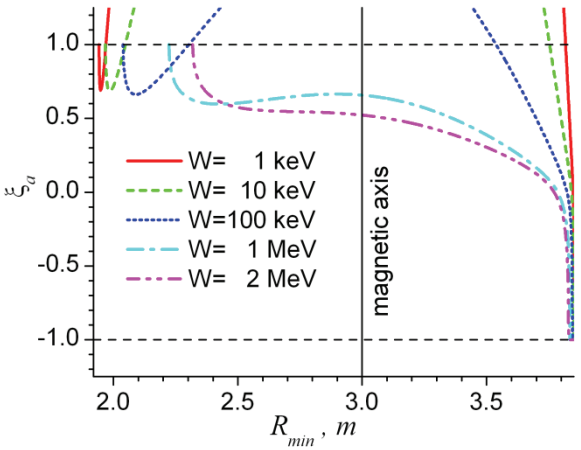


Fig.4. The profile of the orbit parameter ξ_a in equatorial midplane. Simulation parameters: tritons with energies $W=\{1,10,100,1000,2000\}keV$, probe position $a=0.961m$, $\chi_a=\pi/6$.

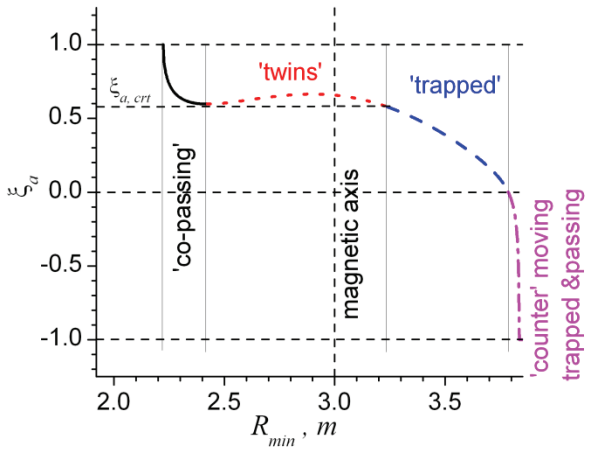


Fig.5. The profile of the orbit parameter ξ_a in equatorial midplane for triton with energy $W=1MeV$, and probe position $a=0.961m$, $\chi_a=\pi/6$.

According to the presented drift orbit analysis it is now possible to localize roots of the Eq. (19) and to finish the definition of '*Loss domain*' in $\{a,\chi_a,\xi_a,V\}$. Thus the expression (11) for the loss particle flux can be written as

$$\Gamma_{loss} = 2\pi \int_{-\pi}^{\pi} d\chi_a \int_0^{\infty} dV 2\pi V^2 \int_{-1}^{1} d\xi_a 2 \int_{\rho_{\min}(a,\chi_a,\xi_a,V)}^{a} d\rho R_{fus}(\rho,\xi_a,V)\sqrt{g}\frac{\partial(\rho,\chi,\xi,V)}{\partial(a,\chi_a,\xi_a,V)}, \quad (23)$$

where $\sqrt{g}$ can be derived using Eqs. (1) and (2), and $\partial(\rho,\chi,\xi,V)/\partial(a,\chi_a,\xi_a,V)$ can be derived using expressions (16) and (17).

RESULTS AND CONCLUSIONS

Commonly, the scintillator probe is placed at the fixed point. This gives an opportunity to consider only flux at the given location $\{a,\chi_a\}$. Next point is that this probe data contains information about separate flux tubes with the given pitch and particle speed $\{\xi_a,V\}$, i.e. the signal from the certain channel of probe is in fact proportional only to value of the integral over ρ in (23). Thus for further study we will consider only monoenergetic flux I of lost particles at point $\{a,\chi_a\}$ with pitch and velocity $\{\xi_a,V\}$

$$I(a,\chi_a,\xi_a,V) = \int_{\rho_{\min}(a,\chi_a,\xi_a,V)}^{a} d\rho R_{fus}(\rho,\xi_a,V)\sqrt{g}\frac{\partial(\rho,\chi,\xi,V)}{\partial(a,\chi_a,\xi_a,V)}. \quad (24)$$

Following expressions for metric coefficients can be used:

$$\sqrt{g} = R^2(\rho,\chi)k(\rho)\rho\tau\{\gamma_0 + \gamma_1\cos\chi + \gamma_2\cos^2\chi + \gamma_3\cos^3\chi\} \quad (25)$$

where coefficients τ and γ_i are given in Table 2 in according with [15];

$$\frac{\partial(\rho,\chi,\xi,V)}{\partial(a,\chi_a,\xi_a,V)} = \frac{a\sin\chi_a}{\rho\sin\chi}\frac{1+\xi_a^2}{1-\xi_a^2}\frac{1}{\sqrt{1+4/G^2}}, \quad (26)$$

where $G = B_\xi / A_\xi$. It is supposed integration along orbit in Eq. (24). Thus, the variable χ in Eqs. (25) and (26) can be derived using Eq. (18)

Table 2.

Magnetic field model coefficients

γ_0	$1+l+\alpha dl$	τ	$(1-\Lambda\cos\chi)^{\alpha-1}$
γ_1	$d-(1+l-\alpha)\Lambda-\alpha m_\Lambda$	d	Δ'
γ_2	$-l-(1+\alpha)dl$	l	$(k'/k)\rho$
γ_3	$(l-\alpha)\Lambda+\alpha m_\Lambda$	m_Λ	$\rho\Lambda'$

To provide numerical integration in Eq. (24) it is used Gauss scheme with 32 points. This scheme doesn't require the evaluation of integrand at the integration domain ends. This feature of the scheme becomes very useful taking into account singularity of Eq. (26) at $\chi = 0$ and $\chi = \pi$, which takes place for $\rho = \rho_{\min}$.

The results of the numerical evaluation of Eq. (24) for tritons with energy $W = \{10,100,1000\}keV$ at different values of pitch ξ_a are presented in Fig.6. For this calculation the source term was supposed monoenergetic

$$R_{fus}(\rho,\xi_a,V) = \frac{1}{2\pi V^2}\delta(V-V_0), \quad (27)$$

where $V_0 = \sqrt{2W/m}$.

From Fig.6 it is obvious that form of flux profile for triton energies $W > 2MeV$ is different compared with triton energies $W < 2MeV$. It is caused by topology of orbits with large energy, namely, orbits of all 'trapped' particles are 'potato', and there are no 'banana' orbits (see Fig.4). Besides that, there is no 'gap' in the equatorial midplane, which corresponds to 'twins' orbits (see Fig.5).

It is obvious that FLR effects play significant role in the CFP dynamics. However, to simplify the analysis of FO loss distributions in this paper we neglect the finite Larmor orbit width. Nevertheless, gyro-orbit simulation of 400000 test particles was carried out using in order to provide a cross-check. The results of this calculation are demonstrated in Fig. 7. It is seen that distributions of both approaches are in reasonable agreement.

In test simulation particles were uniformly distributed in the torus RZ-section bounded by last closed flux surface. Each particle was traced for 20 microseconds; it corresponds to nearly 2000 cyclotron periods of triton in this magnetic configuration. All parameters of magnetic configuration were the same as provided above in the paper. The error bars of points, which correspond to 'full orbit' calculations, are estimated using expression for dispersion of the binomial distribution.

$$f_{Err}(\xi_{ai}) = \sqrt{N_\Sigma p_i (1-p_i)}, \quad (28)$$

where f_{Err} notes absolute magnitude of the error for point ξ_{ai}, N_Σ is total number of particles escaping to the scintillator probe with pitch $\xi_a > 1$, p_i is the probability that $\xi_{ai} - \Delta\xi/2 < \xi_a < \xi_{ai} + \Delta\xi/2$, $(\Delta\xi = 0.05)$.

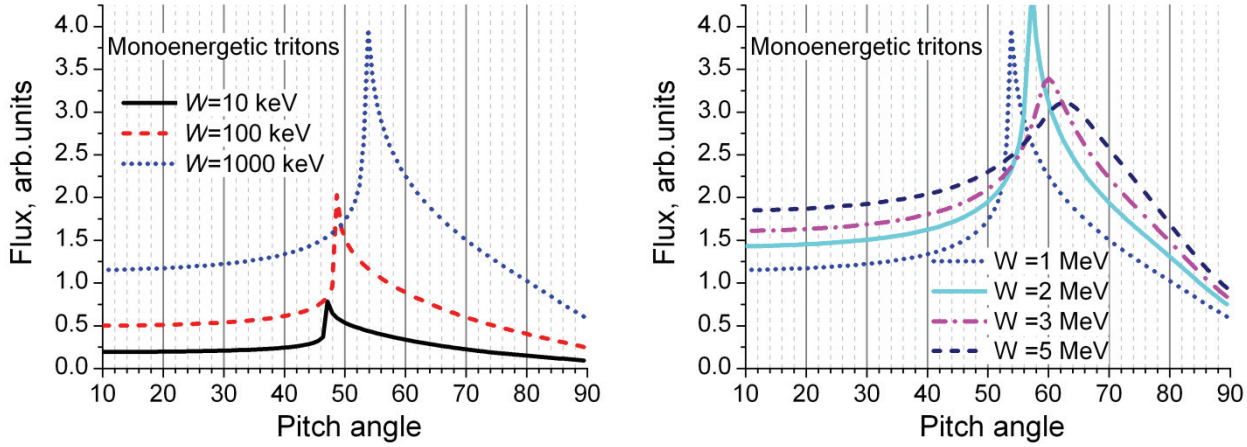


Fig.6. Fluxes of lost tritons with monoenergetic distribution
a) $W = \{10,100,1000\} keV$; b) $W = \{1,2,3,5\} MeV$.

The mean deviation of models σ is estimated as

$$\sigma = \sqrt{\left(f_{full\,orbit}(\xi_i) - f_{drift}(\xi_i)\right)^2 / N}, \quad (29)$$

where $f_{full\,orbit}$ and f_{drift} are values of normalized flux at point with pitch ξ_i, N is a number of points $(N = 20)$.

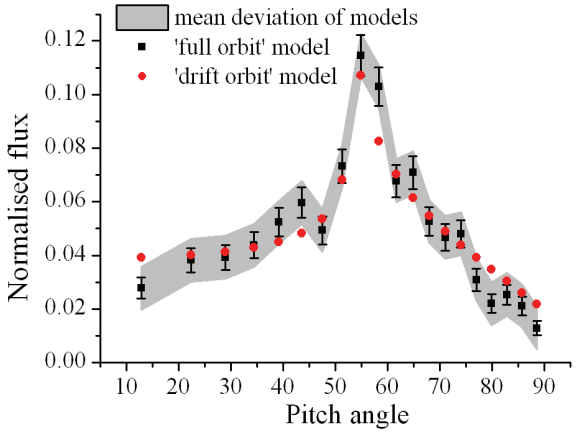


Fig. 7. Comparison of the pitch angle distribution of the lost CFP, which are calculated using 'full orbit' and 'drift orbit' models. The error bars are estimated using Eq. (28).

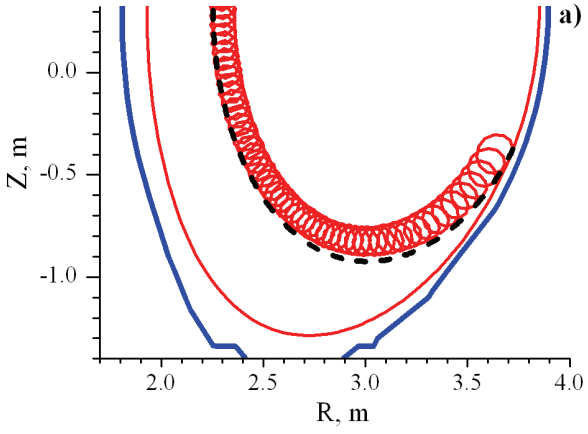


Fig. 8. Comparison of the lost trajectories, which are calculated using 'full orbit' (solid line) and 'drift orbit' (dash line) models. a) $\xi_a = 0.725$ (pitch angle ~ 40^0);

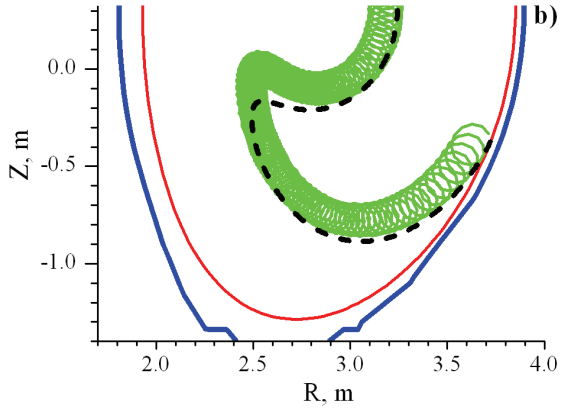


Fig. 8.(cont.) b) $\xi_a = 0.575$ (pitch angle ~ 55^0);

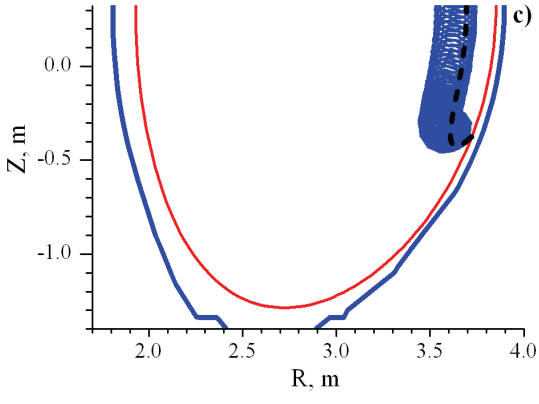


Fig. 8.(cont.) c) $\xi_a = 0.175$ (pitch angle ~ 80^0);

To clarify the nature of the discrepancies of FO loss distributions in Fig. 7 we compare the drift and full gyro orbits for circulating and toroidally trapped particles considered in this figure. Fig. 8a represents the trajectories of the passing particle with pitch $\xi_a = 0.725$ (pitch angle ~ 40^0), while Figs. 8b and 8c display the orbits of toroidally trapped particles with $\xi_a = 0.575$ (pitch angle ~ 55^0) and $\xi_a = 0.175$ (pitch angle close to 80^0). One can see that for circulating particle the length of the 'drift' trajectory is greater than the length of its guiding center trajectory in the 'full orbit' model. Contrary the lengths of drift orbits of trapped particles are less than those of the guiding centers of full gyro-orbits. The biggest deviation in orbit lengths is observed for trapped particle with pitch angle ~ 55^0 (Fig. 8b) that can explain the underestimation of the FO loss of marginally trapped particles at pitch angles 55-60^0 in drift approximation seen in Fig. 7.

In order to clarify the effect of energy profile of the source term, numerical simulation was provided for 'Gauss'-like form

$$R_{fus}(\rho,\xi_a,V) = \frac{mV}{2W_{CM}}\sqrt{\frac{\gamma}{\pi}}\exp\left\{-\gamma\left[\sqrt{\frac{W}{W_{CM}}}-1\right]^2\right\}, \qquad (30)$$

where $W = mV^2/2$, $\gamma = W_{CM}/\beta T$, W_{CM} is birth energy in center mass frame, β is distribution dispersion parameter, T is plasma temperature. Examples of distributions given by Eq.(30) are presented in Fig.9.

Numerical simulations show that the energy distribution of fusion product affects weakly on the pitch distribution of the flux. As an example, calculated pitch distributions are presented in Fig.10 for the cases of monoenergetic and 'Gauss'-like of the fusion product energy distribution. It is caused mainly by weak dependence of the critical value of pitch for *'the widest banana'* orbit on energy (see Fig.4).

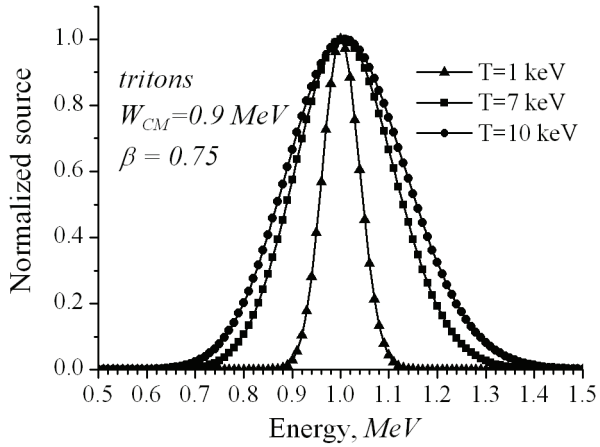


Fig.9. Energy spectra of the fusion product triton source for plasma temperatures $T = \{1,7,10\}\,keV$.

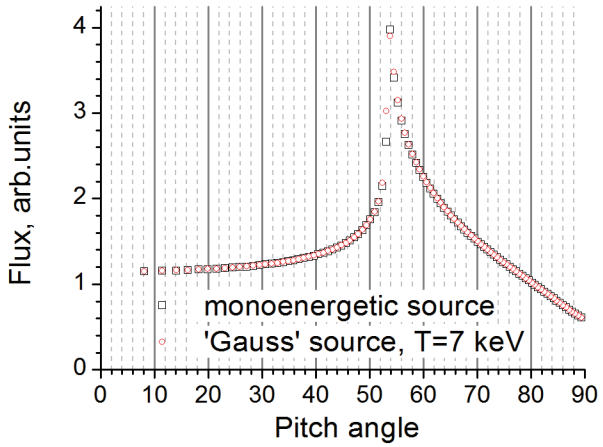


Fig.10. Lost triton flux profile for different forms of the source term.

In conclusion, we would like to summarize main results of the presented study. The earlier developed approach for poloidal distribution of prompt losses of CFP is extended to calculate pitch-angle and velocity distributions of the lost ions. The numerical code for simulation of the first orbit losses of CFP is developed for axisymmetric magnetic configuration of tokamak taking into account non-circular flux surfaces. Smooth axially symmetric 2D wall is assumed I this model. Cross-check of the newly upgraded approach against full orbit calculations shows good agreement.

Drift orbit topology analysis in this configuration is provided in order to define the '*Loss domain'* in constants of motion space. The approach used in this paper gives an opportunity to decrease calculation efforts for simulating the experimental data from scintillator probe, or other point probe. It is shown that the energy spectrum of the charged fusion product weakly affects the lost particles flux profile versus pitch. Results of the test numerical simulation agree with earlier conducted calculations [3-5] and experimental data [14].

REFERENCES

1. Kolesnichenko Ya.I. The role of alpha particles in tokamak reactors // Nuclear Fusion. – 1980. – Vol.20, № 6. – P. 727 - 780.
2. Heidbrink W.W., Sadler G.J. The behaviour of fast ions in tokamak experiments // Nuclear Fusion. – 1994. – Vol.34, № 4. – P. 535-615.
3. Kolesnichenko Ya.I., Fursa A.D., Yavorskiy V.A. Azimutal'noe raspredelenie potoka vysokoenergichnykh al'fa-chastits na stenki kamery v aksial'no-simmetrichnom tokamake // Fizika plazmy. – 1976. – T.2, vyp. 6. – S. 911 - 921. (in Russian). Kolesnichenko Ya.I., Fursa A.D., Yavorskij V.A. Azimuthal distribution of the flux of high-energy alpha-particles to the chamber wall in an axisymmetric tokamak // Soviet Journal of Plasma Physics. – 1976. – Vol.2, № 6. – P. 506-510. (in English).

4. Hively L.M., Miley G.H. Fusion product bombardment of a tokamak first wall // Nuclear Fusion. – 1977. – Vol.17, № 5. – P. 1031 - 1046.
5. Kolesnichenko Ya.I., Yavorskiy V.A. Ob uderzhanii al'fa-chastits v tokamakakh s nekruglym secheniem // Fizika plazmy. – 1979. – T.5, Vyp. 1. – C. 126 – 135 (in Russian). Kolesnichenko Ya.I., Yavorskij V.A. Alpha-particle confinement in a tokamak with a noncircular cross section // Soviet Journal of Plasma Physics. – 1979. – Vol.5, № 1. – P. 72-77. (in English).
6. Zweben S.J., Boivin R.L., Diesso M. et al. Loss of Alpha-Like MeV Fusion Products from TFTR // Nuclear Fusion. – 1990. – Vol.30, № 8. – P. 1551-1574.
7. Kiptily V.G., Borba D., Cecil F.E. et al. Fast ion JET diagnostics: confinement and losses // AIP Conference Proceedings **988**, Burning Plasma Diagnostics: An International Conference, Varenna, Italy, September 24-28. – 2007. Abstract Booklet. – P. 283-290.
8. Baeumel S., Werner A., Semler R. et al. Design of lost alpha particle diagnostics for JET // Fusion Enginnering and Design. – 2005. – Vol.74. – P. 853-857.
9. Garcia-Munoz M., Fahrbach H.-U., Zohm H. et al. Scintillator based detector for fast-ion losses induced by magnetohydrodynamic instabilities in the ASDEX upgrade tokamak // Review of Scientific Instruments. – 2009. – Vol.80, № 5. – P. 053503 (1-9).
10. Fisher R.K., Pace D.C., García-Munoz M. et al. Scintillator-based diagnostic for fast ion loss measurements on DIII-D // Review of Scientific Instruments. – 2010. – Vol.81, № 10. – P. 10D307 (1-3).
11. ITER Physics Expert Group on Energetic Particles, ITER Physics Basis Editors, ITER EDA et al. Chapter 5: Physics of Energetic Ions // Nuclear Fusion. – 1999. – Vol.39, № 12. – P. 2471-2495.
12. Fasoli A., Gormenzano C., Berk H.L. et al. Chapter 5: Physics of Energetic Ions // Nuclear Fusion. – 2007. – Vol.47, № 6. – P. S264-S284.
13. Shinohara K., Kurki-Suonio T., Spong D. et al. Effects of complex symmetry-breakings on alpha particle power loads on first wall structures and equilibrium in ITER // Nuclear Fusion. – 2011. – Vol.51, № 6. – P. 063028 (1-12).
14. Baranov Yu., Jenkins I., Kiptily V. et al. Evidence of anomalous losses of fusion products on JET // 37th EPS Conference on Plasma Physics, Dublin, Ireland, June 21 - 25. – 2010. – P5.141.
15. Yavorskij V.A., Schoepf K., Andrushchenko Zh.N. et al. Analytical models of axisymmetric toroidal magnetic fields with non-circular flux surfaces // Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2001. – Vol.43, № 3. – P. 249 - 269.
16. Yavorskij V., Baranov Yu., Goloborod'ko V. et al. Modelling of spatial and velocity distributions of diffusive fast ion loss in JET // 38th EPS Conf. on Plasma Phys., Strasbourg, France, June 27 – July 1. – 2011. – P4.029.
17. Rome J.A., Peng Y-K.M. The topology of tokamak orbits // Nuclear Fusion – 1979. – Vol.19, №.9. – P. 1193-1205.

PACS: 52.55.Hc, 52.55.Rk, 52.55.Dj

О ПАРАМЕТРАХ РЕАКТОРА СТЕЛЛАРАТОРА В УСЛОВИЯХ АМБИПОЛЯРНОСТИ НЕОКЛАССИЧЕСКИХ ТРАНСПОРТНЫХ ПОТОКОВ

В.А. Рудаков
Институт физики плазмы ННЦ ХФТИ,
Украина, 61108, Харьков, ул. Академическая, 1
E-mail: rudakov@kipt.kharkov.ua
Received 16 April 2012, accepted 19 May 2012

С использованием одномерного пространственно-временного численного кода рассчитаны параметры реакторов-стелларатров в условиях амбиполярности неоклассических транспортных потоков. Получены устойчивые режимы самоподдерживающейся термоядерной реакции при пеллет-инжекции DT топлива. Рассмотрены варианты магнитной системы с различными величинами винтовых гофров. Технические параметры реакторов представляются выполнимыми и имеют тепловую мощность, сравнимую с мощностью уже действующих ядерных реакторов.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: реактор-стелларатор, амбиполярное электрическое поле, неоклассический перенос, баланс энергии и частиц.

ABOUT PARAMETERS OF REACTOR-STELLARATOR IN THE CONDITIONS OF AMBIPOLARITY OF NEOCLASSICAL TRANSPORT FLUXES

V.A. Rudakov
Institute of Plasma Physics, NSC KIPT,
Ukraine, 61108, Kharkiv, Akademichna st. 1
Parameters of reactor-stellarator with the use of one-dimensional spatio-temporal numerical code are calculated in the conditions of ambipolarity of neoclassical transport fluxes. The steady-state modes of the self supported thermonuclear reaction are got at the pellet-injection of DT-fuel. The variants of the magnetic system with the different sizes of helical field's ripples are considered. The technical parameters of reactors appear executable and have fusion power, comparable with the power of already operating nuclear reactors.
KEYWORDS: reactor-stellarator, ambipolar electric field, neoclassic transport, power and plasma density balance

ПРО ПАРАМЕТРИ РЕАКТОРА СТЕЛАРАТОРА В УМОВАХ АМБІПОЛЯРНОСТІ НЕОКЛАСИЧНИХ ТРАНСПОРТНИХ ПОТОКІВ

В.А. Рудаков
Інститут фізики плазми ННЦ ХФТІ,
Україна, 61108, Харків, вул. Академічна, 1
З використанням одновимірного просторово-часового чисельного коду розраховані параметри реакторів-стелараторів в умовах амбіполярності неокласичних транспортних потоків. Отримані стійкі режими термоядерної реакції, що самопідтримується, в умовах пеллет-інжекції DT палива. Розглянуто кілька варіантів магнітної системи – з малими і великими гвинтовими гофрами. Технічні параметри реакторів представляються здійснимими і мають теплову потужність, порівнянну з потужністю ядерних реакторів, що вже діють.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: реактор-стеларатор, амбіполярне електричне поле, неокласичний перенос, баланс енергії і частинок.

До последнего времени магнитные ловушки стеллараторного типа остаются перспективной альтернативой тороидальным ловушкам типа токамак. Важным достоинством стеллараторов является их возможность обеспечить стационарное горение термоядерной плазмы. Кроме того, у стеллараторов оказывается меньше проблем с МГД неустойчивостями, которым больше подвержен токамак. К числу недостатков этих ловушек относят сложность магнитной системы и предсказанные теорией высокие плазменные потери. Возможно, поэтому экспериментальные исследования плазмы на стеллараторах не достигли такого прогресса, как исследования на токамаках. Дополнительным стимулом для более интенсивных исследований на токамаках стал международный проект экспериментального реактора ITER.

Действительно, высокий «горб» на кривой зависимости коэффициентов переноса от частоты в стеллараторе выглядит пугающе, если оценивать плазменные потери исходя из максимально возможных коэффициентов переноса, предсказываемых неоклассической теорией. На самом деле значения коэффициентов переноса у электронов и ионов плазмы одновременно максимальными не бывают, а потери плазмы, в силу ее квазинейтральности, определяются наиболее медленным компонентом. Диффузионные потоки выравниваются амбиполярным электрическим полем.

В задаче определения величины амбиполярного электрического поля и его влияния на удерживающие свойства ловушки было показано существование трех корней, один из которых неустойчив, а два другие соответствуют положительному и отрицательному знаку радиального электрического поля [1]. При этом, в зависимости от параметров плазмы, может реализоваться один корень. Возможность изменения знака поля на разных радиусах одного сечения тора также была показана в работе [1].

© *Rudakov V.A.*, 2012

Было выполнено много исследований по развитию теории неоклассического переноса в стеллараторах и сравнению ее результатов с экспериментом. В работе [2] проведено сравнение экспериментально измеренных профилей электрического поля в стеллараторе W7-AS и рассчитанных для случая реализации ионного (отрицательного) корня. В расчетах E_r использовались экспериментально измеренные профили плотности и температуры плазмы. Получено удовлетворительное согласие между теорией и экспериментом.

В работе [3] выполнено сравнение экспериментальных результатов, полученных на трех стеллараторах LHD, W7-AS и TJ-II с неоклассической теорией. Величины электрического поля рассчитывались с использованием DKES кода. Показано хорошее согласие результатов расчетов с экспериментом для установок LHD и TJ-II по крайней мере для основной части плазмы. В измерениях и расчетах электрического поля в условиях ЭЦР нагрева плазмы была показана реализация электронного корня при малой плотности плазмы ($n<3\ 10^{19}м^{-3}$) и ионного корня при $n> 4\ 10^{19}м^{-3}$ [4].

Определенное согласие эксперимента и неоклассической теории для центральной области плазменного шнура получено в установках LHD и TJ-II [5,6]. На периферии плазмы наблюдались аномальные потери, которые авторы исследований объясняют влиянием дрейфовых неустойчивостей.

Высокий уровень плазменных потерь в традиционных стеллараторах стимулировал поиск магнитных конфигураций, обеспечивающих близкие к токамакам удерживающие свойства. Эти свойства достигаются специальным выбором гармонического состава магнитного поля, когда эффективный гофр винтового поля существенно уменьшается. Такие конфигурации называют квазисимметричными. Строительство новых термоядерных установок стеллараторного типа, таких как: W7-X и CHS ведется с учетом идеи квазисимметрии. В работе [7] проведен анализ особенностей влияния радиального электрического поля на процессы переноса в квазисимметричных системах.

Опубликовано достаточно много работ по оценке возможных параметров термоядерных реакторов, основанных на стеллараторной конструкции. В первых проектах использовалось предположение о средних значениях параметров плазмы, (см., например, [8,9] и цитируемую там литературу) и выглядели они достаточно громоздкими [10].

Более современные проекты реакторов, как правило, учитывают особенности пространственного распределения параметров плазмы и радиальное электрическое поле. Такие проекты прорабатываются в Японии (серия FFHR [8]), в которых за основу принимается конструкция LHD. В развитие проекта установки с квазисимметричными свойствами W7-X в Германии прорабатывается проект реактора Helias [8,11]. В Окриджской национальной лаборатории (США) разрабатывается проект компактного реактора стелларатора ARIES [12]. Все названные проекты для прогнозирования параметров плазмы используют численные коды, учитывающие неоклассический перенос (иногда в сочетании с аномальным в области периферии плазмы) и амбиполярное электрическое поле. В качестве альтернативного варианта используются скэлинги, полученные в результате анализа многочисленных экспериментов на термоядерных установках. Отметим, что при малом радиусе плазмы размером около двух метров и при магнитном поле масштаба 5 Тл большой радиус тора в реакторах Helias и FFHR оказывается больше 15 м. Исключение составляет реактор с квазисимметричным магнитным полем ARIES, где R примерно равен 7 м.

Следует отметить существование определенных сложностей в получении самосогласованных решений системы уравнений, описывающих стационарное устойчивое горение термоядерной плазмы в реакторе. Во-первых, сама система уравнений оказывается достаточно сложной даже для численного решения, так как коэффициенты переноса в уравнениях диффузии и теплопроводности являются нелинейными функциями параметров плазмы и поэтому возникает проблема устойчивости численных решений. Во-вторых, обеспечение стационарности горения требует включения каким-то образом распределенных источников частиц и энергии. В отсутствие таковых плазма распадется со временем жизни частиц в течении нескольких секунд. Поэтому численные коды, например код DKES (Drift kinetic equation solver)[13], вычисляют амбиполярное электрическое поле при заданных профилях плотности и температуры плазмы, что может далеко не соответствовать реальному состоянию параметров плазмы в реакторе. Так, в работе [14] исследуются параметры реактора с тремя различными распределениями плотности плазмы по радиусу: остро пикированного, плоского и с провалом в центре плазмы. Получены решения для распределений электрического поля при реализации как электронного, так и ионного корней. Остается открытым вопрос о том, как организовать заданные распределения плотности плазмы.

Радиальные распределения параметров плазмы при выполнении условия амбиполярности потоков получены в [15]. При этом сделана попытка учесть влияние как неоклассических, так и не связанных с неоклассикой потерь. В результате для получения самоподдерживающегося горения в реакторе с пропорциями стелларатора LHD и при большом радиусе тора R=15м необходимо сделать предположение о некотором коэффициенте улучшения удержания.

Заметим, что при подобных расчетах имеет место большая доля неопределенности в прогнозируемых результатах. В частности, аномальные потери, связанные с дрейфовыми неустойчивостями могут быть незначительными в условиях термоядерной плазмы и высокого шира. Кроме того, многочисленные исследования неоклассических потерь в стеллараторных системах не дают однозначного заключения о

величине транспортных потоков в одних и тех же условиях. Так, если в работах [16] и [17] (при приведении выражений для потоков к одним единицам) имеет место совпадение не только по виду функциональных зависимостей, но и по численным коэффициентам у потоков электронного компонента, то различие в величине потоков ионного компонента составляет почти целый порядок. Следует также учитывать большой разброс в возможных параметрах конкретной реализации реактора, таких как: шир, величина магнитного винтового гофра, способы инжекции топлива и нагрева плазмы.

Целью данной работы было изучить возможности создания реактора на основе стеллараторной системы, в котором осуществляется самоподдерживающаяся реакция синтеза дейтериево-тритиевой плазмы при неоклассических потерях с обеспечением равенства диффузионных потоков электронного и ионного компонентов за счет амбиполярного электрического поля. В цели работы входила также задача выбрать параметры реактора, которые были бы интересны с точки зрения технической реализации предлагаемых вариантов.

В работе использовался пространственно-одномерный численный код, разработанный автором настоящей публикации. В отличие от DKES кода здесь решается система уравнений с заданными начальными и граничными условиями, в результате чего система самосогласованно эволюционирует к стационарному состоянию, которое поддерживается моделью инжекции топливных таблеток. Для расчетов были приняты транспортные потоки, полученные в работе [16]. В последующих разделах описаны: система уравнений и численная модель, результаты расчетов и представлено обсуждение полученных результатов.

СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ И ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

Решалась система, в которой первые два уравнения представляют собой пространственно одномерные уравнения теплопроводности для электронов (1) и ионов (2) плазмы

$$\frac{3}{2}\mathrm{N}\frac{\partial T_\mathrm{e}}{\partial t} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\Pi_\mathrm{e} + \frac{K_f N^2 \langle \sigma v \rangle}{4} E_\alpha + P_\mathrm{h} - Q_\mathrm{ei} - Q_\mathrm{b} - Q_\mathrm{c}, \tag{1}$$

$$\frac{3}{2} N \frac{\partial T_\mathrm{i}}{\partial t} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\Pi_\mathrm{i} + Q_\mathrm{ei}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} rS_\mathrm{i} + S_\delta. \tag{3}$$

Третье уравнение является уравнением диффузии. Первый член в правой части уравнений (1) и (2) выражен через потоки тепла, которые были получены в работе [16]. В уравнении (1) второй член справа описывает нагрев электронов за счет диссипации энергии рождаемых при синтезе α–частиц. Предполагается равновеликое содержание дейтерия и трития в плазме реактора. Коэффициент K_f определяет долю энергии, передаваемую электронам. Считается, что 5% энергии α–частиц безвозвратно теряется, а потоком тепла от них в ионы пренебрегается вследствие его малости, поэтому в расчетах принимался K_f=0,95. Следующие члены в правой части уравнения (1) означают, соответственно: P_h - нагрев от внешних источников, Q_ei - теплообмен с ионами, Q_b - тормозное излучение и Q_c - циклотронное. Заметим, что циклотронное излучение хорошо отражается от стенок, поэтому в расчетах коэффициент отражения принят равным 0.95. Таким образом, только 5% мощности циклотронного излучения поглощается стенками реактора, а остальная часть диссипирует в плазме. Предполагается, что нагрев ионов происходит за счет теплообмена с электронами, поэтому в уравнении для теплопроводности ионов присутствует только Q_ei со знаком плюс. В уравнениях (1,2) отсутствует член, учитывающий энергообмен между электронами и ионами плазмы, вызываемый радиальным электрическим полем. При небольших величинах градиента потенциала влияние этого члена оказывается меньше теплообмена за счет кулоновских столкновений. Результаты расчетов показали, что в районе половины радиуса плазменного шнура такое предположение нарушается за счет относительно больших величин E_r. Некоторым оправданием результатов работы может служить то, что в периферийной достаточно широкой области плазмы величина электрического поля существенно уменьшается. В работе пренебрегается также присутствием примесей, уровень которых будет достаточно малым в реакторе с действующим дивертором. В данной задаче выход системы в режим самоподдерживающегося горения обеспечивается начальными условиями, поэтому источники внешнего нагрева были исключены P_h=0.

Уравнение для плотности (3) содержит в правой части, кроме диффузионного члена, член с источником S_δ, с помощью которого в расчетах поддерживалась плотность плазмы постоянной. Точнее, восполнение плотности, уменьшающейся вследствие диффузионных потерь, поддерживается инжекцией топливных таблеток.

Потоки тепла и частиц [16] определяются уравнениями (4)-(7).

$$П_{\mathrm{i}} = -1{,}910^{20}\,\frac{N^{3/2} r T_{\mathrm{i}}^{3/4}}{B^{1/2} A^2}\left(\frac{T_{\mathrm{i}}}{re\left|\Phi' + \varepsilon_0\right|}\right)^{3/2}(A_{\mathrm{i}} + 3{,}78B_{\mathrm{i}}),\ \text{кэВ см}^{-2}\text{сек}^{-1}, \tag{4}$$

$$П_{\mathrm{e}} = -2{,}2810^{22}\,\frac{I_\alpha \varepsilon_{\mathrm{h}}{}^{3/2} T_{\mathrm{e}}{}^{9/2}}{R_0{}^2 B^2}(A_{\mathrm{e}} + 5{,}98B_{\mathrm{e}}), \tag{5}$$

$$S_{\mathrm{i}} = -6{,}710^{18}\,\frac{rN^{3/2}}{T_{\mathrm{i}}^{1/4} B^{1/2} A^2}\left(\frac{T_{\mathrm{i}}}{re\left|\Phi' + \varepsilon_0\right|}\right)^{3/2}(A_{\mathrm{i}} + 2{,}83B_{\mathrm{i}}), \tag{6}$$

$$S_{\mathrm{e}} = -4{,}5610^{20}\,\frac{\varepsilon_{\mathrm{h}}{}^{3/2} T_{\mathrm{e}}{}^{7/2} I_\alpha}{R_0{}^2 B^2}(A_{\mathrm{e}} + 4{,}97B_{\mathrm{e}}),\ \text{см}^{-2}\text{сек}^{-1}, \tag{7}$$

в которых градиентные члены параметров имеют вид:

$$A_{\mathrm{e}} = \frac{N'}{N} - \frac{e\Phi'}{T_{\mathrm{e}}} - \frac{3}{2}\frac{T_{\mathrm{e}}'}{T_{\mathrm{e}}} \qquad B_{\mathrm{e}} = \frac{T_{\mathrm{e}}'}{T_{\mathrm{e}}}, \tag{8}$$

$$A_{\mathrm{i}} = \frac{N'}{N} + \frac{e\Phi'}{T_{\mathrm{i}}} - \frac{3}{2}\frac{T_{\mathrm{i}}'}{T_{\mathrm{i}}} \qquad B_{\mathrm{i}} = \frac{T_{\mathrm{i}}'}{T_{\mathrm{i}}}. \tag{9}$$

Заметим, что ионные потоки имеют резонансный характер в области нуля градиента электрического потенциала Φ'. Здесь также аспектовое отношение, величина винтового магнитного гофра, плотность плазмы, магнитное поле, температуры, большой и малый (текущий) радиусы плазмы соответственно представлены в традиционных обозначениях: $A, \varepsilon_{\mathrm{h}}, N, B, T, R, r.$ Величина I_α определена в [16] и учитывает особенности винтовой структуры стелларатoрного магнитного поля. В настоящей работе предполагалась структура магнитного поля, подобная LHD с $I_\alpha = 0{,}7.$ Согласно [16] величина ε_0 в выражении (6) определяет конвективный поток плазмы при равном нулю E_r .Система уравнений (1 – 3) дополнялась граничными (10) и начальными (11) условиями:

$$A_{j,x=0} = 0, B_{j,x=0} = 0\ ,\ T_{j,x=1} = \delta_{\mathrm{T}}, N_{j,x=1} = \delta_{\mathrm{n}}, \tag{10}$$

$$T_{j,t=0} = T_{j,0}(1 - x^{\mathrm{n}}) + \delta_{\mathrm{T}}, N_{j,t=0} = N_0(1 - x^{\mathrm{n}}) + \delta_{\mathrm{n}}, \tag{11}$$

где индекс j обозначает сорт частиц, x – нормированный на единицу текущий радиус плазмы. В большинстве расчетов показатель степени n при x в начальных условиях принимался равным 2. Величины δ_{n} и δ_{T} – определяют значения плотности плазмы и температуры на границе плазменного шнура. В данных расчетах они принимались равными нулю.

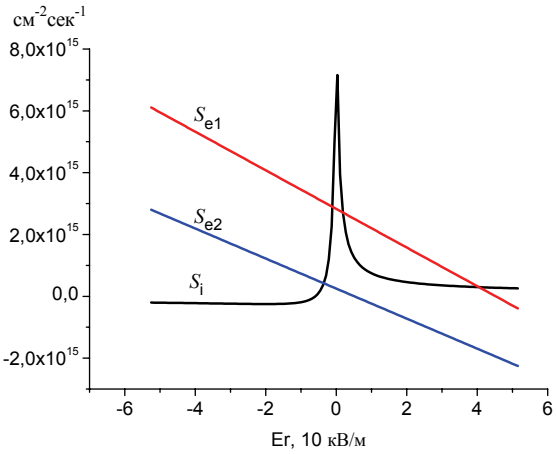


Рис. 1. Зависимости диффузионных потоков ионов S_{i} и электронов S_{e} от радиального электрического поля для двух значений радиуса плазмы.

В численном коде решение системы уравнений (1-3) начиналось с поиска величины электрического поля из уравнения равенства ионного и электронного потоков: $S_e = S_i$. При этом область поиска корней разбивалась на 130 частей. В общем случае решение имеет три корня [1] (рис. 1), однако при относительно малых величинах диффузионного потока электронов может реализоваться только один корень, соответствующий отрицательному значению электрического поля. Рис. 1 имеет иллюстративный характер, поэтому вторая кривая для потока ионов не показана. Расчеты показали, что на разных участках радиуса плазмы имеют место решения с одним и с тремя корнями одновременно. Это обстоятельство затрудняет выбор решения, которое может реализоваться в реакторе. В данной работе предполагалось, что электрическое поле во всех случаях соответствует левому (ионному) корню, дающему его отрицательные значения (рис. 1). Радиус плазмы разбивался на сто узлов, на каждом из которых вычислялось электрическое поле, величины плотности и температуры компонентов плазмы. Шаг интегрирования по времени выбирался обычно порядка 10^{-5} секунды.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В принятой модели переноса тепловые и диффузионные потоки электронного компонента плазмы зависят от величины эффективного винтового гофра ε_h. Ее значение в различных экспериментальных установках колеблется в широких пределах [18]. Даже в условиях одной установки ε_h может существенно меняться в зависимости от величины вертикального магнитного поля и давления плазмы β [15]. Анализ поведения модуля магнитного поля вдоль силовой линии в стеллараторе Ураган-2М позволил установить следующую зависимость ε_h от радиуса плазмы:

$$\varepsilon_h = \varepsilon_{h0} + 0{,}22 r^{0{,}87}, \qquad (12)$$

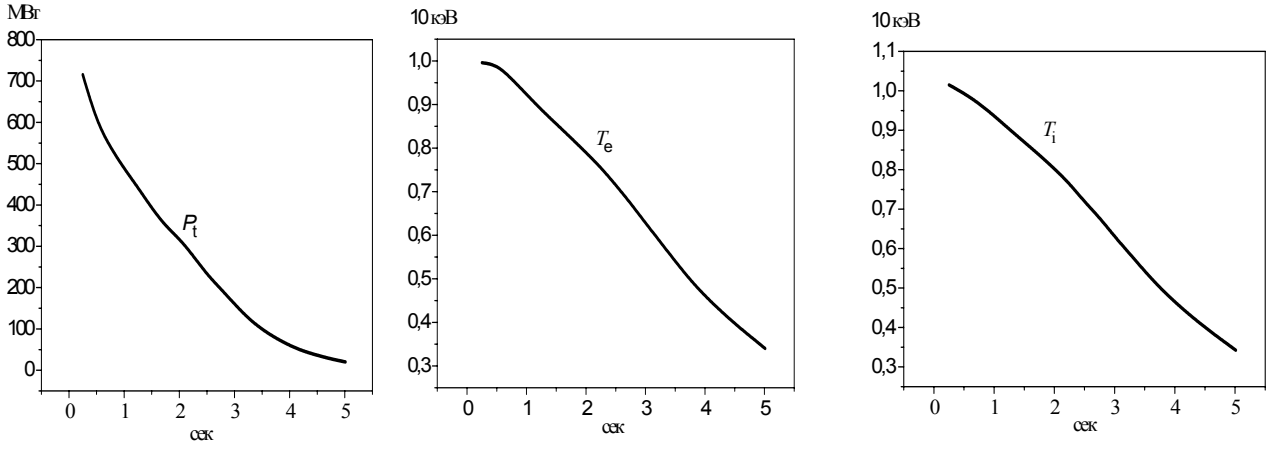
где $\varepsilon_{h0} \approx 0{,}03$, что на границе плазмы дает $\varepsilon_{h\max}$=0,25. В стеллараторе LHD при смещении магнитной оси на радиус $R = 3{,}53$ м эффективный гофр на границе плазмы равен 0,05 [18]. В настоящей работе в разных расчетах используется выражение (12) так, чтобы получить на границе плазмы максимальные величины эффективного гофра: 0,25 и 0,13. Для случая $\varepsilon_{h\max}$=0,06 использовалась величина ε_{h0}=0,01.

Принятая в численном коде модель инжекции топливных таблеток позволяет осуществлять инжекцию в любую область плазменного шнура с заданным пространственным распределением. В работе применялась треугольная модель абляции: $\delta n = n_p(1 - |a_2 - x|/\Delta)$, где a_2 -радиус центра инжекции, а Δ - полуширина области инжекции. Заметим, что в данном случае для плотности плазмы используется обозначение n. Величина таблетки составляла 1% от полного числа частиц в плазме реактора. Таким образом, при уменьшении числа частиц в плазме ниже 0.99 в плазму вбрасывается очередная таблетка. При этом учитываются затраты энергии на нагрев инжектируемых частиц, а потерями энергии на испарение таблетки пренебрегается вследствие их малости.

Во всех расчетах основное магнитное поле принималось равным 5 Тл и малый радиус плазмы – 2 м. Задача сводилась к выбору среднего значения плотности плазы и нахождению большого радиуса тора, при котором осуществляется самоподдерживающаяся реакция. Начальные условия принимались такими, чтобы внутри плазмы вследствие синтеза выделялась достаточная для поддержания стационарного горения мощность. В таком случае отсутствует необходимость в дополнительном нагреве плазмы внешними источниками.

После начала счета с течением времени формы пространственных распределений плотности, температур и амбиполярного электрического поля перестраиваются к стационарным состояниям. При заданных начальных размерах реактора, магнитном поле, винтовом гофре и среднем значении плотности плазмы независимо от начальных распределений остальных параметров, реактор выходит в режим зажигания на одну и ту же форму пространственных распределений параметров и на одну и ту же мощность синтеза. Такой результат являлся дополнительным аргументом в доказательство верности численного решения.

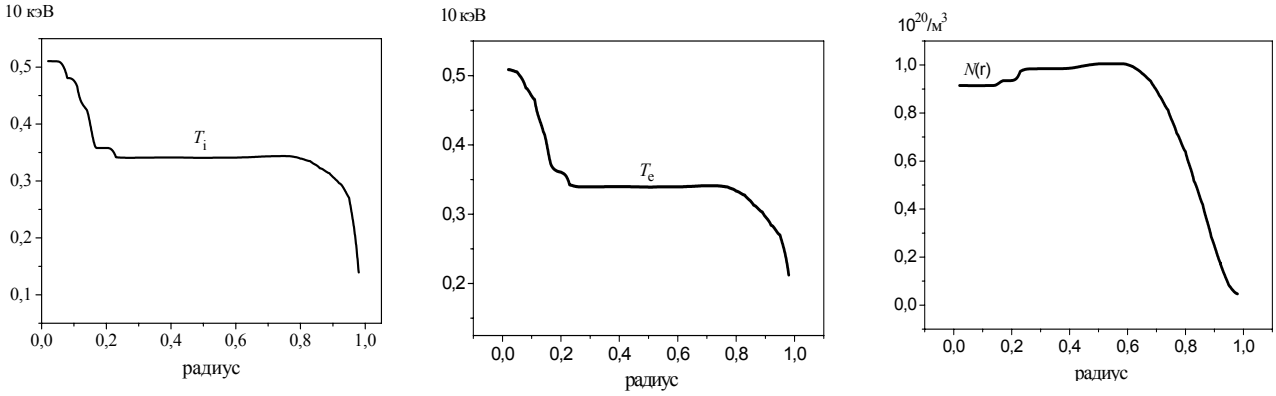
В процессе расчетов выяснилось, что при инжекции топлива в периферийные области плазменного шнура образуются плоские распределения плотности с большим градиентом вблизи края плазмы. Такая перестройка сопровождается высокими потерями плазмы и для осуществления самоподдерживающегося горения необходимы большие величины главного радиуса тора или удерживающего магнитного поля. На рисунках 2 и 3 показано одно из таких решений при инжекции топлива с максимумом в области 0,7 малого радиуса плазмы.



а *б* *с*

Рис 2. Поведение во времени средних значений параметров реактора в режиме затухания:
а – тепловой мощности реактора, *б* – температуры электронов, *с* – температуры ионов. *B*=5 Тл, *R*=20м, *a* =2м, $T_{i,0}$=20, $T_{e,0}$=14 кэВ, N_0 =1,310^{20} м$^{-3}$, $\varepsilon_{h\max}$=0,06.

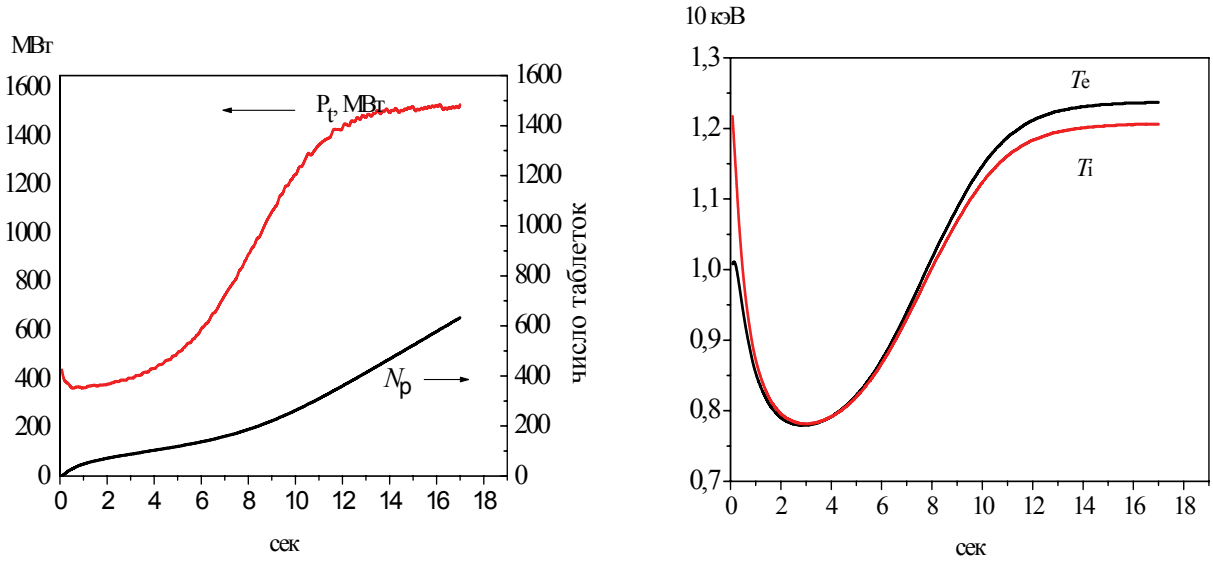
В данном случае в качестве начальных условий были приняты R=20м, $\varepsilon_{\mathrm{h\,max}}$=0,06 и средние значения $\langle T_{\mathrm{i}} \rangle = 8{,}5\text{кэВ}, \langle T_{\mathrm{e}} \rangle = 6{,}5\text{кэВ}, \langle \mathrm{N} \rangle = 6{,}510^{19}\ /\text{м}^3$. При таких условиях полная тепловая мощность DT – синтеза составляет 700 МВт. Пятая часть этой мощности приходится на α–частицы, энергия которых идет на нагрев плазмы. Однако в этом случае режим самоподдерживающегося горения не устанавливается, и плазма быстро остывает с одновременным спаданием мощности синтеза.



а *б* *с*

Рис 3. Пространственные распределения параметров плазмы при инжекции топлива на радиус r=0,7a.
Температура ионов – a, температура электронов – $б$, плотность плазмы – c. B=5 Тл, a =2м, R=20м, $T_{\mathrm{i},0}$ =17, $T_{\mathrm{e},0}$ =14 кэВ,
N_0 =1,310^{20} м$^{-3}$, $\varepsilon_{\mathrm{h\,max}}$ = 0,06, t=5,63 сек.

Более интересным оказался режим, при котором инжекция топлива осуществлялась в область центра плазменного шнура, где распределение плотности в результате инжекции таблетки задавалось выражением: $\delta n = n_{\mathrm{p}}(1 - r/\Delta)$. При таких расчетах максимум испарения частиц приходился на центр плазмы, а ширина области испарения варьировалась между полным размером малого радиуса и его половиной. Было установлено, что с уменьшением размера области испарения таблетки образуются обостренные профили плотности плазмы и реактор переходит в режим самоподдерживающейся реакции при существенно меньших величинах главного радиуса тора. Если при инжекции топлива в периферийную область плазмы режим горения не устанавливался даже при R=20 метров, то инжекция таблеток в центр плазмы с шириной области испарения в половину радиуса плазмы позволяет осуществить горение при R=10 м. На рисунках 4 – 6 показаны результаты таких расчетов.

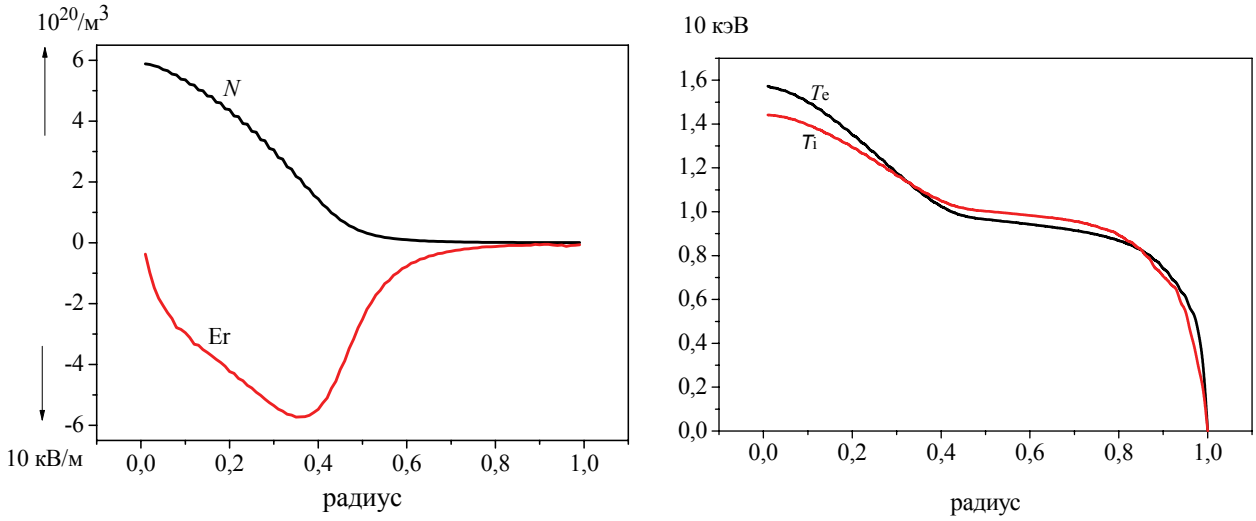


а *б*

Рис. 4. Поведение во времени параметров реактора в процессе перехода к стационарному горению:
a - тепловой мощности реактора P_{t} и числа топливных таблеток N_{p}, $б$ - средних значений температуры электронов T_e и ионов плазмы T_i. B=5 Тл, R=10м, a =2м, $T_{\mathrm{i},0}$ =20, $T_{\mathrm{e},0}$ =14 кэВ, N_0 =1,310^{20} м$^{-3}$.

Тепловая мощность реактора и температуры электронов и ионов плазмы выходят на максимальные постоянные значения примерно к пятнадцатой секунде после начала счета. При этом полная тепловая мощность реактора оказывается около полутора ГВт, а средние значения температур имеют величину около 12 кэВ с небольшим превышением T_e над T_i (рис.4). Заметим, что в процессе перестройки профилей параметров плазмы тепловая мощность реактора оказывается меньше 400 МВт. В это время плазма поглощает менее 80 МВт мощности DT-синтеза и этого оказывается достаточно для последующего перехода в режим горения. На рисунке 4 показана также зависимость числа инжектированных топливных таблеток от времени, что позволяет оценить диффузионное время удержания частиц плазмы.

На рисунке 5 представлены пространственные распределения плотности плазмы, электрического поля и температур компонентов плазмы. В центре плазмы ее плотность достигает величины N=6$10^{20}$ м$^{-3}$, а за пределами области инжекции топлива величины концентрации плазмы и электрического поля существенно уменьшаются. Уменьшение концентрации плазмы можно объяснить отсутствием источников частиц в этой области. С уменьшением плотности плазмы растет коэффициент диффузии электронов вследствие обратной зависимости от частоты столкновений. В результате увеличивается поток *Se* и точка равенства потоков на их зависимости от электрического поля смещается в сторону малых величин электрического поля (рис.1). Это обстоятельство объясняет одновременное уменьшение плотности плазмы и электрического поля.



а *б*

Рис.5. Пространственные распределения плазменных характеристик в процессе стационарного горения:

а - плотности плазмы N и электрического поля $E_г$, *б* - температуры ионов T_i и электронов T_e. R=10 м, $T_{i,0}$ =20,

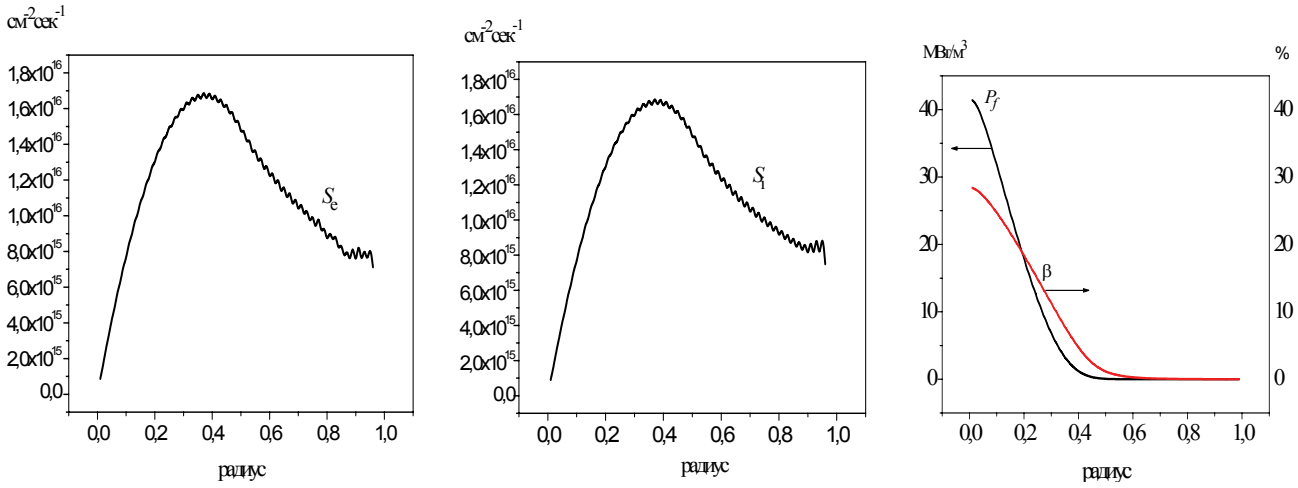
$T_{e,0}$ =14 кэВ, N_0 =1,3$10^{20}$ м$^{-3}$, $\varepsilon_{h\max}$ =0,06.

Заметим также, что значительное уменьшение плотности плазмы не приводит к выходу электронов из режима обратной зависимости коэффициента диффузии от частоты столкновений. Одновременно с уменьшением частоты столкновений и электрического поля в область более низких частот смещается супербанановый максимум на кривой зависимости коэффициентов переноса от частоты столкновений вследствие того, что его положение находится в пропорциональной связи с частотой электрического дрейфа.

Профили температур оказываются не такими острыми, как профиль плотности. В связи с тем, что основная часть энергии α–частиц передается электронам, они имеют более высокую температуру в центре плазмы по сравнению с ионами. В периферийной области радиуса плазмы температуры обоих компонентов почти не отличаются, что, по-видимому, является следствием более высокого коэффициента теплопроводности у ионов по сравнению с электронным.

В результате высоких значений плотности и температуры ионов в центре плазмы удельная мощность синтеза там достигает величины $P_f \approx 40$ МВт/м^3 (рис. 6).

В той же области локальная величина β оказывается вблизи 30%, хотя ее среднее значение не превышает 3%. Обеспечить удержание плазмы и сохранение магнитной конфигурации с таким локальным значением β может оказаться сложной проблемой. Как и следовало ожидать, диффузионные потоки плазмы во внешней половине плазменного шнура убывают пропорционально 1/r, обеспечивая постоянство полного суммарного потока в отсутствие источников плазмы в этой области. Энергетическое время жизни в рассмотренных вариантах реактора колеблется в пределах между 0,8 и 1 секунды. Время жизни частиц оказывается примерно в два раза больше. При принятом в расчетах объеме топливной таблетки (1% от полного числа частиц в плазме) в условиях стационарного горения потребуется вбрасывать 50-60 таблеток в секунду.



а *б* *в*

Рис.6. Зависимости от радиуса плазменных потоков и локального энерговыделения в режиме стационарного горения: *а* -диффузионного потока электронов, б - потока ионов; *в* - локального энерговыделения и величины β. R=10 м, Δ=0,5.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты расчетов параметров реакторов при различных значениях величины винтовых магнитных гофров сведены в таблицу. Приведенные в таблице варианты, для которых использовались обозначения: RSt-1, RSt-2…, рассчитывались при одних и тех же величинах плотности плазмы, магнитного поля и малого радиуса плазмы. Во всех случаях инжекция топлива осуществлялась в центр плазмы с шириной области испарения таблетки, равной половине радиуса. Размеры реактора (большой радиус тора) существенно зависят от величины ε_{h}. Однако и при максимальных величинах винтового гофра энергетические параметры реактора не выходят за рамки разумных, т.е., допускают возможность реализации. Максимальная тепловая мощность реактора 7,2 ГВт, которая получена при промежуточном значении $\varepsilon_{\text{h max}}$=0,13 и при R=30 м, может быть понижена уменьшением плотности плазмы, если кажется слишком великой. Это же относится и к случаю с R=20 м. Условия для удержания плазмы здесь обеспечены с большим запасом и поэтому средние значения температуры выходят на уровень 20 кэВ. Учитывая то, что уже сегодня в мире работают АЭС с тепловой мощностью, превышающей 4 ГВт, приведенные в таблице варианты с максимальными мощностями не кажутся фантастическими. Что же касается варианта с R=10 м, то он конкурентно способен проектам реакторов на основе системы токамак. При этом за стелларатором сохраняется его основное преимущество: возможность стационарного самоподдерживающегося горения.

Таблица

Параметры реакторов

	RSt-1	RSt-2	RSt-3	RSt-4	RSt-5	RSt-6	RSt-7
Удерживающее магнитное поле –B,Тл	5	5	5	5	5	5	5
Главный радиус тора – R, м	30	30	25	20	15	12	10
Малый радиус плазмы – a, м	2	2	2	2	2	2	2
Средняя плотность – $<N>$,10^{20}/м^3	0,64	0,64	0,64	0,64	0,64	0,64	0,64
Температура электронов – T_e, кэВ	13,5	17,6	15,7	20,8	17,4	14,7	12,37
Температура ионов – T_i, кэВ	13	16,4	14,9	18,7	16,2	14,1	12,06
Винтовой гофр на границе плазмы – ε_{hmax}	0,25	0,13	0,13	0,06	0,06	0,06	0,06
Полная тепловая мощность – P_t, МВт	4800	7200	5250	6200	3900	2500	1500
Нагрузка на стенку – Q_w, МВт/м^2	2	3	2,62	3,87	3,25	2,6	1,87
Давление плазмы – $<\beta>$, %	2,7	3,5	3,1	4	3,45	2,95	2,49
Энергетическое время жизни – τ_E, сек	1,01	0,87	0,9	0,78	0,8	0,85	0,97
Время удержания частиц – τ_n, сек	1,85	1,5	1,6	1,35	1,6	1,5	1,7

Отметим также, что во всех рассмотренных вариантах полная тепловая нагрузка на первую стенку реактора (Q_w=Pt/S, где S – площадь поверхности первой стенки) не превышает 4 МВт/м^2. При DT синтезе 80% несут нейтроны и 20% – α-частицы. Поэтому только пятая часть тепловой энергии реактора может выделиться на поверхности первой стенки. Остальная энергия несется нейтронами и поглощается в глубине бланкета. В

результате энерговыделение на первой стенке не превысит 0,8 МВт/м^2, что примерно соответствует величине тепловой нагрузки на поверхность твэла в современных атомных реакторах типа ВВЭР.

Обратим внимание еще на одну особенность рассмотренных вариантов реактора – это очень низкие плотности плазмы в периферийной области плазменного шнура. Такое возможно, если вся вышедшая за пределы объема удержания плазма удаляется в дивертор. В ныне действующих стеллараторных установках потерянные из объема удержания частицы остаются в камере и возвращаются в плазму, создавая условия, подобные случаю инжекции топлива в область периферии плазменного шнура. Возможно, поэтому на стеллараторах пока не удается установить соответствие между предсказаниями теории переноса и экспериментом в приграничной области плазмы.

В проведенном исследовании в качестве основного механизма потерь плазмы приняты результаты неоклассической теории переноса. Может возникнуть сомнение в справедливости такого подхода, так как экспериментальные исследования далеко не всегда подтверждают выводы этой теории. Как правило, в области периферии плазменного шнура превалируют иные механизмы переноса. Оправданием данной работы может служить то обстоятельство, что уровень параметров плазмы в современных стеллараторах еще далек от термоядерных. Для достижения реакторных режимов потребуется увеличить температуру плазмы в несколько раз. Заметим, что величины тепловых и диффузионных потоков в неоклассической теории существенно зависят от температуры. Например, двукратное увеличение температуры электронов при равных прочих параметрах вызовет более чем двадцатикратное увеличение потока тепла вследствие зависимости от температуры $\sim T_e^{9/2}$. В таком случае иные механизмы потерь могут потерять свое значение.

В результате работы показано, что даже в отсутствие квазисимметрии путем инжекции топлива в центральную область плазменного шнура можно достичь режима поджига в реакторе-стеллараторе с размерами, сравнимыми с размерами реакторов, проектируемых на основе системы токамак. По мнению автора работы этот результат является существенно новым.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mynick H.E., Hitchon W.N.G. Effect of the ambipolar potential on stellarator confinement // Nucl. Fusion. – 1983. - Vol.23. – P.1053.
2. Ehmler H., et. al. Experimental check of neoclassical predictions for the radial electric field in a stellarator // Nucl. Fusion. – 2003. – Vol. 43. – P.L11-L13.
3. Turkin Y., Beider C.D., Maasberg H. et al. Neoclassical transport simulations for stellarators // Physics of Plasmas. – 2011. – Vol.18. – 022505.
4. Baldzuhn J., et. al. Measurements and calculation of the radial electric field in the stellarator W7-AS // Plasma Phys. Control. Fusion. – 1998. – Vol. 40. – P. 967.
5. Olaya J.G. Study of electron heat transport in LHD and TJ-II // PhD thesis presented for degree of doctor, Universitat Politechnica de Catalunya, 188 p.
6. Wakasa A., Murakami S., Oikawa S. Study of Neoclassical Transport in LHD Plasmas by Applying the DCOM/NNW Neoclassical Transport Database // Plasma and Fusion Research. - 2008. – Vol. 3. - P.1030.
7. Landreman M. and Catto P. Effects of the radial electric field in a quasisymmetric stellarator // Plasma Phys. Control. Fusion. – 2011. – Vol. 53. – P.015004.
8. Beidler C.D., Harmeyer E., Hernegger F.et. al. Stellarator Fusion Reactors - an Overview // J. Plasma Fusion Res. SERIES.– 2002. – Vol. 5. – P.149-155.
9. Volkov E.D., Georgievskij A.V., Kuznetsov Y.K. et. al. Fundamental conceptions of a reactor-torsatron with an additional longitudinal field // Proceedings of the Fourth technical committee meeting and workshop on fusion reactor design and technology, Yalta, 26 May-6 June 1986, VIENNA, IAEA. – 1987. – Vol.1. – P. 393.
10. Bykov V.E., Volkov E.D., Georgievskiy A.V. i dr. Vybor fizicheskikh parametrov reaktora-torsatrona // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Termoyadernyy sintez.– 1980. – Vyp.2(6). – C. 21-28.
11. Wobig H., Andreeva T., Beidler C.D. et. al. Development of Wendelstein Line towards a Helias Reactor // 36-th EPS Conference on Plasma Phys., Sofia, June 29 – Jully 3. – 2009. – ECA. – Vol. 33E. – P.4.192.
12. Najmabadi F., Rafray A.R., Long-Poe Ku, Lyon J. ARIES team Optimization of compact stellarator configuration as fusion devices // Physics of Plasmas. –2006. – Vol. 13. – 056123.
13. Hirshman S.P., Shaing K.C., Van Rij W.I., Beasley C.O., Crume E.C. Plasma transport coefficients for nonsymmetric toroidal confinement systems// Phys Fluids. –1986. – Vol. 29. –P. 2951.
14. Painter S.L. and Lyon J.F. Transport analysis of stellarator reactors // Nucl. Fusion. – 1991. –Vol.31. – P. 2271.
15. Yamazaki K., Mikhailov M., Sakakibarac S., Okamura S., Garsia J., Dies J., Funaba H., Amano T. Neoclassical and Anomalous Transport Analysis of Helical Reactor Plasmas // J. Plasma Fusion Research. – 2004. – Series 6. – P. 357-361.
16. Kovrizhnykh L.M., The Energy Confinement Time in Stellarators // Nucl. Fusion. – 1984. – Vol. 24. – P. 435.
17. Ho D.D.-M., Kulsrud R.M. Neoclassical Transport in Stellarators // Preprint PPPL. – Sept.1985. –№ 2253.
18. Murakami S., Wakasa A., Maaβberg H., Beidler C.D., Yamada H., Watanabe K.Y. and LHD Experimental Group Neoclassical Transport Optimization of LHD // Nucl. Fusion. –2002. – Vol. 42. – P. L19-L22.

УДК 532.5

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ ДРЕЙФОВЫХ КОЛЕБАНИЙ В НЕОДНОРОДНОЙ ЗАМАГНИЧЕННОЙ ПЛАЗМЕ СО СТОЛКНОВЕНИЯМИ

А.А. Водяницкий
ИТФ им. Ахиезера ННЦ Харьковский физико-технический институт
Академическая 1, Харьков, 61108, Украина
E-mail: vodyanitskii@mail.ru, vodyanitskii@kipt.kharkov.ua
Received 19 April 2012, accepted 18 May 2012

Исследованы нелинейные колебания замагниченной неоднородной плазмы со столкновениями. Получено основное нелинейное уравнение для волн и рассмотрена регуляризация теории возмущений. Она состоит во включении диссипативных членов в нормальные функции и в учете их производных по неоднородной координате. Эта процедура снабжает решающими нелинейностями, определяющими нелинейную стабилизацию дрейфово-диссипативной неустойчивости и аномальный перенос плазмы.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: нелинейная теория, замагниченная плазма, дрейфово-диссипативная неустойчивость.

РЕГУЛЯРІЗАЦІЯ НЕЛІНІЙНОЇ ТЕОРІЇ ДРЕЙФОВИХ ХВИЛЬ У НЕОДНОРІДНІЙ ЗАМАГНІЧЕНІЙ ПЛАЗМІ ІЗ ЗІТКНЕННЯМИ

О.А. Водяницький
ІТФ им. Ахієзера ННЦ Харківський фізико-техничний інститут
Академічна 1, Харків, 61108, Україна

Досліджено нелінійні коливання неоднорідної замагніченої плазми при наявності зіткнень. Одержано основне нелінійне рівняння для хвиль і розглянуто регуляризацію теорії збурень. Вона полягає у включенні дисипативних членів в нормальні функції і в урахуванні їх похідних по неоднорідній координаті. Ця процедура забезпечує вирішальними нелінійностями, які визначають нелінійну стабілізацію дрейфово-дисипативної нестійкості та аномальне перенесення плазми.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: нелінійна теорія, замагнічена плазма, дрейфово-дисипативна нестійкість.

REGULARIZATION OF THE NONLINEAR THEORY OF DRIFT WAVES IN THE INHOMOGENEOUS MAGNETIZED COLLISIONAL PLASMA

A.A. Vodyanitskii
Akhiezer Institute for Theoretical Physics NSC KIPT
1 Akademicheskaya, Kharkov, 61108, Ukraine

Nonlinear oscillations of the magnetized non-uniform collisional plasma are studied. Basic nonlinear equation is got for waves and regularization of the theory of perturbation is considered. It consists in the inclusion of dissipative terms into normal functions and in an account of their derivatives with respect to the the non-unifrm coordinate This procedure supplies with the crucial non-linearities which determine the nonlinear stabilization of drift-dissipative instability and anomalous transfer of plasma.
KEYWORDS: nonlinear theory, magnetized plasma, drift-dissipative instability.

Целью работы является разработка теории возмущений, обеспечивающей стабилизацию нелинейной дрейфово-диссипативной структуры с аномальным переносом неравновесной замагниченной плазмы. Дрейфово-диссипативная неустойчивость в линейной теории полностью ионизованной неоднородной плазмы, помещенной в магнитное поле, предсказана в работе [1]. Эта неустойчивость была призвана объяснить повышенную утечку плазмы поперек магнитного поля, описываемую коэффициентом диффузии Бома [2]. В работе Розенблюта с соавторами [3] указывалось на важную роль эффектов конечного ларморовского радиуса ионов, что способствовало исследованию устойчивости желобковых и дрейфовых мод.

Отмеченные работы привели к быстрому прогрессу в исследовании линейной теории устойчивости дрейфовых волн [4-7]. Были рассмотрены новые факторы, влияющие на неустойчивость. В работах [5], [6] и [8] исследовались механизмы локализации колебаний и их стабилизация магнитным широм (см. также ссылки в книге [9]). Однако, как показано в работе [10], дрейфово-диссипативная неустойчивость по-прежнему имеет место, и инкременты неустойчивых собственных мод растут вместе с ростом частоты электронно-ионных соударений.

Дрейфово-диссипативная неустойчивость была идентифицирована с её линейной пороговой теорией в экспериментах на спокойной плазме Q–машин [11-13]. Была измерена повышенная утечка плазмы, связанная с возбуждением дрейфово-диссипативной неустойчивости. Азимутальные волновые числа наблюдаемых дрейфовых столкновительных волн при изменении внешнего магнитного поля изменялись от $m=1$ до $m=5;\ 6$ [11], [14]. Уровни их относительных амплитуд находились в интервале 10 % – 20 %.

Результаты экспериментальных исследований вызвали многочисленные публикации по нелинейной теории дрейфово-диссипативной неустойчивости [15-22]. В работе Стикса ставилась задача найти уровень стационарной амплитуды дрейфовых волн и оценить величину повышенного ухода плазмы поперёк магнитного поля. Полученный в работе [15] уровень амплитуды был завышен приблизительно в 10 раз по сравнению с экспери-

© *Vodyanitskii A.A.*, 2012

ментом. Отметим, что в этой работе не выполнялось необходимое условие устойчивости. Расчет утечки плазмы давал нулевой или заниженный результат и не был согласован с построением нелинейной теории дрейфово-диссипативной неустойчивости.

В последующих работах вынесен за рамки исследования вопрос о повышенных потерях плазмы, и авторы не заботились об обосновании выбора механизма стабилизации. Монтичелло и Саймон [17], не проверив устойчивость нелинейного стационарного режима, исключили из анализа стабилизацию неустойчивости дрейфовой волны второй затухающей гармоникой и учли стабилизацию затухающей нуль-частотной модой (с равным нулю "азимутальным" волновым числом). Впрочем вопрос о выборе нелинейного механизма стабилизации может решиться и в пользу нуль-частотных мод [21] при надлежащих граничных условиях и иных постановках задачи. (Нелинейное решение может перестроиться за счёт возбуждения волн с большими волновыми векторами, суперпозиция которых вместе с крупно масштабными волнами удовлетворяет граничным условиям.) Авторы нелинейных работ этот вопрос не исследуют.

В работе [23] содержится интересная постановка задачи о краевых колебаниях плазмы, как дрейфовых волнах, исходящих из плазменного "кора" (core) токамака наружу и "укручающихся" подобно "укручению" бегущих только к берегу морских волн [24].

За линейными и нелинейными исследованиями дрейфовых неустойчивостей развернулся широкий поиск решений в виде нелинейных дрейфовых вихрей. Вначале эти исследования были вполне аналогичны работе по двумерным градиентным вихрям Ларичева-Резника в идеальной гидродинамике со скалярной нелинейностью [25]. Значительная часть обзора [26] посвящена нелинейным градиентным вихрям в плазме, их взаимодействию и новым свойствам. Нелинейные градиентные вихри являются дополнительными возбуждениями по отношению к дрейфовым волнам.

Затем пошли по пути объединения возбуждений двух типов (объемных дрейфовых волн и нелинейных градиентных вихрей [27]). Связано это с тем, что нелинейная структура вихря не может обеспечить перенос плазмы вдоль неоднородной координаты. После этого стали изучать газ вихрей, их столкновения с порождением дрейфовых волн, которые по-прежнему ответственны за аномальный волновой перенос плазмы [27]. При этом среди иных исследований "... the main attention of this review (i.e. the review [28]. – A.V.) is devoted to the investigation of nonlinear drift structures, whose existence may result directly in the anomalous transfers."

Интерес к нелинейным дрейфовым волнам не ослабевает, о чем можно судить по монографическому обзору [26]. В работе [29] исследована нелинейная эволюция дрейфово-диссипативной неустойчивости плазмы в рамках уравнения Хазегавы-Мимы с отбрасыванием нелинейностей, чуждых методу получения вихревых образований. В линейном же приближении оставлены диссипативные члены, описывающие пороговую дрейфово-диссипативную неустойчивость вместе со стабилизацией высоких гармоник. Результаты численных исследований приведены для двух типов начальных условий. Когда были заданы отличными от нуля амплитуды двух волн, то на первой стадии временная эволюция системы привела к возбуждению и росту большого числа волн, которые на второй стадии затухали, и оставался ансамбль из небольшого числа волн (двух – четырёх). Если задавалось большое число волн с начальными амплитудами, отличными от нуля, то система эволюционировала к такому же ансамблю небольшого числа волн.

Этот результат свидетельствует о том, что эволюция системы приводит к самоорганизации когерентной дрейфово-диссипативной структуры с небольшим числом нелинейных дрейфовых волн.

ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ И БЕЗРАЗМЕРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Время обмена энергией между электронами и ионами τ_{ie} найдено в работе [30] и является большим по сравнению с временем между соударениями электронов $\tau_{ee} = \tau_{ei}$ и ионов τ_{ii} порознь, а также временем передачи импульса к ионам [31]:

$$\tau_{ei} = 3\sqrt{m_e}T_e^{3/2}\Big/\left(2\sqrt{2\pi}\Lambda \mathrm{e}^4 Z^2 n_i\right); \tau_{ii} = 3\sqrt{m_i/\pi}T_i^{3/2}\Big/\left(4\Lambda \mathrm{e}^4 Z^2 n_i\right);\ \tau_{ie} = \tau_{ei}\, m_i/(3m_e)\,, \qquad (1)$$

где m_α, T_α, n_α — масса, температура и плотность частиц сорта α ($\alpha = \mathrm{e}$ – электроны, $\alpha = \mathrm{i}$ – ионы), Ze и $\mathrm{e_e} = -\mathrm{e} < 0$ – заряды иона и электрона, $\Lambda = \ln(T_\mathrm{e}^3/\mathrm{e}^6 n_\mathrm{e})$ – кулоновский логарифм [30]. Время установления термодинамического равновесия отдельно в электронной и ионной подсистемах меньше, соответственно, в $m_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}$ и $(m_\mathrm{e}/m_\mathrm{i})^{1/2}$ раз времени обмена энергией и импульсом между электронами и ионами τ_{ei}. Поэтому характерной особенностью плазм является неизотермичность электронной и ионной подсистем.

Система уравнений двухкомпонентной гидродинамики для плазмы, состоящей из электронов и ионов одного сорта, получена в работе [31]. Условия применения этих уравнений требуют выполнения обычных ограничений на частоту и пространственные масштабы рассматриваемых процессов в гидродинамическом приближении. Уравнения же, описывающие неустойчивости термоядерной плазмы с неоднородной температурой, подлежат выводу из кинетической теории [32], используя разную малую величину различных пространственных и временных масштабов. Однако необходимо иметь уравнения, в которых, в частности, вклад поперечных вязкостных членов может сравниться с совместным действием инерционного дрейфа и продольной силы тре-

ния. Поэтому в исследованиях используется система уравнений работы [31]. В ней уравнения поперечного движения решаются методом итераций. Первым приближением для поперечных скоростей является электрический и ларморовский дрейф. Второе приближение учитывается только для ионов и включает вклад поперечной инерции ионов и их столкновительную вязкость.

Возможность такой итерации обсуждается в книге Михайловского [32] и согласно предложенной рекомендации вычисления проведены в работе [33]. Полученная в результате итерации система уравнений и системы уравнений Михайловского [32] и Немова [34] имеют общие основные члены. В качестве главного отличия укажем на то, что различные члены системы уравнений, приводимой в работе [33], могут иметь порядки малости, не совпадающие с порядками малости системы уравнений работ [32] и [34]. Система уравнений [33] справедлива для помещенной в однородное магнитное поле плазмы малого давления, неоднородностью ионной температуры которой пренебрегается.

Перечислим безразмерные параметры и переменные, в терминах которых решаются нелинейные задачи, и приведём, вместе с разъяснениями, модельную систему уравнений, описывающую эволюцию нелинейной дрейфово-диссипативной структуры. Безразмерные время, поперечные и продольные координаты и скорости введены по формулам:

$$t' = t\omega_* ,\ \vec{r}' = 2\pi\vec{r}/L_\perp ,\ \ z' = 2\pi z/L_{\text{II}} ,\ \ \vec{\text{v}}^{\alpha}_{\perp} = 2\pi\vec{V}^{\alpha}_{\perp}/\left(\omega_* L_\perp\right),\ \ \text{v}^{\alpha}_{\text{II}} = 2\pi\,\text{V}^{\alpha}_{\text{II}}/\left(\omega_* L_{\text{II}}\right). \tag{2}$$

Здесь штрихи относятся к безразмерным переменным (ниже их будем опускать), L_{II} и $L_\perp$ – характерные продольный и поперечный размеры плазмы, $\omega_* = 4\pi^2\, cT_{\text{e}0}/(L_\perp^2 \text{e}H)$ – характерная градиентная частота. Нижеследующие величины вводятся при помощи замены переменных. При этом штрихи у некоторых величин также относятся к безразмерным величинам и далее будут опущены. Безразмерные плотности $\tilde{n} = n_\alpha/n_{00}$, где $n_\alpha = n_e = n_i$, и температуры берутся по отношению к некоторым характерным плотности n_{00} и температуре T_{e00} (например, равным максимальным значениям этих величин в плазменном слое). Из них и характерных пространственных и временных масштабов строятся безразмерные давление, тензор вязкости частиц сорта α и скалярный потенциал:

$$\pi_\alpha = \frac{p_\alpha}{p_{\text{e}0}},\ \ \left(p_{\text{e}0} = n_{00}T_{e0}\right),\ \ \pi'^{\alpha}_{ik} = \pi^{\alpha}_{ik}\frac{\omega_{H\alpha}}{p_{\text{e}0}\omega*}\ ,\ \ \eta'^{\alpha}_{j} = \eta^{\alpha}_{j}\frac{\omega_{H\alpha}}{p_{\text{e}0}},\ \ \psi = \frac{\text{e}_\text{e}\varphi}{T_{\text{e}0}}. \tag{3}$$

Формулы (3) вводят безразмерные коэффициенты вязкости ионов η^{i}_{j} , где $j = 1,2,3,4$ (см. [31]). Один из них определяет параметр поперечной столкновительной ионной вязкости η_0 , см. формулу ниже в строке (4).

Приведём значения пяти параметров, описывающих дрейфово-диссипативную неустойчивость (отмеченные выше характерные плотности и температуры входят в состав определяемых параметров):

$$y_{\text{e}0} = \frac{L_{II}^2\omega_* m_\text{e}}{4\pi^2 T_{\text{e}0}\tau_{ei0}},\ \ \eta_0 = \eta^{i}_{1}\Big|_{T_i = T_{i0}} = \frac{0{,}3t_i}{\omega_{Hi}\tau_{ii0}},\ \ b = \frac{\omega_*}{\omega_{Hi}} = \frac{4\pi^2\rho_{\text{ie}}^2}{L_\perp^2},\ \ t_i = \frac{T_{i0}}{T_{\text{e}0}},\ \ \sqrt{\frac{m_\text{e}}{m_i}}\ . \tag{4}$$

Здесь $\rho_{ie}^2 = T_{e0}/\left(m_i\omega_{Hi}^2\right)$ — квадрат ларморовского радиуса ионов, рассчитанный по электронной температуре. Остальные величины, например, параметр, входящий составной частью в слагаемое поперечного электронного трения, $\zeta^e = 1/(\omega_{He}\tau_{ei})$, или формулы для гирочастот частиц сорта α , $\omega_{H\alpha} = eH/m_\alpha c$, выражаются через вышеприведенные величины, либо обозначения для них являются стандартными.

В условиях дрейфово-диссипативной неустойчивости возмущения электронной температуры малы, но их вклад в диссипативную часть дисперсионного уравнения сравним с вкладом продольного трения [7], а в значение пороговой частоты (на нейтральной кривой устойчивости) является превалирующим. По сложившейся традиции [1] проведём вначале рассмотрение без температурных и электромагнитных возмущений, важных для плазм с конечным газокинетическим давлением [35]. (В модельной задаче исключены из рассмотрения и из списка формул (3) возмущения электронной температуры и продольной компоненты электромагнитного потенциала). Отметим, что расхождения между нелинейными теориями и между теориями и экспериментом не объясняются учетом возмущений электронной температуры (см. анализ в [17]).

В уравнении, являющемся следствием уравнения непрерывности тока и продольного движения электронов, произведём вбирающую в себя сильную нелинейность замену безразмерной плотности на её логарифм $\tilde{\nu} = \ln\tilde{n}$,. Добавив к этому уравнению уравнение непрерывности ионов, получим модельную систему двух уравнений для неизвестных функций $\tilde{\nu}(\vec{r},t)$ и $\xi(\vec{r},t)$ либо для $\tilde{\nu}(\vec{r},t)$ и $\psi(\vec{r},t)$:

$$\partial\tilde{\nu}/\partial t + \xi_x\tilde{\nu}_y - \xi_y\tilde{\nu}_x + \text{e}^{-\tilde{\nu}}\nabla_\perp\tilde{n}\left(\vec{\text{v}}_2^{\,i} + \vec{\text{v}}_D\right) = 0,\qquad \partial^2\left(\psi + \tilde{\nu}\right)/\partial z^2 + \alpha_\text{e}\, y_{\text{e}0}\nabla_\perp\tilde{n}\vec{\text{v}}_2^{\,i} = 0, \tag{5}$$

где $\xi = -\psi + t_i\tilde{\nu}$, $\tilde{n} = \exp(\tilde{\nu})$ и $\alpha_\text{e} = 0{,}51$ [31]. Поперечная скорость ионов подставлена в уравнение непрерыв-

ности. Важно отметить, что безразмерный электростатический потенциал служит токовой функцией для поперечной скорости электрического дрейфа, для всей скорости $\vec{v}_1^i$ токовой функцией является $\xi(\vec{r},t)$:

$$v_{1x}^i = -\xi'_y\,, \quad v_{1y}^i = \xi'_x\,, \qquad v_{Ex} = \psi'_y\,, \qquad v_{Ey} = -\psi'_x\,. \tag{6}$$

В дивергенции от потока поперечной скорости второго приближения, содержащейся в уравнении непрерывности ионов, вклад ларморовского инерционного дрейфа сокращается с вкладом поперечной магнитной вязкости, представленной слагаемыми с коэффициентом $\eta_3^i = \pi_i/2$ в безразмерных переменных. С учетом этого и иных сокращений имеем выражения для слагаемых системы уравнений (5)

$$\nabla_\perp \tilde{n}\vec{v}_2^i = -b\{\nabla_\perp(\tilde{n} d_\perp(\nabla_\perp\xi)/dt) - \eta_0[\Delta_1(\tilde{n}^2\Delta_1\xi) + 4(\tilde{n}^2\xi''_{xy})''_{xy}]\}\,, \quad \Delta_{\perp,1} = \partial^2/\partial x^2 \pm \partial^2/\partial y^2 \tag{7}$$

$$d_\perp/dt = \partial_t + \psi'_y\partial_x - \psi'_x\partial_y, \quad \nabla_\perp\tilde{n}\vec{v}_D = -\nabla_\perp\left(\zeta^e\nabla_\perp\pi\right),\ \pi = \pi_e + \pi_i\,. \tag{8}$$

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В настоящем разделе получено основное нелинейное уравнение для волн дрейфово-диссипативной неустойчивости. Будучи формальной математической процедурой, метод построения этого уравнения из системы нелинейных диссипативных уравнений с частными производными включает регуляризацию теории возмущений. Проблема регуляризации вывода уравнений для нормальных амплитуд, в рамках метода конечных элементов, в системе уравнений вязкой несжимаемой жидкости поставлена Ладыженской [37] и привела к необходимости обобщения метода Боголюбова для одночастотных решений системы со многими степенями свободы [38]. (Иная формальная процедура обобщения одночастотного метода на нелинейные колебания однородных распределённых систем со многими степенями свободы применена в работе [39].)

Использование формализма двух времен и двух координат позволяет объединить разложения нелинейной механики и метода ВКБ. Основанием для применения этого формализма служат обобщение метода последовательных замен переменных в процедуре Боголюбова [38] и опыт его практического применения с обобщением на системы с распределёнными параметрами и многими нормальными колебаниями. Полученное ниже по рецепту формального математического приёма, который наряду со строгим методом содержится в [38], первое приближение асимптотического разложения является обобщением метода Боголюбова и Митропольского по пунктам, кратко изложенным в выводах.

Приближения нелинейной теории возмущений

В качестве неравновесных плотности и токовой функции возьмём такие, которые медленно зависят от времени и неоднородной координаты, $|\nu''_{0xx}| << |\nu'_{0x}| \le 1$ и $|\nu''_{0tt}| << |\nu'_{0t}| \le 1$, и аналогичные неравенства справедливы для ξ_0. Выполнение этих неравенств обеспечивает применимость разложений нелинейной теории и квазиклассического приближения и введения "медленного" времени и медленной зависимости амплитуд колебаний от неоднородной координаты. Плотность и токовую функцию считаем состоящими из двух слагаемых $\tilde{\nu} = \nu_0(x,t) + \nu(\vec{r},t)$ и $\tilde{\xi} = \xi_0(x,t) + \xi(\vec{r},t)$, где величины, помеченные индексом нуль, удовлетворяют, в отмеченном выше смысле, условиям медленной зависимости от аргументов, а возмущения считаем малыми. Последнее предположение считаем выполненным только из-за использования его при анализе нелинейных решений для волн. Для построения нелинейной теории его можно было не делать. Каждое нелинейное слагаемое системы уравнений (5) следует разложить по степеням возмущений, выделив линейные и нелинейные квадратные и кубические члены. При этом вклад поперечной ионной вязкости в формуле (7) выражается в виде, удобном для выделения нелинейных членов (с учетом замены $\tilde{n} = \exp(\tilde{\nu})$):

$$\Delta_1(\tilde{n}^2\Delta_1\xi) + 4(\tilde{n}^2\xi''_{xy})''_{xy} \equiv \exp(2\tilde{\nu})\left[\Delta_\perp^2\xi + 2(\Delta_1\tilde{\nu})\Delta_1\xi + 4(\nabla_\perp\tilde{\nu})\nabla_\perp\Delta_\perp\xi + 4((\tilde{\nu}'_x)^2 - (\tilde{\nu}'_y)^2)\Delta_1\xi\right]$$

Отметим, что безразмерные неравновесные плотности вводим в параметры уравнений $\eta = \eta_0\exp(\nu_0)$ и $y_e = \alpha_0 y_{e0}\exp(\nu_0)$.

Нелинейная задача решается в модели плоского неоднородного вдоль оси Ox слоя с периодическими граничными условиями по y и z. Вдоль оси Ox плазма считается свободной и граничное условие по неоднородной координате x получается из исходных уравнений, как условие сохранения y - компоненты импульса. Последовательный вывод основного уравнения для волн, позволяющий исключить секулярные члены, проводится в формализме двух времён и двух неоднородных координат с "быстрой" и "медленной" зависимостями от времени и неоднородной координаты. При этом полагают $\partial/\partial t = \partial/\partial t_0 + \varepsilon\,\partial/\partial t_1$, $\partial/\partial x = \partial/\partial x_0 + \varepsilon\,\partial/\partial x_1$ и в вычислениях учитывают только первую степень ε. Тогда по быстрому времени и быстрой координате можно пользоваться обычным преобразованием Фурье [40]. Представим искомые функции $\tilde{\nu}(\vec{r},t)$ и $\xi(\vec{r},t)$ в виде разложения по полной ортогональной системе функций $\{\exp i\vartheta_{\vec{k}}\}$, где $\vartheta_{\vec{k}} = my + nz + k_x(x_1)$ (m и n – целые чис-

ла и $k_x(x_1)$ – функция "медленной" координаты):

$$\{\nu;\xi\}=\sum_{mn}\int^{x_0} dk_x(x_1)\left\{a_{\vec{k}};\xi_{\vec{k}}\right\}\exp i\vartheta_{\vec{k}} \equiv \sum_{\vec{k}}\left\{a_{\vec{k}};\xi_{\vec{k}}\right\}\exp i\vartheta_{\vec{k}} \ . \qquad (9)$$

Систему уравнений с частными производными (5) можно перевести в два набора уравнений в частных производных по двум временам и медленной неоднородной координате

$$-i\hat{\omega}_\xi a_{\vec{k}}+i\lambda_2(\hat{\kappa})\xi_{\vec{k}}=NL_1(\hat{\kappa}), \qquad -n^2(1+t_i)\,a_{\vec{k}}-\lambda_1(\hat{\kappa})\,\xi_{\vec{k}}=NL_3(\hat{\kappa}), \qquad (10)$$

где $\hat{\kappa}=(\hat{\omega},\hat{\vec{k}})$ и

$$NL_j(\hat{\kappa})=\sum_{\vec{k}'}\xi_{\vec{k}'}\left\{U_j(\hat{\kappa}',\hat{\kappa}'')\,a_{\vec{k}''}\Big|_{\vec{k}''=\vec{k}-\vec{k}'}+\sum_{\vec{k}''}R_j(\hat{\kappa}',\hat{\kappa}'',\hat{\kappa}''')\,a_{\vec{k}''}a_{\vec{k}'''}\Big|_{\vec{k}'''=\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}''}\right\}. \qquad (11)$$

Выпишем здесь только квадратный нелинейный коэффициент первого уравнения (10)

$$U_1(\hat{\kappa}',\hat{\kappa}'')=(\hat{k}'_x-i\partial\ln\xi_{\vec{k}'}/\partial x_0)m''-\hat{k}''_x m'+b[i\hat{\omega}'_m\hat{\vec{k}}'_\perp\hat{\vec{k}}''_\perp-\eta(\hat{k}'^4_\perp+4\hat{\vec{k}}''_\perp\hat{\vec{k}}'^3_\perp+2\hat{k}'^2_1\hat{k}''^2_1)]+(1+t_i)\zeta^e\hat{\vec{k}}'_\perp\hat{\vec{k}}''_\perp a_{\vec{k}'}/\xi_{\vec{k}'}. \qquad (12)$$

Здесь и в выражениях (10) обозначения аналогичны приводимым далее без операторных индексов и равны: $\lambda_2(\hat{\kappa})=\omega_{ne}-b_\kappa(\hat{\omega}_m+i\eta_{\hat{\kappa}})$, $\hat{\omega}_m=\hat{\omega}+m\psi'_{0x}$, $\eta_{\hat{\kappa}}=\eta(\hat{k}_x^2+m^2)$. Операторные индексы означают, что частота и компонента волнового вектора являются операторами дифференцирования: $\hat{\omega}=i(\partial/\partial t_0+\varepsilon\partial/\partial t_1)$ и $\hat{k}_x=k_x(x_1)-i\varepsilon\partial/\partial x_1$. В формулах (10) и (11) знак суммирования по $\vec{k}'$ означает суммирование по m',n' и интегрирование по $k'_x(x_1)$ и аналогично – по $\vec{k}''$. При этом в (12) $\hat{\vec{k}}'_\perp=\hat{k}'_x\vec{e}_x+m'\vec{e}_y$, $\hat{k}_1^2=\hat{k}_x^2-m^2$, где $\vec{e}_x$ и $\vec{e}_y$ — орты вдоль осей Ox и Oy.

Основное нелинейное уравнение для волн

Перейдём к построению основного уравнения для волн в первом приближении теории возмущений. Зависимость от времени пространственной компоненты $a_{\vec{k}}$ в системе уравнений (10) отыскивается в виде

$$a_{\vec{k}}(x_1,t)=a_\kappa(x_1,t_1)\exp(-i\omega_{\vec{k}}t_0), \quad \text{где } \kappa=\left(\omega_{\vec{k}},\vec{k}\right), \qquad (13)$$

и аналогичное выражение записывается для $\xi_{\vec{k}}(x_1,t)$. Здесь амплитуда зависит от медленного времени и медленной неоднородной координаты, то есть $da_\kappa/dt=\varepsilon\partial a_\kappa/\partial t_1 \ll \omega_{\vec{k}}a_\kappa$. В качестве частоты принимается её значение в ближайшем линейном или стационарном нелинейном режиме. Таким образом, значение частоты является неизвестным и подлежит определению наряду с амплитудой в результате решения задачи (в частности, частота $\omega_{\vec{k}}$ может быть частотой биений волн с частотами $\omega_{\vec{k}'}$ и $\omega_{\vec{k}''}$, $\omega_{\vec{k}}=\omega_{\vec{k}'}+\omega_{\vec{k}''}$. Для тех возбуждений, частота которых в стационарном режиме мала или равна нулю, в (13) остаётся зависимость только от медленного времени. Подставим зависимости типа (13) в систему уравнений (10) и составим уравнение гармонического баланса [38]. В результате приходим к уравнению, в левой части которого содержатся амплитуды нормальных колебаний.

В правой части уравнения гармоническеого баланса необходимо выразить нормальную функцию $\xi_{\vec{k}}$ через амплитуду a_κ нормальных колебаний. В результате получим основное нелинейное уравнение для волн, то есть замкнутую систему эволюционных уравнений для амплитуд. Нормальные функции можно найти по теории возмущений из системы уравнений (10) только для невырожденных степеней свободы, то есть для тех степеней свободы (волновых или неволновых), для которых дисперсионная функция D_κ не обращается тождественно в нуль при вещественных значениях частоты. Если волновой вектор таков, что $D_\kappa\equiv 0$, то переход к амплитуде нормальных колебаний невозможен и необходимо пользоваться отдельными уравнениями для ξ_κ и a_κ в системе уравнений (10). Нормальные функции невырожденных степеней свободы могут быть исключены по приводимой ниже процедуре.

При нахождении нормальных функций используем принятое выше условие о том, что амплитуды всех возбуждений являются малыми величинами. Методом итерации решаем первое из уравнений системы (10) при равных нулю производных от амплитуды по медленным переменным. Сначала считаем малыми нелинейные члены и находим из линейного соотношения: $\xi_\kappa^{(1)}=a_\kappa\omega_\xi/\lambda_2(\kappa)$, где $\lambda_2(\kappa)=\omega_{ne}-b_\kappa(\omega_m+i\eta_\kappa)$. Затем подставим это выражение в нелинейное слагаемое первого уравнения (10) и найдём нормальную функцию во втором приближении с квадратными членами

$$\xi_\kappa^{(2)}=\left[a_\kappa\omega_\xi-i\sum_{\vec{k}'}\xi_{\kappa'}^{(1)}a_{\kappa-\kappa'}(U_1(\kappa',\kappa-\kappa')+(m-m')\nu'_{0x}\,b_{\kappa'}\eta_{\kappa'})\right]\Big/\lambda_2(\kappa). \qquad (14)$$

Как отмечено выше, здесь не учитываются производные по неоднородной координате от амплитуд в нели-

нейных слагаемых. Но производную от диссипативной части нормальной функции $\xi_{\kappa}^{(1)}$, получаемую в результате дифференцирования неоднородной плотности $n_0(x)$ в частоте соударений в параметре η, необходимо учитывать в первом приближении, и её необходимо учитывать во втором приближении, так как вводимые при этом новые нелинейные члены сравнимы с остальными нелинейными слагаемыми. После вычислений находим

$$d\,\xi_{\kappa}^{(2)}/dx = ib\eta\nu'_{0x}\,\lambda_2^{-1}(\kappa)\,\Big\{k_{\perp}^4 + \sum_{\vec{k}'}\xi_{\kappa'}^{(1)}a_{\kappa''}\Big[\Big(k'^4_{\perp} + 4\vec{k}''_{\perp}\cdot\vec{k}'^3_{\perp} + 2k_1''^2k_1'^2\Big) - \\ -\Big(k_{\perp}^4\lambda_2^{-1}(\kappa) + k'^4_{\perp}\lambda_2^{-1}(\kappa')\Big)\,U_1(\kappa',\kappa'')\Big]_{\kappa''=\kappa-\kappa'}\Big\} + O\Big(\nu'^2_{0x}, b_{\kappa}^2\eta_{\kappa}^2\Big). \tag{15}$$

Первое слагаемое в квадратных скобках получено от дифференцирования явной зависимости параметра η в (12) от неоднородной плотности. Остальные слагаемые найдены при учете зависимости частоты соударений от логарифма неоднородной плотности $\nu_0(x)$ в диссипативной части нормальной функции первого приближения $\xi_{\kappa}^{(1)}$, в которой $\eta_{\kappa} = k_{\perp}^2\eta_0\exp\nu_0(x)$.

Воспользуемся выражением для нормальной функции (14) и её производной во втором приближении (15) при составлении уравнение гармонического баланса [38]. Группируя слагаемые по степеням амплитуды, получаем в окончательной форме основное нелинейное уравнение для волн

$$\left(D_{\kappa} + i\varepsilon\frac{\partial}{\partial t_1}\frac{\partial D_{\kappa}}{\partial\omega_{\vec{k}}} - i\varepsilon\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}_1}\frac{\partial D_{\kappa}}{\partial \mathrm{k}_x}\right)a_{\kappa} = NL(\kappa). \tag{16}$$

Здесь $D_{\kappa} = D'_{\kappa} + iD''_{\kappa}$ — дисперсионная функция, мнимая и вещественная части которой равны

$$D''_{\kappa} = n^2(\omega_m - \omega_{ne}) + b_{\kappa}[n^2(1+t_i)\omega_m + (\omega_m + t_i\omega_{ne})y_e\eta_{\kappa}], \tag{17}$$

$$D'_{\kappa} = b_{\kappa}\Big[y_e\omega_m(\omega_m + t_i\omega_{ne}) - n^2(1+t_i)\Big(\eta_{\kappa} + \zeta_{\kappa}^e/b\Big)\Big]. \tag{18}$$

Нелинейные слагаемые и матричные элементы определяются формулами:

$$NL(\kappa) = \sum_{\vec{k}'}a_{\kappa'}\Big\{a_{\kappa-\kappa'}V_{\kappa}(\kappa',\kappa-\kappa') + \sum_{\vec{k}''}a_{\kappa''}a_{\kappa'''}R_{\kappa}(\kappa',\kappa'',\kappa''')\Big]_{\kappa'''=\kappa-\kappa'-\kappa''}\Big\},$$

$$V_{\kappa}(\kappa',\kappa'') = \frac{\omega_{\xi}}{\lambda_2(\kappa')}\sum_{j=1:3}\lambda_j(\kappa)\overline{U}(\kappa',\kappa''), \qquad R_{\kappa}(\kappa',\kappa'',\kappa''') = \frac{\omega_{\xi}}{\lambda_2(\kappa')}\sum_{j=1:3}\lambda_j(\kappa)\Big[\overline{R_j}(\kappa',\kappa'',\kappa''') + \tilde{\tilde{R}}_j(\kappa',\kappa'',\kappa''')\Big] \tag{19}$$

$$\overline{U}_1 = U_1 + U_{1\xi}; \qquad \overline{U}_1(\kappa',\kappa'') = k'_x m'' - m'k''_x + b\Big[i\omega'_m\,\vec{k}'_{\perp}\cdot\vec{k}''_{\perp} - \eta\Big(k'^4_{\perp} - \\ -k'^4_{\perp}m''\nu'_{0x}\lambda_2^{-1}(\kappa') + 4\vec{k}''_{\perp}\cdot\vec{k}'^3_{\perp} + 2k_1'^2k_1''^2\Big)\Big] - \lambda_2(\kappa')\big(\omega'_{\xi}\big)^{-1}(1+t_i)\zeta^e\vec{k}'_{\perp}\cdot\vec{k}''_{\perp}, \tag{20}$$

$$\overline{U}_3 = U_3(\kappa',\kappa'') = y_e b\Big[i\omega'_m\,\vec{k}_{\perp}\cdot\vec{k}'_{\perp} - 2\eta\Big(k'^4_{\perp} + 2\vec{k}''_{\perp}\cdot\vec{k}'^3_{\perp} + k_1'^2k_1''^2\Big)\Big], \tag{21}$$

$$\overline{R_1}(\kappa',\kappa'',\kappa''') = R_{1\xi} = -b\eta\Big[1{,}5\vec{k}_{\perp}^4 + 4\big(\vec{k}_{\perp} - \vec{k}'_{\perp}\big)\vec{k}'^3_{\perp} + 2k_1'^2(k-k')_1^2\Big], \tag{22}$$

$$\overline{R}_3 = R_3(\kappa',\kappa'',\kappa''') = i0{,}5y_e b\omega'_m\vec{k}_{\perp}\cdot\vec{k}'_{\perp} - 2y_e b\eta\Big[\vec{k}'^4_{\perp} + 4\vec{k}''_{\perp}\cdot\vec{k}'^3_{\perp} + k_1'^2(k-k')_1^2\Big], \tag{23}$$

$$\tilde{\tilde{R}}_1 = \tilde{R}_1 + \tilde{R}_{1\xi}, \ \tilde{\tilde{R}}_3 = \tilde{R}_3; \ \tilde{R}_j = i(-1)^{(j-2)/2}\overline{U}_j(\kappa-\kappa'',\kappa'')\,\overline{U_1}(\kappa',\kappa'')\lambda_2^{-1}(\kappa-\kappa'')$$

$$\tilde{R}_{1\xi}(\kappa',\kappa'',\kappa''') = -ib\eta\Big[\big(\vec{k}_{\perp} - \vec{k}'_{\perp}\big)^4\big/\lambda_2(\kappa-\kappa'') + \vec{k}_{\perp}^4\big/\lambda_2(\kappa')\Big]U_1(\kappa',\kappa''), \tag{24}$$

В списке формул (19 – 24) $j = 1$ и $j = 3$. Обозначения безразмерных параметров определяются формулами

$$\omega_{ne} - m\,N, \ \ N \equiv \nu'_{0x} = d\nu_0/dx, \ \omega_m = \omega_{\vec{k}} + m\psi'_{0x}, \ \omega_{\xi} = \omega_m + t_i\omega_{ne} + i(1+t_i)\zeta_{\kappa}^e; \ \omega_{\kappa} = \omega_m + i\eta_{\kappa}, \ \eta_{\kappa} = k_{\perp}^2\eta,$$

$$k_{\perp}^2 = k_x^2 + m^2, \ b_{\kappa} = k_{\perp}^2 b; \ \ \lambda_1(\kappa) = -n^2 + iy_e b_{\kappa}\omega_{\kappa}; \ \lambda_3 = i\lambda_2(\kappa); \ \lambda_2(\kappa) = \omega_{ne} - b_{\kappa}\omega_{\kappa}; \ k_1^2 = k_x^2 - m^2,$$

$$k_1'^2 = k_x'^2 - m'^2; \ \ \vec{k}_{\perp}\cdot\vec{k}'_{\perp} = k_xk'_x + m\,m'; \ \ \vec{k}''_{\perp}\cdot\vec{k}'^3_{\perp}k = \vec{k}''_{\perp}\cdot\vec{k}'_{\perp}k'^2_{\perp}. \tag{25}$$

В найденных нелинейных матричных элементах наибольшие изменения претерпели матричные элементы первого уравнения (10), так как именно в это уравнение входит производная от нормальной функции (15). В формулах (19) – (24) знак прямой черты означает включение добавка к нелинейным матричным элементам, полученного в результате учета зависимости нормальной функции от неоднородной координаты. Знаки волнистой черты показывают на появление новых нелинейных матричных элементов, обусловленное учетом вторых степеней амплитуды в нормальной функции. Здесь приведены только те коэффициенты, которые важны в дальнейших нелинейных исследованиях (детальные оценки сделаны в работе [33]).

Если не предполагать малость амплитуд, но иметь в исходных уравнениях малые параметры перед нели-

нейными и линейными диссипативными слагаемыми, то получится уравнение для волновых амплитуд, аналогичное первому приближению метода Боголюбова [38]. Все члены этого уравнения содержатся в полученном основном уравнении для волн. Однако в этом основном уравнении содержатся, с точки зрения канонического метода Боголюбова, и при выполнении условия малости указанных для него параметров, лишние нелинейные слагаемые. Но так как все малые слагаемые представлены в явном виде, то лишними всегда можно пренебречь при анализе. Однако мы показали и используем эффективно далее то, что появляющиеся нелинейные члены будут одного порядка величины с учитываемыми слагаемыми от собственных нелинейных членов исходных уравнений.

В стационарном решении основного нелинейного уравнении (16) первые производные по времени равны нулю, а первыми производными по x пренебрегается в силу оценки $\gamma_{\kappa} a_{\kappa} >> (\partial\omega/\partial k_x)\partial a_{\kappa}/\partial x$ (это соответствует утверждению о том, что амплитуда определяется балансом локального инкремента и слагаемых, отражающих нелинейное взаимодействие волн, а не эффектами на границе плазмы [41]). Заметим еще, что после вывода основного уравнения для волн возвращаются к одному времени и одной неоднородной координате и полагают $t_1 = \varepsilon t$, $x_1 = \varepsilon$ x .

ЛИНЕЙНЫЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ПОРОГОВОЙ ТЕОРИИ

Основное уравнение для волн описывает нелинейное взаимодействие волн, эволюционирующих к стационарному состоянию в результате развития неустойчивости и определяющих аномальный волновой перенос плазмы наряду с её классической диффузией. Для решения задачи о характере эволюции, прежде всего, необходимо найти нелинейное кубическое самовоздействие волны, чтобы узнать к какому эффекту на амплитуду оно приводит, — стабилизирующему или дестабилизирующему неустойчивость линейной теории.

Кубическое самовоздействие волны

Для волновых векторов неустойчивых в линейной теории волн и биений на них, нелинейное взаимодействие которых изучается, введём используемые далее краткие обозначения с помощью их азимутальных компонент и индексов при них:

$$\pm m = (\pm m, \pm n, \pm k_x),\ \ \overline{m} = (m, -n, k_x),\ \ m' = (m, n, -k_x),\ \ \overline{m}' = (m, -n, -k_x);$$
$$2m = (2m, 2n, 2k_x),\ \ 2\overline{m}' = (2m, -2n, -2k_x),\ \ 0_{\text{II}} = (0, 2n, 2k_x),$$
$$\overline{0}'_{\text{II}} = -0_{\text{II}},\ \ \ 0_{\perp} = (m, 0, k_x). \qquad (26)$$

Коэффициент (нелинейный матричный элемент) нелинейного кубического самовоздействия, соответствующего распадному процессу по частоте и волновым векторам $(m)+(m)+(-m)=(m)$, состоит из трёх слагаемых $S_{mm} = R_{\kappa}(\kappa,\kappa,-\kappa) + R_{\kappa}(\kappa,-\kappa,\kappa) + R_{\kappa}(-\kappa,\kappa,\kappa)$. При вычислении вклада различных кубических нелинейных матричных элементов замечаем, что если они получаются при учете вторых степеней нормальной функции (содержат волнистую черту в обозначениях формул (19-23)), то дают вклад, пропорциональный b_{κ}^2 и $b_{\kappa}^2\eta_{\kappa}$, а такими слагаемыми пренебрегается. Учитываем только слагаемые порядка b_{κ} и $b_{\kappa}\eta_{\kappa}$. В этом приближении, с учетом приведенного ниже порогового соотношения (40), получаем

$$S_{m\,m} = (1+t_i)b\eta\left|n^2\left(-5k_{\perp}^4 + 8k_1^4\right) - (3/2\eta)y_e\omega_{ne}\omega_m k_{\perp}^2 - i2y_e\omega_{ne}\left(4k_1^4 - k_{\perp}^4\right)\right|. \qquad (27)$$

Фактически нами вычислен нелинейный добавок к инкременту волны с частотой и волновым вектором $\kappa = (\omega_{\vec{k}}^{-}, \vec{k})$, где $\vec{k} = (m, n, k_x)$, учитывающий самовоздействие волны кубическими членами. Из выражения для самовоздействия видно, что при значениях k_x^2, находящихся вне интервала, определяемого неравенством $-5k_{\perp}^4 + 8\left(k_x^2 - m^2\right) < 0$, кубическая нелинейность оказывает стабилизирующее воздействие. В остальных случаях, в частности при $k_x^2 \approx m^2$, кубическая нелинейность дестабилизирует колебания. Отметим, что без учета членов от $R_{1\xi}$, (24), в кубическом матричном элементе для самовоздействия получается выражение $\operatorname{Re} S_{\kappa\kappa}[R_1] = (1+t_i)b\eta\, n^2\left(-5k_{\perp}^4 + -k_1^4\right) < 0$, которое приводит к дестабилизации волн при любом соотношении между k_x^2 и m^2, что было получено в работе [33]. Можно показать, что эта кубическая нелинейность, получающаяся в результате зависимости ионной вязкости от квадрата плотности, является дестабилизирующей и при больших амплитудах колебаний. Такое её воздействие называют эффектом отрицательной ионной вязкости и при нелинейном дестабилизирующем воздействии волны накачки его используют для генерации иных волн [42]. Таким образом, изменение нелинейных матричных элементов благодаря учету зависимости нормальных функций от неоднородной координаты является существенным.

Из безразмерных параметров (4), невозмущенной плотности и компонент волнового вектора составим

безразмерные параметры нелинейной теории. Для дальнейших ссылок введём для них названия, подчеркивающие характерную зависимость от размерных параметров плазмы:

$$p = y_e/\eta = 1{,}7(2t_i m_e/m_i)^{1/2}\left(L_{\text{II}}^2/L_\perp^2\right) — \tag{28}$$

параметр, пропорциональный отношению квадратов продольного и поперечного размеров плазмы;

$$q = y_e\eta = \lambda b, \qquad q_\kappa = y_e\eta\, k_\perp^2/n^2 \equiv \lambda_{ei} b_\kappa — \tag{29}$$

комбинированный параметр плотности, магнитного поля и температуры, который распадается на произведение параметра магнитного поля b_κ и параметра плотности, равного

$$\lambda_{ei} = \lambda/n^2, \quad \lambda = 0{,}15\, t_i^{3/2}\sqrt{m_e/m_i}\,\nu_{ei}L_{\text{II}}^2/\left(4\pi^2 \mathrm{v}_{Te}\mathrm{v}_{Ti}\tau_{ii}\right) \tag{30}$$

и пропорционального отношению квадрата продольного размера к длинам свободного пробега электронов и ионов. Влияние поперечного электронно-ионного трения на колебания характеризует параметр поперечного трения, обратная величина которого равна

$$1/p_\zeta = b\eta/\zeta^e = 0{,}3\sqrt{2m_i/(t_i m_e)}, \quad \text{где} \quad \zeta^e = 1/\omega_{He}\tau_{ei}. \tag{31}$$

Добавление индекса κ к параметрам означает переход к масштабам волновых возмущений в плазме

$$b_\kappa = bk_\perp^2, \quad p_{\zeta\kappa} = p_\zeta/k_\perp^2. \tag{32}$$

Линейные пороговые соотношения. Локализация волн

Дисперсионное уравнение дрейфово-диссипативной неустойчивости содержит как мнимую, так и вещественную части, приведенные в формулах (17), (18). Входящая в них частота ω_m (25) включает в себя доплеровский сдвиг вследствие электрического дрейфа плазмы. На нейтральной кривой устойчивости дисперсионное уравнение удовлетворяется вещественным значением частоты. При этом мнимая и вещественная части дисперсионного уравнения приводят к выражениям для критических частоты и квадрата градиента логарифма плотности:

$$\omega_m^{cr} = \omega_{ne}\left(1 - t_i b_\kappa q_\kappa\right)/\left[1 + b_\kappa\left(1 + t_i + q_\kappa\right)\right], \qquad \omega_{ne} = -mN, \tag{33}$$

$$N^2 = N_{cr}^2(m) \equiv \frac{\tilde{\eta}n^2\left[1 + b_k\left(1 + t_i + q_\kappa\right)\right]^2}{m^2 y_e\left(1 - t_i b_\kappa q_\kappa\right)\left(1 + t_i q_\kappa\right)} \approx \frac{1 + p_{\zeta\kappa}}{pm^2}k_\perp^2 n^2\left[1 + \left(2 + t_i\right)b_\kappa\left(1 + q_\kappa\right)\right], \tag{34}$$

где $\tilde{\eta} = \eta\left(1 + p_{\zeta\kappa}\right)$. Соотношение (34) содержит две степени разложения по малому параметру задачи b_κ. Выход на порог осуществляется посредством стабилизации поперечными ионной вязкостью в линейной теории и поперечной силой электронно-ионного трения. Отношение стабилизирующего и дестабилизирующего факторов представлено посредством параметров, задаваемых формулами (28), (29) и (31).

Выражение для частоты в линейной теории понимают в некотором локальном смысле, то есть справедливым в точке локализации колебаний x_0, определяемой уравнением $\left(\partial F/\partial x\right)\big|_{x=x_0} = 0$, где функция F находится из уравнения (33), решаемого относительно k_x^2 с заменой $\omega_m^{cr} \Rightarrow \omega_m$: $k_x^2 = F(x, \omega, ...)$, $k_x(x) = \left[F_0 + (x - x_0)^2\, F_0''/2 + ...\right]^{1/2}$. Из требования однозначности решения следует условие квантования между точками поворота $\int_{x_-}^{x_+} k_x dx' = \pi l$, где $k_x(x_\pm) = 0$ и l – целые числа [43], [4]. Отсюда, с учетом разложения в точке локализации, находим

$$k_x^2(x_0) \equiv F(x_0, \omega, ...) = l\sqrt{-2F_0''}. \tag{35}$$

Если в (35) пренебречь малыми градиентами невозмущённых величин, то получается локальное дисперсионное уравнение, справедливое в точке локализации, $\operatorname{Im} D(k_x = 0, x_0, \omega, ...) = 0$. Если же в правой части уравнения (35) удержать вторые производные от F_0, то получится квазилокальное дисперсионное уравнение с $k_x(x_0) \neq 0$, справедливое в указанной выше точке локализации. При некоторых нелинейных механизмах стабилизации, когда нелинейные соотношения квадратные по компоненте волнового вектора k_x, можно поступить аналогично изложенному квазилокальному методу для нахождения частоты. Тогда нелинейное дисперсионное соотношение можно считать выполненным в некоторой точке локализации. В общем случае это несправедливо, что можно усмотреть как из основного нелинейного уравнения для волн, среди нелинейных членов которого есть линейные по k_x так и из исходной системы нелинейных уравнений, не симметричной относительно замены $x \to -x$.

В линейной теории дисперсионная функция обращается в нуль при комплексных значениях частоты,

$\omega_m = \omega_m^L + i\gamma_\kappa$. Так как $|D'_\kappa| << |D''_\kappa|$ вблизи порога неустойчивости, то $|\gamma_\kappa| << \omega_m^L$. Следовательно, значение инкремента в линейной теории равно

$$\gamma_\kappa = D'_\kappa\left(\omega_m^L, \vec{k}\right)/(\partial D''/\partial\omega_m) = b_\kappa(1+t_i)\tilde{\eta}_\kappa d'_m(1+O(b_\kappa)), \text{ где } d'_m = N^2/N_{cr}^2(m) - 1. \quad (36)$$

Последнее выражение в строке (36) определяет градиентный параметр надкритичности d'_m. Формула для частоты ω_m^L совпадает с формулой пороговой теории (33) и теперь в ней стоит вместо критического истинное значение градиента плотности в $\omega_{ne} = -mN$. Вблизи частоты линейной теории, $|\partial D''_\kappa/\partial\omega_m| << |\partial D''_\kappa/\partial\omega_m|$, имеем такое разложение для дисперсионной функции:

$$D_\kappa = \left(\partial D''_\kappa/\partial\omega_m^L\right)(\gamma_\kappa + i\beta_\kappa); \qquad \beta_\kappa = \omega_m - \omega_m^L. \quad (37)$$

Здесь величина β_κ представляет собой нелинейный сдвиг частоты.

Для вторых гармоник неустойчивых волн условие распада по частоте в линейной теории выполняется с малым "рассогласованием," которому пропорциональна реактивная (мнимая) часть дисперсионной функции. Пороговое значение дисперсионной функции второй гармоники при $\beta_{2m} = \omega_{2m} - 2\omega_m^L = 0$ равно

$$D_{2m} \equiv D_\kappa\left(2\omega_m^L, 2\vec{k}\right) = 24n^2 b_\kappa(1+t_i)\omega_m^L d_{2m}; \qquad d_{2m} = -2\eta_\kappa/\omega_m^L + i(1+q_\kappa). \quad (38)$$

При получении этого соотношения использованы пороговые соотношения (33), (34) и малость b_κ.

Градиентный параметр надкритичности d'_m (36) следует выразить через параметр надкритичности магнитного поля, так как эксперименты обработаны по отношению к критическому магнитному полю возбуждения неустойчивости.

Из уравнения для нейтральной кривой устойчивости (34) находим критическое значение параметра магнитного поля как функцию параметра неравновесности: $b_{cr}(\kappa) = \left[-1 + (1 + 4\lambda_{ei}\Delta p_N)^{1/2}\right]/(2\lambda_\kappa)$, где $\lambda_\kappa = \lambda_{ei}k_\perp^2$,

$$\Delta p_N = (p_N - 1)/(2 + t_i) \text{ и } p_N = pN^2/\left[n^2(1 + p\zeta_\kappa)\right]. \quad (39)$$

Из условия близости N^2 к пороговому значению вытекает связь между градиентным и магнитным параметрами надкритичности $d'_m = (2 + t_i)(1 + 2q_\kappa)m^2(b_{cr}(m) - b)$. Магнитный параметр надкритичности выражается, в свою очередь, через параметр надкритичности магнитного поля Δ_H, а именно: $b_{cr}(m) - b = 2b_{cr}(m)\Delta_H$, где $\Delta_H = [H - H_{cr}(m)]/H_{cr}(m)$. Здесь Δ_H зависит от внешнего магнитного поля и критического поля возбуждения волны, $H_{cr}^2 = 4\pi^2 m_i c^2 T_{e0}/\left[e^2 b_{cr}(m) L_\perp^2\right]$. При заданных значениях параметра неравновесности Δp_N, отношения k_x/m и аксиального числа n критические значения магнитного поля эквидистантны.

Нелинейные матричные элементы

Вычисление коэффициентов нелинейного взаимодействия волн (нелинейных матричных элементов) заключает в себе некоторые особенности. Матричный элемент, описывающий возбуждение второй гармоники волны её первой гармоникой, совпадает со своим парциальным значением $V(m,m) = V_{2m}(m,m)$. Остальные матричные элементы, описывающие трёхволновое взаимодействие, состоят из суммы двух парциальных, $V(m,j) = V_{m+j}(m,j) + V_{m+j}(j,m)$. Для упрощения вычислений используются соотношения между параметрами волн, находящихся вблизи порога неустойчивости. Соотношение для градиентного параметра неравновесности $p_N = pN^2/n^2 \approx 1$, (39), с точностью до малых членов порядка b_κ, следует из формулы (34). В ином виде приведём его вместе с соотношением, отражающим ту же близость параметра неравновесности (39) к порогу неустойчивости,

$$y_e\omega_{ne}^2/n^2 = \tilde{\eta}_\kappa(1 + O(b_\kappa)) \text{ и } (\eta_\kappa/\omega_m)^2 \approx y_{en}\tilde{\eta}_\kappa\omega_m^{-1} \approx q_\kappa/(1 + p\zeta_\kappa), \quad (40)$$

где $\tilde{\eta}_\kappa = \eta_\kappa/(1 + p\zeta_\kappa)$ и $y_{en} \equiv y_e\omega_{ne}/n^2$. Для близких к порогу неустойчивости волн нормальные функции первого приближения, содержащие малые слагаемые в нелинейных матричных элементах, также упрощаются: $\xi_\kappa^{(1)} \approx (1 + t_i)a_\kappa$. Для больших нелинейных слагаемых вычисляем разность $\xi_m^{(1)} - \xi_{\overline{m}}^{(1)}$ с точностью до членов порядка $b_\kappa\eta_\kappa$ включительно. Выпишем коэффициенты, определяющие нелинейное взаимодействие дрейфовой волны и её второй гармоники:

$$V(m,m) = -4in^2(1 + t_i)b_\kappa\omega_m\left[1 + q_\kappa\left(3 + Z^2\right) + i\frac{\eta_\kappa}{\omega_m}\left(5 + Z^2\right)\right], \text{ где } Z = \left(k_x^2 - m^2\right)/k_\perp^2, \quad (41)$$

$$V(2m,-m)=i2n^2(1+t_i)b_\kappa\omega_m\left[1=q_\kappa\left(-3+8Z^2\right)+i\frac{\eta_\kappa}{\omega_m}\left(19-8Z^2+\frac{9}{2}p\zeta_\kappa\right)\right]. \quad (42)$$

Нелинейные коэффициенты $U_{11}(\kappa',\kappa'')=k'_x m''-k''_x m'$, получаемые из уравнения непрерывности от электрического дрейфа ионов, не дают большой вклад в приведенные выше матричные элементы, которые вычислены в линейном приближении по малому параметру b_κ. (Параметр $q_\kappa=b_\kappa\lambda_{ei}$ может быть произвольным из-за возможных больших значений λ_{ei}.)

В нелинейный матричный элемент $V(0,\overline{m'})$ основной вклад даёт электрический дрейф в уравнении непрерывности ионов. Приведём его значение в пренебрежении малыми членами порядка b_κ : $V(0,\overline{m'})=n^2(1+t_i)2mk_x(1+p\zeta_\kappa)$. Нелинейный коэффициент U_{11} приводит к малому реактивному слагаемому в матричном элементе $V(m,-\overline{m'})[U_{11}]=i16n^2(1+t_i)(b_\kappa\eta_\kappa/\omega_{ne})(1+p\zeta_\kappa)$, описывающем возбуждение нуль-частотных мод:. Это слагаемое отлично от нуля вследствие включения в нормальную функцию диссипативной части. В отличие от работы [17], учет производной нормальной функции по неоднородной координате вместе с квадратными членами от ионной вязкости даёт диссипативный вклад. Полный нелинейный матричный элемент равен $V(m,-\overline{m'})=16n^2(1+t_i)b\eta\left[imk_xk_\perp^2(1+p\zeta_\kappa)/\omega_{ne}+k_1^2\left(k_1^2+2k_\perp^2+p\zeta\right)\right]$. Отметим особую важность реальной части этого соотношения. Она приводит к устойчивости доминирующей дрейфовой волны в стационарной нелинейной структуре по отношению к возбуждению продольных нуль-частотных мод $(m=0)$ и в предыдущих работах не учитывалась. Другие матричные элементы можно получить с помощью замены знаков компонентов волновых чисел, например: $V(\overline{m}',\overline{m}')=V(m,m)\{k_x\to-k_x,n\to-n\}$; $V(-j,-l)=V(-j,-l)=V^*(j,l)\{\vec{k}\to-\vec{k}\}$; $V(-0,m)=V(0,\overline{m}')\{k_x\to-k_x,n\to-n\}$.

НЕЛИНЕЙНАЯ ДРЕЙФОВО-ДИССИПАТИВНАЯ СТРУКТУРА

О редукции системы уравнений

Основное нелинейное уравнение для волн представляет собой систему уравнений для комплексных амплитуд со многими состояниями равновесия (наборами стационарных значений амплитуд). В частности, основное уравнение для волн удовлетворится, если в стационарном режиме выбрать среди волн, неустойчивых в линейной теории, только одну основную, доминирующую (как окажется в результате исследования устойчивости нелинейного стационарного режима) волну с амплитудой, отличной от нуля. Амплитуды остальных волн как устойчивых в линейной теории, так и неустойчивых, с волновыми векторами, не кратными волновому вектору доминирующей волны, равны нулю.

Доминирующая волна и её гармоники удовлетворяют бесконечной системе уравнений. При изучении стационарной дрейфово-диссипативной структуры возникает вопрос о выделении конечного числа уравнений для этой волны. Важно то, что высшими гармониками можно пренебречь. Физической причиной отбрасывания высших гармоник является их стабилизация вязкостью. Если в качестве малого параметра принять такое значение параметра надкритичности (см. (36)), $d'_m\sim b_{cr}(m)\sim\varepsilon<<1$, когда он имеет порядок величины критического значения малого параметра магнитного поля b_κ, то дисперсионные функции доминирующей волны и её гармоник, а также нелинейные матричные элементы имеют следующие порядки малости:

$$|D_m|\sim\varepsilon^2,\qquad |D_{j.m}|\sim|V(\kappa',\kappa'')|\sim|S_{mm}|\sim\varepsilon;\quad j=2,3,... \quad (43)$$

Из системы зацепляющихся уравнений для гармоник следует, что порядок малости амплитуд высших гармоник по сравнению с амплитудой доминирующей волны увеличивается с номером гармоники. Поэтому в старшем порядке теории возмущений достаточно ограничиться системой уравнений для амплитуды доминирующей волны и её второй гармоники:

$$\hat{D}_m a_m=V(2m,-m)a_{2m}\,a_{-m}+S_{m\,m}a_m|a_m|^2,\ \hat{D}_{2m}\,a_{2m}=V(m,m)a_m^2;\ \hat{D}_j=i\frac{\partial D_j}{\partial\omega_j}\frac{\partial}{\partial t}+D_j. \quad (44)$$

Такая же система уравнений получается, если все величины в оценочных формулах (43) имеют нулевой порядок малости, кроме $|D_m|<<1$. Наряду с этим, для устойчивости стационарного решения для амплитуды в рамках системы уравнений (44) необходимо, чтобы вторая и более высокие гармоники затухали в линейной теории [44]. В противном случае нужно привлекать к рассмотрению третью и более высокие затухающие гармоники.

Вычисление амплитуды доминирующей волны

Нелинейная частота и стационарный уровень амплитуды доминирующей волны определяются получае-

мым из системы (44) комплексным уравнением, которое выпишем в одной строке с суммой коэффициентов нелинейного взаимодействия и самовоздействия волны

$$D_m\, a_m^0 = W_{mm}\left| a_m^0 \right|^2 a_m^0, \qquad W_{mm} = V(m,m)V(2m,-m)/D_{2m} + S_{mm}. \tag{45}$$

Частота в нелинейной теории мало отличается от частоты линейной теории. Нелинейный сдвиг частоты пропорционален b_κ^2, и им надо пренебречь. Таким образом, можно пользоваться формулой линейной теории для частоты (33). Из оценки порядков величины в уравнении (45) следует, что для нахождения амплитуды необходимо использовать вещественную часть этого уравнения. В нелинейный коэффициент уравнения (45) следует подставить значение частоты $\omega_m = \omega_{ne}$.

Обе части уравнения (45) можно сократить на малый сомножитель и ввести новые матричные элементы w_V, коэффициенты самовоздействия s_{mm} и реальную часть дисперсионной функции:

$$V(m,m)V(2m,-m) = 8n^4(1+t_i)^2 b_\kappa^2 \omega_m^2 w_V; \tag{46}$$

$$S_{mm} = (1+t_i) b_\kappa^2 \eta_\kappa n^2\, s_{mm}; \qquad \mathrm{Re}\, D_m = (1+t_i) b_\kappa \tilde{\eta}_\kappa\, n^2 d'_m. \tag{47}$$

При вычислении произведения квадратных матричных элементов (46) также используем соотношения (40). Вещественной и мнимой частью нового коэффициента, составленного из квадратных матричных элементов, являются значения

$$w'_V = 1 - q_\kappa (1+p\zeta_\kappa)^{-1}\left[89+5Z^2-16Z^4+p\zeta_\kappa\left(\frac{33}{2}+16Z^2\right)\right] - q_\kappa^2\,\left(8Z^2-3\right)\left(3+Z^2\right), \tag{48}$$

$$w''_V = \frac{\eta_\kappa}{\omega_m}\left[6\left(4-Z^2\right)+q_\kappa\left(72-39\,Z^2-24\,Z^4+\frac{9}{2}\,p\zeta\left(3+Z^2\right)\right)\right]. \tag{49}$$

Вводя новый коэффициент нелинейного воздействия, и выражая его через коэффициенты, представленные формулами (46) – (49) и (38), получаем выражения, в которых d_{2m}^* означает комплексное сопряжение величины d_{2m}:

$$W_{mm} = (1/3)n^2 b_\kappa (1+t_i)\,\omega_m \,|\, d_{2m}\,|^{-2} w_{mm}, \text{ где } w_{mm} = \omega_V d_{2m}^* + 3(\eta_\kappa/\omega_m)\, s_{mm}\,|\, d_{2m}\,|^2 .. \tag{50}$$

Уравнение для квадрата модуля амплитуды приобретает вид $3d'_m\tilde{\eta}_\kappa/\omega_m = \left| a_m^0 \right|^2 \mathrm{Re}\, w_{mm}\,|\, d_{2m}\,|^{-2}$. Выносится сомножитель $\tilde{\eta}_\kappa/\omega_m$ из слагаемых $\mathrm{Re}\, w_{mm}$, после сокращения на него обеих сторон этого уравнения и введения обозначения для полинома $Q\left(q_\kappa, Z^2, p\zeta_\kappa\right) = (\omega_m/\eta_\kappa)\mathrm{Re}\, w_{mm}$ находим выражение для квадрата модуля амплитуды

$$\left| a_m^0 \right|^2 = 3\, d'_m\,|\, d_{2m}|^2 \Big/ Q\left(q_\kappa, Z^2, p\zeta_\kappa\right). \tag{51}$$

Формула для полинома получается после простых, но трудоёмких вычислений:

$$\begin{aligned} Q\left(q_\kappa, Z^2, p\zeta_\kappa\right) &= 7 + 18\,Z^2 + q_\kappa\left(184+109\,Z^2-56\,Z^4\right) + q_\kappa^2\left(39+27\,Z^2-8\,Z^4\right) + \\ &+ p\zeta_\kappa\left[2{,}5+18\,Z^2+q_\kappa\left(188{,}5+37\,Z^2-56\,Z^4\right)+q_\kappa^2\left(48+31{,}5\,Z^2-8\,Z^4\right)\right] + O\left(p_{\zeta_\kappa}^2\right). \end{aligned} \tag{52}$$

Здесь использованы обозначения (29) – (32), (41) и (42), а также $|\, d_{2m}\,|^2 = (1+q_\kappa)^2 + 4q_\kappa/(1+p\zeta_\kappa)$.

Амплитуда второй гармоники, участвующей в стабилизации доминирующей волны, вычисляется аналогичным способом и пропорциональна b_κ. Однако влияние этой гармоники на явления аномального переноса мало в силу малости амплитуды, поэтому её вычисление не проводим.

Исследование уровня амплитуды доминирующей волны

Квадрат модуля стационарной амплитуды доминирующей волны (51) можно представить в виде произведения параметра надкритичности этой волны и некоторой амплитудной функции:

$$\left| a_m^0 \right|^2 = \left(N^2/N_{\mathrm{cr}}^2 - 1\right) f(q_\kappa, Z^2, p\zeta_\kappa), \qquad f(q_\kappa, Z^2, p\zeta_\kappa) = 3\,|\, d_{2m}\,|^2\,|\, d_{2m}\,|^2 \Big/ Q(q_\kappa, Z^2, p\zeta_\kappa). \tag{53}$$

Квадрат критического градиента логарифма плотности N_{cr}^2, (34), кроме компонент волнового вектора, является функцией четырёх безразмерных параметров: масштабного параметра (28), параметра магнитного поля b_κ, параметра плотности (30) и параметра поперечного трения (31), (32). В зависимости от значений внешних параметров плазмы наиболее сильные изменения в формуле (53) претерпевает градиентный параметр надкритично-

сти. Значение градиента логарифма плотности N определяется балансом притока плазмы и её ухода вследствие классической диффузии и специфического переноса плазмы, а именно, её аномальной, волновой конвекции. Не останавливаясь здесь на связи явления перестройки волн и аномальной конвекции и их влияния на значение градиента логарифма плотности, считаем N заданной величиной.

В формуле для квадрата модуля амплитуды (53) амплитудная функция зависит только от комбинированного параметра плотности и магнитного поля (29), параметра поперечного трения, а также от параметра Z, (41), характеризуещего отличие длины волны вдоль неоднородности от азимутальной длины волны. Особенность зависимости Z от $h = k_x/m$ состоит в том, что при изменении h в довольно широких пределах от 0,7 до 1,7 величина Z^2 отличается от нуля не более чем на 0,03. По этой причине естественно исследовать значения амплитудной функции при $Z = 0$ отдельно. Наоборот, при больших и малых значениях h параметр Z медленно приближается к единице. Тем не менее, рассмотрим в качестве второго предельного случая $Z = 1$.

Приведём числовые результаты вычислений амплитудной функции f. Самым интересным свойством этой функции является её слабая зависимость от параметра плотности и магнитного поля в определённой области его значений. А именно, при уменьшении от очень больших значений до $q_\kappa = 0{,}5$ амплитудная функция медленно возрастает от 0,08 до 0,117, то есть менее чем в полтора раза. Поэтому можно принять $f(q_\kappa > 0{,}5; Z = p_{\zeta\kappa} = 0) \approx 0{,}1$ с относительной точностью большей чем 20%, что приводит к изменениям амплитуды, приблизительно равным 10%. Такие изменения находятся внутри пределов погрешности измерений на Q – машине [11]. Другие частные значения амплитудной функции таковы: $f(q_\kappa = 0{,}1;\ Z = p_{\zeta\kappa} = 0) \approx 0{,}19$, $f(q_\kappa > 0{,}05;\ Z = p_{\zeta\kappa} = 0) \approx 0{,}24$ и $f(q_\kappa << 0{,}1;\ Z = p_{\zeta\kappa} = 0) \approx 0{,}43$. Отметим, что слишком малые значения параметра плотности, $(q_\kappa / b_\kappa)(m_i/m_e)^{1/2} \le 1$, находятся вне пределов применимости гидродинамического описания продольного движения частиц плазмы. Со стороны больших значений параметр q_κ также ограничен, $q_\kappa << \lambda_{ei}$, вследствие использования этого условия при итерации уравнений поперечного движения.

Для значений $Z = 1$ амплитудная функция при уменьшении параметра q_κ от значений $q_\kappa >> 10$ до $q_\kappa = 0{,}5$ увеличивается от 0,05 до 0,08. Для малых значений, а именно, для $q_\kappa \le 0{,}1$ амплитудная функция уменьшается в два-три раза при $Z = 1$ по сравнению со своими значениями при $Z = 0$.

Поперечное трение служит добавочным стабилизирующим фактором, и для значений параметра поперечного трения, близких к единице, амплитудная функция уменьшается приблизительно в два раза. Однако произведения матричных элементов вычислены с точностью до линейных по $p_{\zeta\kappa}$ членов включительно, поэтому в полиноме (52) справедливо пользоваться малыми значениями этого параметра. Из числовых расчетов следует, что при $p_{\zeta\kappa}$=0,2 и значениях q_κ в интервале от 0,5 до очень больших значений амплитудная функция приблизительно равна 0,09. Такое же влияние оказывает учет поперечного трения и при $Z = 1$.

Универсальность значений квадрата амплитуды доминирующей волны объясняется следующим образом. Согласно формуле (53) квадрат модуля амплитуды составляется из произведения параметра надкритичности и амплитудной функции. (Область изменений параметра надкритичности требует учета температурных возмущений и будет рассмотрена в отдельной работе.) Амплитудная функция пропорциональна отношению квадратных трёхчленов, представленных формулами (52) и (53). Коэффициенты при степенях трёхчленов, содержащие зависимость от более мелкого масштаба пространственного размера возмущений на удвоенной гармонике, то есть от большей величины волнового вектора $\vec{k}_{2m} = 2\vec{k}_m$, меняются не очень сильно. Это отражено как в нелинейных матричных элементах (41) и (42), так и в выражениях (33) и (37). Отношение двух квадратных трёхчленов при изменении параметра q_κ изменяется как отношение коэффициентов этих трёхчленов при малых и больших q_κ, то есть также не очень сильно.

ВЫВОДЫ

В настоящей работе исследованы когерентные нелинейные диссипативные структуры в плазме, включающие волны, неустойчивые в линейной теории. Проведен выбор модельной системы уравнений и выведено, в результате регуляризации теории возмущений, основное нелинейное уравнение для волн. Дисперсия волн, инкременты их неустойчивости (декременты затухания) определяются градиентом логарифма невозмущенной или неравновесной плотности плазмы. В разделе о линейных и нелинейных соотношениях пороговой теории изучено самовоздействие волн кубическими нелинейностями, которые являются дестабилизирующими без добавок, полученных от регуляризации теории возмущений. Исследованы пороговые соотношения линейной теории.

Регуляризация нелинейной теории возмущений для низкочастотных градиентных колебаний плазмы произведена по двум пунктам. Во-первых, в нормальные функции включены диссипативные линейные и нелинейные части. Во-вторых, учтена зависимость нормальных функций от неоднородной координаты. И нелинейные

слагаемые основного уравнения для волн определяются как собственными нелинейными членами уравнений, так и новыми нелинейными членами, найденными от производных нормальной функции (15).

Такой способ получения нелинейных слагаемых в основном уравнении для волн представляет собой своего рода регуляризацию теории возмущений, учитывающую наличие в системе нелинейных и диссипативных членов разных порядков малости и их зависимостей от неоднородной координаты. Полученные нелинейные слагаемые основного уравнения ответственны за нелинейную стабилизацию неустойчивых в линейной теории волн. Кроме того, и это самое важное с физической точки зрения, такая перестройка теории возмущений позволяет развить последовательную нелинейную теорию, в которой одни и те же факторы позволяют найти аномальную волновую конвекцию вдоль неоднородной координаты и объяснить механизм стабилизации на конечном уровне амплитуды дрейфовых волн, неустойчивых в линейной теории.

К стабилизации дрейфово-диссипативной неустойчивости приводит совместное действие всех трёх известных причин, а именно: 1) кубическое самовоздействие волны с регуляризацией посредством учета в нормальной функции диссипативной части; 2) линейное и нелинейное затухание второй гармоники с квадратными матричными элементами, регуляризованными в результате учета производной от нормальной функции по неоднородной координате; и, наконец, 3) отличие, в линейной теории, дисперсии дрейфовой волны от линейного закона, например, по азимутальной компоненте волнового числа, в результате чего $\mathrm{Im}\, D_{2m} \neq 0$.

Нелинейная дрейфово-диссипативная структура состоит из доминирующей дрейфовой волны и синхронной с ней её второй гармоники. В результате вычислений в рамках редуцированной системы уравнений для квадрата модуля стационарной амплитуды доминирующей волны получено аналитическое выражение, равное произведению параметра надкритичности и амплитудной функции. Уровень амплитуды волны характеризуется универсальными значениями в широком диапазоне значений комбинированного параметра плотности и магнитного поля (29) (такой уровень амплитуды и его универсальность соответствуют измеренным значениям в широком круге экспериментальных исследований [11-14]). Физической причиной универсальности значений амплитудной функции является нелинейный механизм стабилизации доминирующей волны посредством перекачки энергии её колебаний в затухающую в линейной теории вторую гармонику.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moiseev S.S., Sagdeev R.Z. O koeffitsiente diffuzii Boma // ZhETF. – 1963. - T.44. - C.763.
2. Bohm D., Burhop E., Massy H.S.W., Williams R. The Characteristics of electrical discharge in magnetic fields // Eds. Gutrie and R.K. Wakerling. – 1949. – New York etc.: Mc Grow-Hill. – 376 p.
3. Rosenbluth M.N., Krall N.A., Rostoker N. Finite Larmor Radius Stabillization of "Weaklly" Unstable Confined Plasmas // Nucl. Fusion, Suppl., pt.1 - 1962. - P.143.
4. Mikhaylovskiy A.B. Kolebaniya neodnorodnoy plazmy / Voprosy teorii plazmy, vyp.3. / Pod red. M.A. Leontovicha. – M.: Gosatomizdat. - 1963. - S. 141-202.
5. Moiseev S.S., Sagdeev R.Z. Vliyanie konechnoy provodimosti na ustoychivost' plazmy v magnitnom pole // ZhTF. – 1964. - T.34. - C.248-253.
6. Rukhadze A.A., Silin V.P. Kineticheskaya teoriya dreyfovo-dissipativnykh neustoychivostey plazmy // UFN. – 1968. - T.96. - C.87.
7. Zaslavskiy G.M., Moiseev S.S. Ob anomal'noy diffuzii plazmy v magnitnom pole // ZhTF. – 1964. - T.34. - C.410-418.
8. Pearlstein L.D., Berk H.L. Universal Eigenmode in a Strongly Sheared Magnetic Field // Phys. Rev. Lett. - 1969. - Vol.23. - P.220-222.
9. Kroll N. Dreyfovye volny / Fizika vysokotemperaturnoy plazmy / Pod redaktsiey M.S. Rabinovicha. - M.: Mir, 1972. - S. 112-171.
10. Chen L., Guzdar P.N., Hsu J.Y., Kaw P.K., Oberman C., White R. Theory of Dissipative Drift Instabilities in Sheared Magnetic Fields // Nucl. Fusion. – 1979. - Vol.19. - P. 373-387.
11. Hendel H.W., Chu T.K., Politzer P.A. Collisional drift waves - identification, stabilization and enhanced plasma transport // Phys. Fluids. – 1968. - Vol.11. - P.2426-2439.
12. Chu T.K., Hendel H.W., Politzer P.A. Measurement of enhanced plasma losses caused by collisional drift waves // Phys. Rev. Lett. – 1967. - Vol.19. - P.1110-1113.
13. Hendel H.W., Chu T.K., Politzer P.A. Methods of Experimental Physics. Vol.9, Part A / Ed. H.R. Griem, R.H. Lovberg. - N.-Y., London: Academic Press., 1970. – P .377.
14. Ellis R.F., Motley R.W. Current-driven Collisional Drift Instability // Phys. Fluids. – 1974. - Vol.17. - P. 582-594.
15. Stix T.H. Finite Amplitude Drift Waves // Phys. Fluids. – 1969. - Vol.12. - P.627; Phys. Rev. Lett. – 1968. - Vol. 20. - P.1422.
16. Hinton F.L., Horton C.W. Amplitude Limitation of a Collisional Drift Wave Instability // Phys. Fluids. – 1971. - Vol.14. - P.116-123.
17. Monticello D.A., Simon A. Nonlinear Theory of the Collisional Drift-Wave Instability // Phys. Fluids. – 1974. - Vol.17. - P. 791-802.
18. D'Andzhelo N. Issledovanie tsezievoy plazmy / Fizika vysokotemperaturnoy plazmy / Pod redaktsiey M.S. Rabinovicha. M.: Mir, 1972. - S. 214-261.
19. Naumovets V.G., Pasechnik L.L., Popovich S.A. Issledovanie dreyfovo-dissipativnoy neustoychivosti v ogranichennoy gazorazryadnoy plazme // ZhTF. – 1972. - T. 42. - C. 270.
20. Yoshihara H., Iwayanagi T., Taniuti T. Nonlinear Collisional Drift-Waves near the Neutral Stable Points // J. Phys. Soc. Japan. – 1981. - Vol.50. - № 11. - P. 3751-3758.
21. Bondarenko V.E., Chechkin A.V. Dreyfovo-dissipativnaya neustoychivost' v slaboionizovannoy plazme vblizi poroga voz-

buzhdeniya // Fizika plazmy. – 1988. - T. 14, vyp. 9. - C. 1084-1093.
22. Vasil'ev A.A., Zaslavskiy G.M., Sagdeev R.Z., Chernikov A.A. O nelineynoy stadii dreyfovo-dissipativnoy neustoy-chivosti // Fizika plazmy. – 1990. - T. 16. - C. 1176-1185.
23. Mattor N., Diamond P.H. Drift wave propagation as a source of plasma edge turbulence: Slab theory // Phys. Plasmas. – 1994. - Vol. 1 (12). - P. 4002-4013.
24. Stoker Dzh. Dzh. Volny na vode. Matematicheskaya teoriya i prilozheniya. - M.: IIL, 1959. – 617s.
25. Larichev V.D., Reznik G.M. // DAN SSSR. – 1976. - T. 231. - C. 1077-1079.
26. Horton W. Nonlinear drift waves and transport in magnetized plasma // Phys. Reports. – 1990. - Vol.192., № 1-3. – R.177.
27. Meiss J.D., Horton W. Solitary drift waves in presence of magnetic shear // Phys. Fluids. – 1983. - Vol.26(4). - P.990-997.
28. Petviashvili V.I., Pogutse I.O. Vortices and nonlinear instabilities in inhomogeneous plasma // Reviews of Plasma Physics. Vol.20 / Edited by B.B. Kadomtsev. – N.Y.-London: Consultants Bureau. New York-London. – 1997. - P. 1-60.
29. Kono M., Miyashita E. Modon formation in the nonlinear development of the collisional drift wave instability // Phys. Fluids. – 1988. - Vol. 31(2). - P. 326-331.
30. Landau L.D. Kineticheskoe uravnenie v sluchae kulonovskogo vzaimodeystviya // ZhETF. – 1937. - T. 7. - C.203 -209.
31. Braginskiy V.B. Yavleniya perenosa v plazme / Voprosy teorii plazmy, vyp.1. - M. Atomizdat, 1963. - S. 183-272.
32. Mikhaylovskiy A.B. Neustoychivosti neodnorodnoy plazmy. Teoriya plazmennykh neustoychivostey. T.2. – Neustoychivo-sti neodnorodnoy plazmy. – M.: Atomizdat, 1977. - S. 360.
33. Vodyanitskiy A.A. O nelineynoy teorii dreyfovo-dissipativnoy neustoychivosti plazmy. I. / Khar'kov: KhFTI AN USSR, 1978. – 34 c. (Preprint / AN USSR. KhFTI 78-40).
34. Nemov V.V. The hydrodynamics of collisional plasma in a strong inhomogeneous magnetic field // Nucl. Fusion. – 1970. - Vol. 10. - P. 19.
35. Mikhailovskii A.B., Tsipin V.S. Transport equation and gradient instabilities in a high pressure collisional plasma // Plasma Phys. – 1971. - Vol. 13. - P. 785.
36. Mikhailovskii A.B. Drift wave stability under linear theta-pinch conditions // Nucl. Fusion. – 1972. - Vol. 12. - P. 55
37. Ladyzhenskaya O.A. Matematicheskie voprosy dinamiki vyazkoy neszhimaemoy zhidkosti. - M.: Nauka. Gl. red. FML, 1970. – 288 S.
38. Bogolyubov N.N., Mitropol'skiy Yu.A. Asimptoticheskie metody v teorii nelineynykh kolebaniy. - M.: Nauka. Gl. red. FML, 1970. – 503 s.
39. Vodyanitskiy A.A., Repalov N.S. Nelineynoe vzaimodeystvie prodol'nykh voln v neizotermicheskoy plazme // ZhTF. – 1970. T. XL, № 1. – P. 32-40.
40. Uizem Dzh. Lineynye i nelineynye volny. - M.: Izd. Mir, 1977. - 622s.
41. Kadomtsev B.B. Turbulentnost' v plazme. / Voprosy teorii plazmy, vyp.4. / Pod red. M.A. Leontovicha. – M.: Atomiz-dat. - 1964. - S. 188-339.
42. Tur A.V., Chechkin A.V., Yanovsky V.V. Negative Viscosity and Generation of Dissipative Solitons And Zonal Dissipative Structures // Phys. Fluids B. – 1992. - Vol.4. - №.11. - P.3513-3521.
43. Silin V.P. Kolebaniya slaboneodnorodnoy plazmy // ZhETF. – 1963. - T.44. - C.1271.
44. Vodyanitskiy A.A. Mnogovolnovye nelineynye porogovye rezhimy i diffuziya v usloviyakh dreyfovo-dissipativnoy neustoy-chivosti plazmy // II Mezhdunarodnaya konf. po teorii plazmy, - Kiev, 28 oktyabrya – 1 noyabrya 1974 g. - S.79.

УДК 533. 915

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСЕВОЙ СТРУКТУРЫ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА ПОСТОЯННОГО ТОКА В АЗОТЕ МЕТОДОМ ЛЕНГМЮРОВСКОГО ЗОНДА

В.А. Лисовский [1,2], В.А. Коваль [1], Е.А. Кравченко [1]
[1] *Харьковский национальный университет*
61022, Харьков, пл. Свободы 4, Украина
[2] *Научный физико-технологический центр МОН и НАН Украины*
Харьков, 61022, пл. Свободы, 6, Украина
e-mail: lisovskiy@yahoo.com
Received 14 February 2012, accepted 18 May 2012

В данной работе методом ленгмюровского зонда исследованы осевые профили температуры электронов, потенциала, напряженности электрического поля и плотности плазмы тлеющего разряда постоянного тока в азоте при различных давлениях газа. Показано, что в отрицательном свечении напряженность электрического поля мала, а осевые профили плотности плазмы и температуры электронов имеют максимумы. Вблизи границы отрицательного свечения и темного фарадеевого пространства перечисленные выше профили достигают минимумов. В положительном столбе при низких давлениях газа наблюдаются страты, в то время как при более высоких давлениях газа (выше 0,5 Торр) он становится однородным. Обнаружено, что осевой профиль плотности плазмы в темном фарадеевом пространстве достигает максимума, который может превышать среднюю плотность плазмы в положительном столбе. Причиной повышенной ионизации в темном фарадеевом пространстве, по-видимому, является ступенчатая ионизация метастабильных молекул азота электронами, набравшими достаточную энергию в усиливающемся электрическом поле. Целесообразно относить темное фарадеево пространство не к катодным частям тлеющего разряда, а называть начальной (предварительной) фазой положительного столба.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: тлеющий разряд, ленгмюровский зонд, темное фарадеево пространство, положительный столб, азот.

INVESTIGATION OF AXIAL STRUCTURE OF DC GLOW DISCHARGE IN NITROGEN BY LANGMUIR PROBE METHOD

V.A. Lisovskiy [1,2], V.A. Koval [1], E.A. Kravchenko [1]
[1] *Kharkov National University*
61022, Kharkov, Svobody sq. 4, Ukraine
[2] *Scientific Center of Physical Technologies*
Kharkiv, 61022, Svoboda Sq., 6, Ukraine
This work studies with a Langmuir probe axial profiles of such plasma parameters as electron temperature, plasma potential and concentration of the direct current glow discharge in nitrogen for various gas pressure values. The electric field strength is shown to be small in the negative glow whereas axial profiles of plasma concentration and electron temperature possess maxima. These parameters approach their minima near the interface separating the negative glow and the dark Faraday space. The strata are observed in the positive column at low gas pressure whereas at higher pressure (above 0.5 Torr) the column becomes uniform. The axial profile of plasma concentration in the dark Faraday space is found to attain a maximum that may exceed the average plasma concentration in the positive column. Increased ionization in the dark Faraday space may be caused by a step-like ionization of metastable nitrogen molecules by electrons having acquired the sufficient energy in the increasing electric field. It is expedient not to relate the dark Faraday space to cathode parts of the glow discharge but regard this space as a starting (preliminary) form of the positive column.
KEY WORDS: glow discharge, Langmuir probe, dark Faraday space, positive column, nitrogen.

ДОСЛІДЖЕННЯ ОСЬОВОЇ СТРУКТУРИ ТЛІЮЧОГО РОЗРЯДУ ПОСТІЙНОГО СТРУМУ В АЗОТІ МЕТОДОМ ЛЕНГМЮРІВСЬКОГО ЗОНДА

В.О. Лісовський [1,2], В.О. Коваль [1], К.О. Кравченко [1]
[1] *Харківський національний університет,*
61022, Харків, пл. Свободи 4, Україна
[2] *Науковий фізико-технологічний центр МОН і НАН України*
Харків, 61022, пл. Свободи, 6, Україна
У цій роботі методом ленгмюрівського зонда досліджено осьові профілі температури електронів, потенціалу, напружності електричного поля і густини плазми тліючого розряду постійного струму в азоті при різних тисках газу. Показано, що в негативному світінні напруженість електричного поля мала, а осьові профілі густини плазми і температури електронів мають максимуми. Поблизу межі негативного світіння і темного фарадеєвого простору перелічені вище профілі досягають мінімумів. У позитивному стовпі за низького тиску газу спостерігаються страти, в той час як при більш високому тиску газу (вище 0,5 Торр) він стає однорідним. Отримано, що осьовий профіль густини плазми в темному фарадеєвому просторі досягає максимуму, який може перевищувати середню густину плазми в позитивному стовпі. Причиною підвищеної іонізації в темному фарадеєвому просторі, мабуть, є ступінчаста іонізація метастабільних молекул азоту електронами, які набрали достатню енергію в електричному полі, що підсилюється. Доцільно віднести темний фарадеєвий простір не до катодних частин тліючого розряду, а називати початковою (попередньою) формою позитивного стовпа.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: тліючий розряд, ленгмюровський зонд, темний фарадеїв простір, позитивний стовп, азот.

© Lisovskiy V.A., Koval V.A., Kravchenko E.A., 2012

В последнее время тлеющий разряд стал все более широко использоваться в различных технологических процессах, в частности, в области лазерной техники, для модификации поверхности различных промышленных изделий [1-4]. Широкое распространение всевозможных технологических применений тлеющего разряда вновь возродило интерес к нему. В результате в последнее время было опубликовано большое число работ, посвященных изучению тлеющего разряда постоянного тока [1-14].

Схема слоистого тлеющего разряда, а также осевые распределения интенсивности разрядного свечения, электрического поля, потенциала, положительного и отрицательного пространственных зарядов, плотностей токов ионов и электронов приведены на рис. 1. Этот рисунок с незначительными вариациями повторяется в хорошо известных книгах по физике газового разряда [1,5-12]. По-видимому, оригинальным источником этого рисунка является книга Лёба [13], опубликованная в 1939 году. Такая картина осевого распределения параметров плазмы в тлеющем разряде в настоящее время является общепринятой. В более ранней книге Таунсенда [14] приведены только качественные осевые распределения напряженности электрического поля в тлеющем разряде. Считается, что в темном фарадеевом пространстве не может быть ни ионизации, ни процессов возбуждения молекул газа электронным ударом. Плотность плазмы имеет максимум в отрицательном свечении вблизи границы катодного слоя, затем при удалении от катода медленно уменьшается и достигает постоянного значения, соответствующего однородному положительному столбу. Ток в отрицательном свечении переносится диффузионным потоком, который в темном фарадеевом пространстве и положительном столбе сменяется дрейфовым потоком благодаря увеличению в этой области напряженности электрического поля.

Поскольку эта общепринятая картина основывается на старых экспериментальных результатах, полученных для загрязненных парами ртути газах, то имеется необходимость в более подробных исследованиях параметров плазмы. Таким образом, осевая структура разряда нуждается в уточнении.

Рассмотрим кратко некоторые работы, посвященные осевой структуре как всего тлеющего разряда, так и процессам в отдельных его частях. В [15,16] разработаны численные модели продольной структуры тлеющего разряда в гелии. Авторы получили осевые профили напряженности электрического поля, потенциала, концентрации электронов и ионов, а также средней энергии электронов.

Авторы [17] с помощью термосенсора показали, что сильный нагрев газа происходит вблизи катода, в темном фарадеевом пространстве осевой профиль температуры газа имеет минимум, но затем в положительном столбе достигает максимума. Обзор результатов работ, посвященных численному моделированию тлеющего разряда постоянного тока, приведен в работе [18]. Были рассмотрены основные математические и физические модели, которые используются для описания разрядов низкого давления.

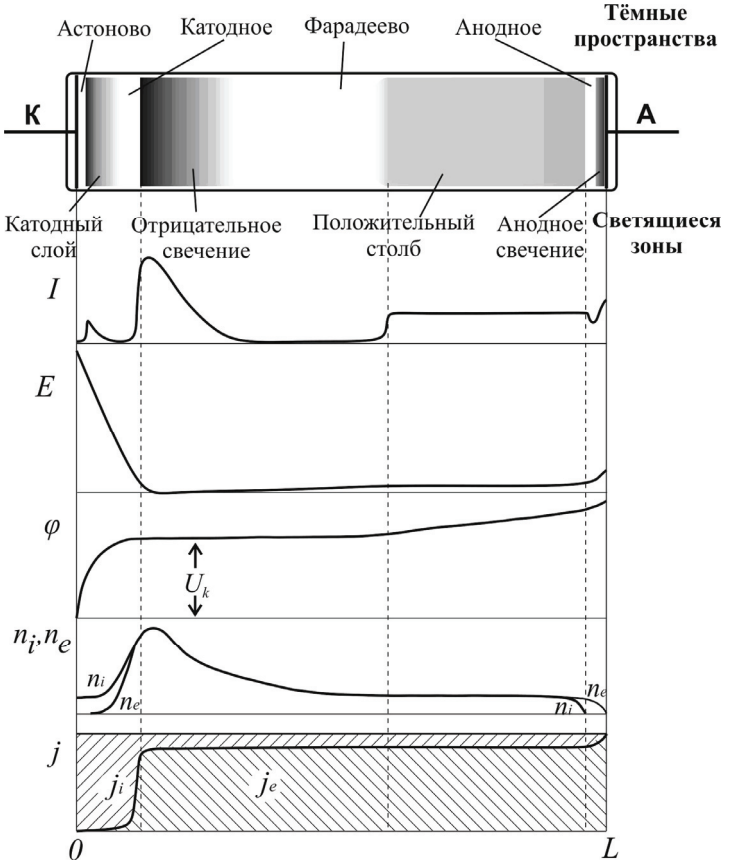


Рис.1. Распределение по длине разряда интенсивности свечения I, потенциала φ, напряженности поля E, плотностей зарядов и токов положительных ионов и электронов n_i и n_e, j_i и j_e.

Осевые профили плотности и температуры электронов в отрицательном свечении в гелии в узком зазоре между электродами были измерены в работе [19] с помощью ленгмюровского зонда. Полученные профили плотности имеют максимумы, а профили температуры – минимумы. В работе [20] показано, что средняя энергия электронов практически не изменяется вдоль всего отрицательного свечения аномального разряда в инертных газах, за исключением небольшого участка вблизи его начала. Автор работы [21] разработал кинетическую теорию отрицательного свечения. Полученные осевые профили температуры горячих электронов хорошо согласуются с экспериментальными результатами. Функции распределения электронов по энергии в отрицательном свечении в гелии и аргоне были измерены в [22]. Авторы аналитической модели [23] получили, что в отрицательном свечении может наблюдаться область с отрицательным полем, положение которой зависит

от длины энергетической релаксации быстрых электронов, пришедших из катодного слоя, толщины слоя и расстояния между электродами. Показано, что значительная часть ионов, созданных в отрицательном свечении, может уходить в катодный слой.

Авторы работ [24,25] показали, что отрицательное свечение излучает свет из-за столкновений быстрых электронов с атомами газа, в то время как в темном фарадеевом пространстве важную роль играют столкновения второго рода между нормальными и метастабильными атомами. При этом метастабильные атомы возникают при поглощении резонансного излучения, приходящего из отрицательного свечения. В работе [26] представлена аналитическая диффузионная модель, описывающая распределение плотности заряженных частиц в темном фарадеевом пространстве, и получены формулы, описывающие зависимость длины темного фарадеевого пространства от разрядного тока и давления газа. Автор [27] решил уравнения непрерывности для заряженных частиц в темном фарадеевом пространстве и описал переходы в механизмах переноса тока при увеличении расстояния между электродами. В работе [28] были измерены радиальные и осевые профили плотности плазмы и температуры электронов в отрицательном свечении и темном фарадеевом пространстве в слабо аномальном режиме в неоне.

Автор [29] представил аналитическую теорию, с помощью которой показал, что в темном фарадеевом пространстве при средних давлениях инертных газов средняя энергия электронов изменяется вдоль темного фарадеевого пространства под действием упругих столкновений и ударов второго рода с возбужденными атомами. В гелии во всем темном фарадеевом пространстве происходит существенный нагрев электронов, без которого оно не могло бы существовать. С помощью модели Hg-Ar тлеющего разряда [30] были получены осевые профили плотности плазмы и потенциала в отрицательном свечении и темном фарадеевом пространстве.

В работе [31] экспериментально было показано, что в нормальном тлеющем разряде увеличение длины темного фарадеевого пространства приводит к расширению области пониженной напряженности электрического поля. Этот эффект приводит к существованию стационарного разряда с отрицательной вольт-амперной характеристикой, при этом потери заряженных частиц из плазменной области вызваны амбиполярной диффузией. Осевое распределение параметров плазмы в темном фарадеевом пространстве было измерено авторами работы [32]. Получено, что осевое электрическое поле и температура электронов при удалении от катода увеличиваются, а плотность электронов уменьшается. Поток электронов в темном фарадеевом пространстве состоит из дрейфового потока, диффузионного и термодиффузионного потоков.

В книге Грановского [9] приведены результаты экспериментального исследования влияния СВЧ излучения на различные части тлеющего разряда. В отрицательном свечении и темном фарадеевом пространстве энергия электронов и напряженность электрического поля малы. Поэтому они являются наиболее чувствительными к внешним воздействиям на тлеющий разряд. При облучении различных частей тлеющего разряда СВЧ волнами наибольшее изменение разрядного тока наблюдается для фарадеевого темного пространства и близкой к нему части отрицательного свечения. СВЧ колебания вызывают возрастание интенсивности свечения из-за повышения вероятности возбуждения атомов электронным ударом, а также увеличение концентрации электронов благодаря усилению ионизации молекул газа.

Целью данной работы было экспериментально исследовать тлеющий разряд в азоте между плоскими параллельными электродами и методом одиночного ленгмюровского зонда определить осевые профили температуры электронов, потенциала и плотности плазмы для давлений газа в диапазоне $p = 0{,}05 - 0{,}5$ Торр.

УСЛОВИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Для изучения характеристик тлеющего разряда постоянного тока низкого давления использовался экспериментальный комплекс, блок-схема которого показана на рис. 2.

Вакуумная камера представляет собой отрезок цилиндрической трубы из стекла с внутренним диаметром 56 мм, вакуумно-уплотненный с торцов фланцами. Эксперименты проводились с внутренними плоскими электродами, изготовленными из нержавеющей стали. Внешний диаметр электродов равен 55 мм, т.е. немного меньше внутреннего диаметра разрядной трубки. Расстояние между катодом и анодом было равно $L = 245$ мм.

Исследования проводились в азоте в диапазоне давлений $p = 0{,}05 - 0{,}5$ Торр. Камера откачивалась форвакуумным насосом до предельного вакуума ($1 \cdot 10^{-3}$ Торр). Рабочий газ напускался при помощи системы напуска СНА-1, давление газа контролировалось вакуумным теплоэлектрическим

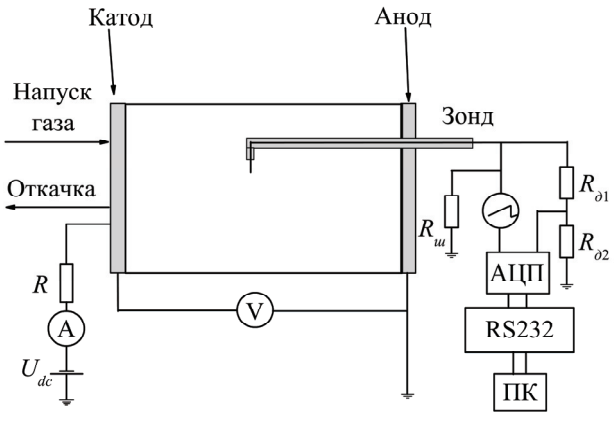


Рис.2. Блок-схема экспериментальной установки для исследования тлеющего разряда постоянного тока.

реле РВТ-2М. Погрешность измерения давления составляла 10 – 15 %. Давление газа в камере устанавливалось путем изменения сечения вакуумпровода регулируемым вакуумным клапаном, что обеспечивало постоянство скорости протока газа в камере при различных давлениях.

При исследовании тлеющего разряда постоянного тока на катод подавалось постоянное напряжение $U_{dc} \le 2000$ В. В разрядную цепь между катодом и источником постоянного напряжения последовательно подключался резистор сопротивлением 75 кОм.

Перед выполнением измерений проводили очистку поверхности катода, зажигая тлеющий разряд в азоте при давлении $p \approx 0{,}1$ Торр и разрядном токе $I_{dc} = 5$ мА в течение 10 мин. При этих условиях поток ионов на катод достаточно велик для удаления монослоев газов, оставшихся на поверхности катода после проведения механической шлифовки и полировки, но разрядный ток еще недостаточен для появления катодных пятен, приводящих к эрозии поверхности катода. Какие-либо внешние источники ионизации не использовались, исследовалось исключительно зажигание самостоятельного тлеющего разряда постоянного тока.

Осевые профили параметров плазмы измерялись с помощью одиночного цилиндрического ленгмюровского зонда, длина которого была равна 1,5 мм, а диаметр 0,18 мм. Зонд был изготовлен из нихрома. На зонд подавалось пилообразное напряжение с помощью генератора, при этом амплитуда этого напряжения примерно была равна 300 В. Это напряжение понижалось с помощью резистивного делителя (содержащего резисторы $R_{д1}$ и $R_{д2}$) и подавалось на 24-разрядный аналого-цифровой преобразователь (АЦП). Измеряемый зондовый ток шунтировался (резистор $R_{ш}$) и также подавался на АЦП. Сигнал с АЦП проходил через гальваническую развязку и с помощью интерфейса RS-232 подавался на компьютер для дальнейшей обработки.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Методика анализа зондовых вольт-амперных характеристик

Температура электронов T_e, потенциал плазмы φ и плотность плазмы n_i определялись с помощью одиночного цилиндрического ленгмюровского зонда, который мог перемещаться вдоль оси камеры.

На рис. 3 приведен пример полученной нами зондовой вольт-амперной характеристики. Для определения параметров плазмы использовалась следующая методика. Сначала мы находили вторую производную зондового тока по напряжению на зонде и в качестве потенциала плазмы принимали напряжение, при котором вторая производная зондового тока проходит через нуль (см. рис. 4). Ионная ветвь зондовой вольт-амперной характеристики I_i обычно описывается степенной зависимостью [33] $I_i = a\cdot(\varphi_{pl} - U_{pr})^b$ (рис. 5). Поэтому мы подбирали константы a и b для этой аппроксимационной формулы. Затем из измеренного зондового тока I_{pr} вычитался ионный ток I_i для определения электронного тока I_e на зонд $I_e = I_{pr} - I_i$. Зависимость натурального логарифма электронного тока $\ln(I_e)$ от потенциала на зонде U_{pr} (см. рис. 6) в диапазоне между плавающим и плазменным потенциалами имеет линейный участок (при условии, что холодные электроны имеют максвелловское распределение с температурой T_e). Тогда температура электронов определялась из угла наклона этого линейного участка по формуле $T_e = \Delta U_p/\Delta\ln(I_e)$ [эВ], в которую входит приращение логарифма электронного тока $\Delta\ln(I_e)$ в диапазоне потенциала на зонде ΔU_p, соответствующего данному линейному участку. Определенная из рис. 6 электронная температура равна 1,41 эВ.

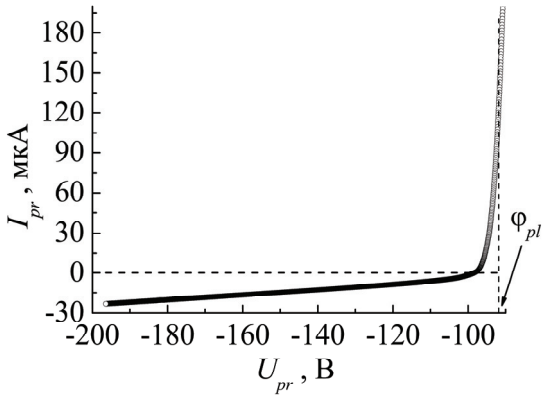


Рис.3. Вольт-амперная характеристика ленгмюровского зонда при давлении азота 0,3 Торр, разрядном токе 30 мА на расстоянии $L = 205$ мм от анода. Вертикальной пунктирной линией показан потенциал плазмы

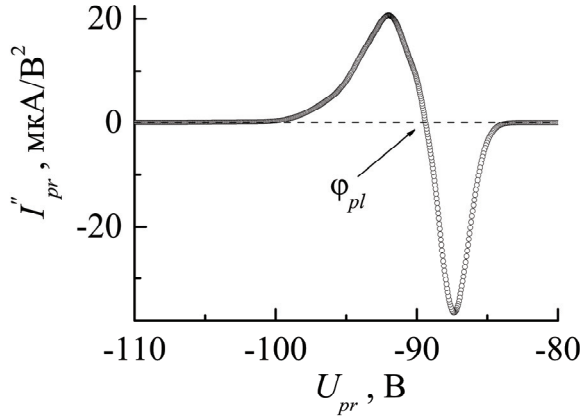


Рис.4. Вторая производная зондового тока по напряжению на зонде при давлении азота 0,3 Торр, разрядном токе 30 мА на расстоянии $L = 205$ мм от анода.

Плотность плазмы n_i рассчитывалась из ионной ветви зондового тока I_{pr} и измеренной температуры электронов T_e по методике, описанной в работах [34, 35]. Для этого использовалась формула

$$I_{pr,i} = I_i^* \cdot I^*, \qquad (1)$$

где
$$I^* = A\sqrt{\frac{kT_e}{2\pi M_i}}n_i e, \qquad (2)$$
$$I_i^* = \gamma_1\gamma_2 I_L^*,$$
k – константа Больцмана, M_i – масса иона; I^*_L – ток Лафрамбуаза,
$$I_L^* = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\eta}, \qquad (3)$$
$$\gamma_1 = 1 + \left(\frac{I_A^*}{I_L^*} - 1\right)\cdot X_i \qquad X_i < 1, \qquad (4)$$
$$\gamma_1 = \frac{I_A^*}{I_L^*} \qquad X_i \geq 1$$
$$\gamma_2 = \frac{3 - 2\cdot\exp(-X_i)}{1 + 2\cdot X_i} \qquad X_i < 1 \qquad (5)$$
$$\gamma_2 = \frac{3 - 2\cdot\exp(-X_i)}{2\cdot(1 + X_i)} \qquad X_i \geq 1$$

Здесь
$$X_i = \frac{\sqrt{\bar{\eta}}}{D_\lambda K_i}, \qquad (6)$$
$\bar{\eta} = m\cdot(\eta + 3.5) - 4$, $m \approx 0.59 + 1.86\cdot(D_\lambda)^{0.47}$, $K_i = \lambda_i/R$ (R – радиус зонда, λ_i – длина свободного пробега ионов, обратно пропорциональная давлению газа), $D_\lambda = R/\lambda_D$ (λ_D – радиус Дебая, зависящий от плотности плазмы и температуры электронов), $I_A^* = 0.5\cdot(\eta/0.17)^\alpha$, $\alpha = 0.65\cdot(D_\lambda)^{0.47}$, $\eta = eU_{pr}/kT_e$ безразмерный ток зонда, равный нулю при потенциале, равном потенциалу плазмы. Таким образом, коэффициенты γ_1 и γ_2 являются функциями, зависящими от величин плотности ионов, температуры электронов и давления газа [34,35]:
$$\gamma_1, \gamma_2 = f_{1,2}(n_i, T_e, p)\cdot \qquad (7)$$

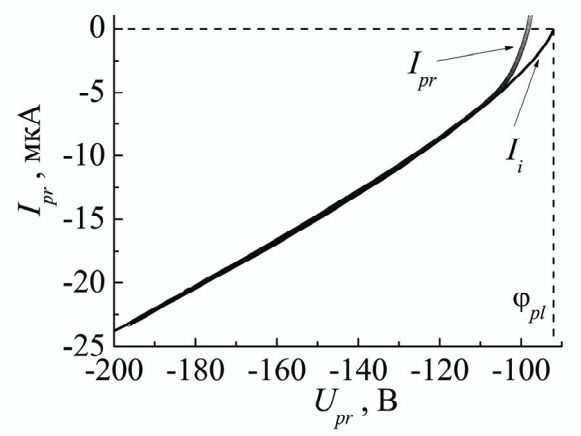


Рис.5. Измеренная зондовая вольт-амперная характеристика I_{pr} и ее ионная ветвь (сплошная линия I_i) при давлении азота 0,3 Торр, разрядном токе 30 мА на расстоянии L = 205 мм от анода. Вертикальной пунктирной линией показан потенциал плазмы.

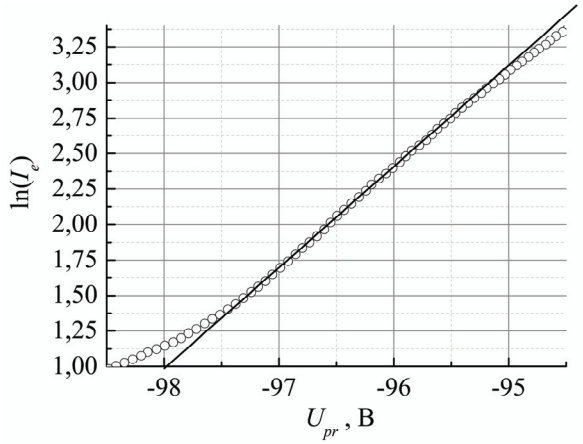


Рис.6. Зависимость натурального логарифма электронного тока на зонд от зондового напряжения при давлении азота 0,3 Торр, разрядном токе 30 мА на расстоянии L = 205 мм от анода.

Подстановка (2-7) в (1) дает уравнение, левая часть которого содержит измеряемый нами ионный ток на зонд, а правая часть – функцию давления газа, температуры электронов и плотности плазмы. Численное решение этого уравнения позволило определить плотность положительных ионов. При этом использовались значения температуры электронов и ионного тока на зонд, определенные из зондовых вольт-амперных характеристик. Методика [34,35] позволяет измерять плотность плазмы с точностью не хуже 10 - 20%.

Осевые профили тлеющего разряда в азоте

Рассмотрим осевые профили параметров плазмы, определенные с помощью ленгмюровского зонда. Полученные нами результаты для различных давлений газа и разрядных токов представлены на рис.7-10. На этих рисунках анод располагается слева, а катод – справа.

На рис. 7 показаны осевые профили для давления азота 0,05 Торр, а также соответствующая этим профилям фотография разряда. Из фотографии видно, что при таких условиях тлеющий разряд состоит из катодного слоя

и отрицательного свечения, которое достигает поверхности анода. Почти во всем разрядном промежутке температура электронов T_e была равна 0,3 – 0,5 эВ и только вблизи границы отрицательного свечения и катодного слоя мы видим резкое увеличение T_e, связанное с повышением напряженности электрического поля при приближении к катоду. Из рис. 7 видно, что на всем отрицательном свечении падение напряжения составляет около 3 В. В отрицательном свечении электрическое поле обычно мало, средняя напряженность поля была примерно равна 0,2 В/см. Осевой профиль плотности положительных ионов имеет максимум в отрицательном свечении недалеко от границы катодного слоя. При удалении от катода плотность ионов монотонно спадает почти до самого анода по одному и тому же степенному закону $1/z^{0.8}$, если координату z отсчитывать от поверхности катода. И только вблизи поверхности анода плотность ионов быстро спадает до нуля.

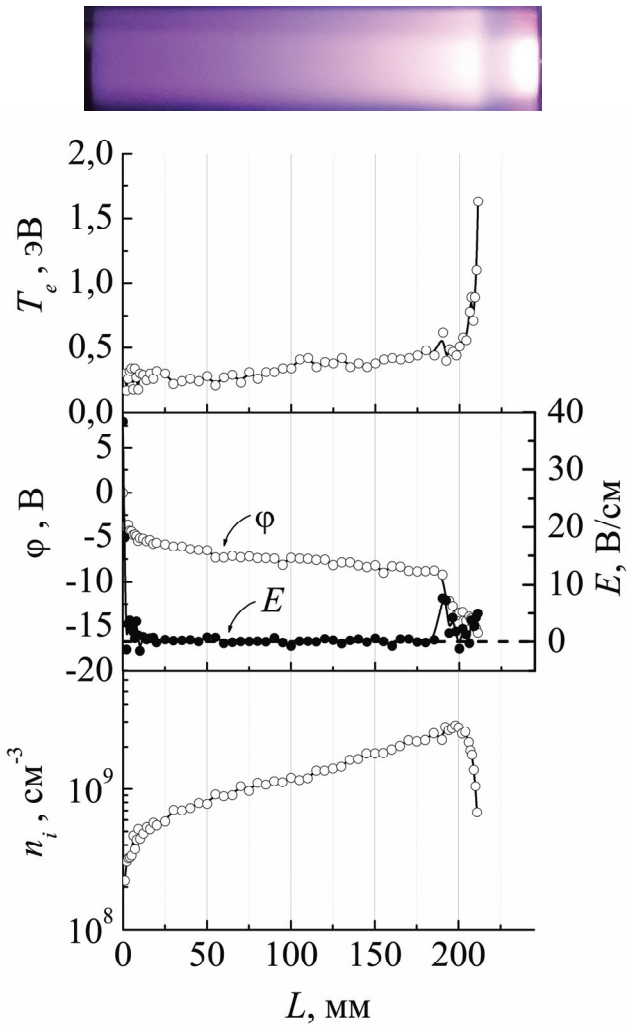


Рис.7. Фотография разряда, а также осевые профили температуры электронов, потенциала плазмы, напряженности электрического поля и плотности положительных ионов при давлении азота 0,05 Торр и величине разрядного тока 1 мА.

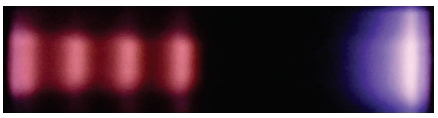
Зондовые измерения в катодном слое затруднены, так как в нем концентрация электронов мала и быстро спадает при удалении от границы слоя к катоду, электронная ветвь зондовой вольт-амперной характеристики почти не видна. Ионы движутся на поверхность зонда направленным потоком. Это приводит к возмущению формы ионной ветви, и используемая нами методика анализа вольт-амперной характеристики зонда становится некорректной.

Теперь рассмотрим случай для более высокого давления газа. На рис. 8 представлены результаты для давления азота 0,3 Торр, при этом величина разрядного тока была равна 5 мА. Из фотографии видно, что при этих условиях тлеющий разряд состоит из узкого катодного слоя, отрицательного свечения (которое простиралось от границы катодного слоя по направлению к аноду примерно на 50 мм), темного фарадеевого пространства (в котором отсутствует какое-либо свечение), положительного столба (состоящего в данном случае из трех страт), а также анодного свечения, которое прижимается к поверхности анода.

Температура электронов в отрицательном свечении при удалении от границы катодного слоя уменьшается и достигает наименьшего значения $T_e \approx 1{,}2$ эВ на анодном конце отрицательного свечения. На протяжении темного фарадеевого пространства температура электронов монотонно увеличивается до примерно 2,5 эВ. Переход от темного фарадеевого пространства к положительному столбу сопровождается резким увеличением температуры электронов (от 2,5 до более чем 5 – 5,5 эВ). Слоистый положительный столб состоит из страт – чередующихся светлых и темных областей, в которых, соответственно, преобладают процессы рождения и потерь заряженных частиц. В светлых областях температура электронов достигает примерно 5 эВ как в первой, так и последующих стратах. В темных областях $T_e \approx 3{,}5$ эВ, т.е. перепад температуры электронов на длине одной страты составляет примерно 1,5 эВ. В анодном свечении температура электронов также близка к 5 эВ, что говорит о подобии процессов как в этой области, так и в слоистом положительном столбе.

Осевой профиль потенциала плазмы на рис. 8 имеет следующие особенности. Падение потенциала плазмы на отрицательном свечении примерно равно 5 В (а напряженность электрического поля в этой области разряда отрицательна и достигает 3,5 В/см), что на порядок величины больше, чем предсказано в теоретической работе [16]. Это поведение потенциала показано на врезке к рис. 8, сокращения на которой ТФП и ОС означают темное фарадеево пространство и отрицательное свечение, соответственно. В отрицательном свечении основная масса холодных электронов находится в потенциальной яме, формируя профиль плотности плазмы, и не переносит разрядный ток. Из осевого профиля потенциала следует, что из приложенных к электродам 630 В

на катодном слое падение напряжения составляет примерно 420 В, на темное фарадеево пространство приходится 30 В, на весь положительный столб – около 140 В и примерно 40 В упало на анодном слое. Осевой профиль плотности плазмы, как и при низком давлении, имеет максимум в отрицательном свечении вблизи границы катодного слоя. На протяжении отрицательного свечения плотность плазмы падает примерно в 16 раз и достигает минимума в области перехода в темное фарадеево пространство. Однако затем плотность плазмы возрастает более чем в 2 раза, и в темном фарадеевом пространстве наблюдается максимум n_i. Отсюда следует, что в центральной части темного фарадеевого пространства существует область повышенной ионизации, которая не показывает своего существования каким-либо заметным свечением. На анодном конце темного фарадеевого пространства плотность плазмы примерно на 20 % понижается. В слоистом положительном столбе каждой страте соответствует свой локальный максимум плотности плазмы, при этом в ближайшей к аноду страте плотность плазмы ниже, чем в других стратах, что, по-видимому, связано с уходом электронов на анод.



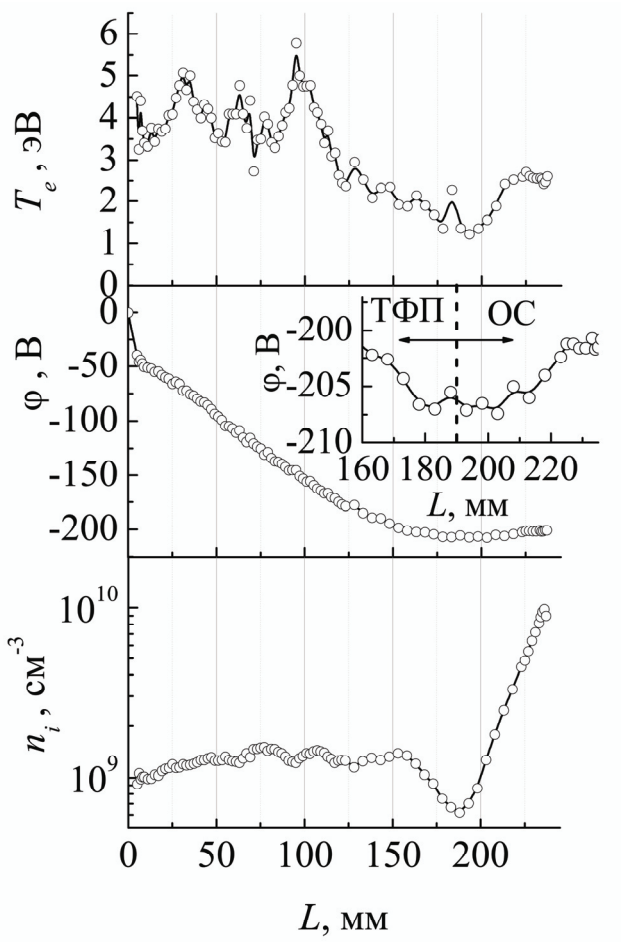


Рис.8. Фотография разряда, а также осевые профили температуры электронов, потенциала плазмы и плотности положительных ионов при давлении азота 0,3 Торр и величине разрядного тока 5 мА.

Повышение разрядного тока до 30 мА (при том же давлении 0,3 Торр, см. рис. 9) привело к следующим изменениям в структуре разряда. Отрицательное свечение распространилось в сторону анода и теперь его длина составляет примерно 130 мм. Длина темного фарадеевого пространства уменьшилась от 95 мм до 70 мм. Положительный столб прижался к аноду и теперь состоит всего из одной полной страты, а вблизи поверхности анода мы видим анодное свечение. Температура электронов T_e в отрицательном свечении была примерно равна 1 – 1,5 эВ, при переходе к темному фарадеевому пространству T_e уменьшилась до 0,8 эВ, затем в середине темного фарадеевого пространства достигла 1,2 эВ, потом после небольшого понижения до 1 эВ мы видим переход к положительному столбу с резким увеличением температуры электронов до 5,5 эВ. Как и в случае низких токов, перепад температуры электронов на одной страте был примерно равен 1,5 эВ. Очередное повышение температуры электронов до 5 эВ соответствует анодному свечению. Из осевого профиля потенциала плазмы следует, что в отрицательном свечении напряженность электрического поля изменялась слабо и была около 1 В/см. При переходе от отрицательного свечения к темному фарадеевому пространству, как и в случае малых токов, также видна область с отрицательным полем. Однако сейчас она выражена гораздо слабее, а перепад потенциала, приводящий к появлению этой области, не превышает 0,5 В. При дальнейшем удалении от катода мы видим монотонное увеличение потенциала с перегибом, соответствующим страте. Напряженность электрического поля в страте превышает 20 В/см, что соответствует приведенному электрическому полю E/p = 68,3 В/(см Торр). Быстрый рост потенциала вблизи анода указывает на наличие сильного поля в анодном свечении (до 40 В/см). При большом разрядном токе осевой профиль плотности плазмы также имеет максимум в отрицательном свечении вблизи его границы с катодным слоем, а минимум – при переходе к темному фарадееву пространству, при этом плотность плазмы падает примерно в 16 раз (как и в случае малых токов). В области монотонного роста потенциала в темном фарадеевом пространстве также наблюдается повышение плотности плазмы вплоть до $4{,}7\cdot10^9$ см$^{-3}$. Отметим, что в страте положительного столба плотность плазмы оказалась в 1,3 раза меньше, чем в темном фарадеевом пространстве. Последний максимум на осевом профиле плотности плазмы наблюдается в анодном свечении, где n_i достигла $4\cdot10^9$ см$^{-3}$.

При давлении азота 0,5 Торр (рис.10) разряд состоит из узкого катодного слоя, отрицательного свечения (простирающегося от поверхности катода до примерно 45 мм), темного фарадеевого пространства и почти

однородного положительного столба, а также анодного свечения. При этих условиях температура электронов заметно меньше, чем при более низком давлении. Ее минимальное значение (0,45 эВ) наблюдается вблизи границы отрицательного свечения и темного фарадеевого пространства. В отрицательном свечении при удалении от катода наблюдаются быстрый спад плотности плазмы (примерно в 15 раз) и медленное уменьшение температуры электронов при почти постоянном потенциале плазмы. Как и на предыдущих рисунках, в темном фарадеевом пространстве при удалении от катода температура электронов и потенциал плазмы монотонно увеличиваются, а плотность плазмы возрастает, достигает максимума и затем немного понижается до значения, соответствующего положительному столбу. Температура электронов, напряженность электрического поля ($E \approx 17{,}5$ В/см, $E/p \approx 35$ В/(см·Торр)), а также плотность плазмы сохраняются почти постоянными в положительном столбе. И только вблизи анода наблюдается уменьшение плотности плазмы.



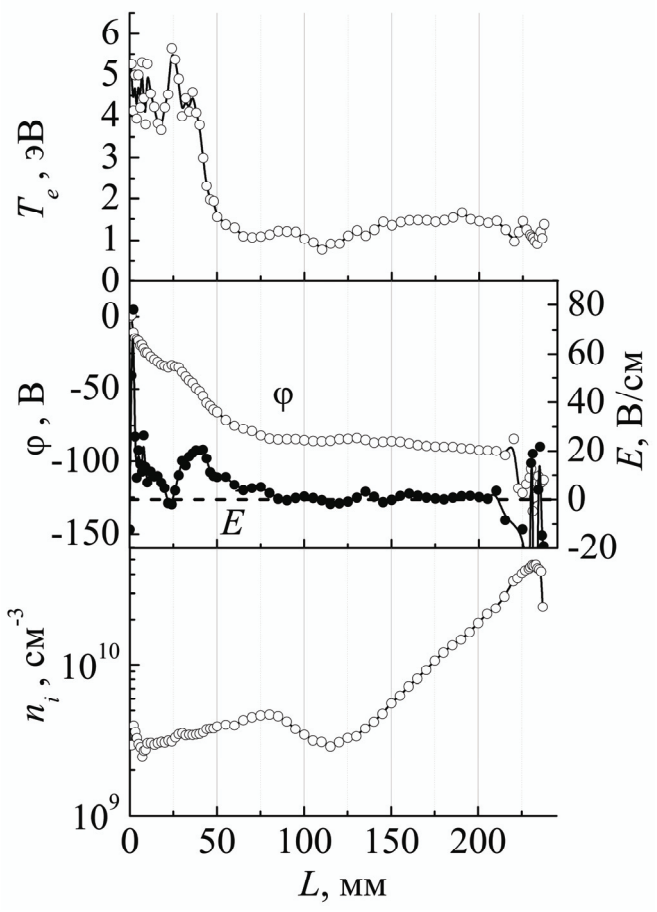


Рис.9. Фотография разряда, а также осевые профили температуры электронов, потенциала плазмы, напряженности электрического поля и плотности ионов при давлении азота 0,3 Торр и величине разрядного тока 30 мА.

Общей особенностью осевых профилей параметров плазмы, представленных на рисунках 8 – 10, является наличие максимума плотности плазмы, который располагается в темном фарадеевом пространстве. Общепринятым является мнение, что ток в отрицательном свечении переносится диффузионным потоком, который в темном фарадеевом пространстве сменяется дрейфовым потоком благодаря увеличению в этой области напряженности электрического поля. Плотность плазмы при этом медленно уменьшается и достигает постоянного значения, соответствующего однородному положительному столбу. Согласно этому мнению, в темном фарадеевом пространстве не может быть не только ионизации, но и даже процессов возбуждения молекул газа электронами. В то же время, как показано в книге Грановского [9], наиболее чувствительной к СВЧ облучению частью тлеющего разряда оказалось именно темное фарадеево пространство. Поэтому очевидно, что процессы в темном фарадеевом пространстве оказались изученными недостаточно подробно. Наличие максимума плотности плазмы в темном фарадеевом пространстве, полученное в настоящей работе, не было описано ранее в известной нам литературе и является новым результатом.

По-видимому, в процессах в темном фарадеевом пространстве большую роль играют долгоживущие метастабильные молекулы азота. Их концентрация наиболее велика в катодной части отрицательного свечения, где происходят интенсивные возбуждающие и ионизующие столкновения быстрых электронов с молекулами газа. Образовавшиеся метастабильные молекулы диффундируют вдоль трубки в сторону анода, частично дезактивируясь на поверхности трубки и в плазменном объеме при столкновениях друг с другом, а также с нейтральными и заряженными частицами. На анодном конце отрицательного свечения их концентрация должна быть все еще велика, здесь же присутствует довольно большое количество быстрых электронов, энергия которых заметно превышает температуру холодных электронов, но уже недостаточна для неупругих столкновений с молекулами газа. В темном фарадеевом пространстве напряженность электрического поля возрастает, что увеличивает энергию как холодных, так и более быстрых электронов. При столкновениях электронов, имеющих достаточно большую энергию, с метастабильными молекулами азота может происходить ступенчатая ионизация. По-видимому, именно этот процесс приводит к появлению максимума плотности плазмы в темном фарадеевом пространстве. Так как концентрация метастабильных молекул азота уменьшается с удалением от поверхности катода, то и плотность плазмы, достигнув максимума, затем понижается. В темном фарадеевом пространстве могут играть роль такие процессы, как ассоциативная ионизация при столкновении двух метастабильных молекул азота, ионизация

метастабилей фотонами, пришедшими из отрицательного свечения, а также удары второго рода, при которых быстрые электроны получают энергию от метастабильных молекул и в дальнейшем могут совершать ионизующие столкновения с невозбужденными молекулами газа.

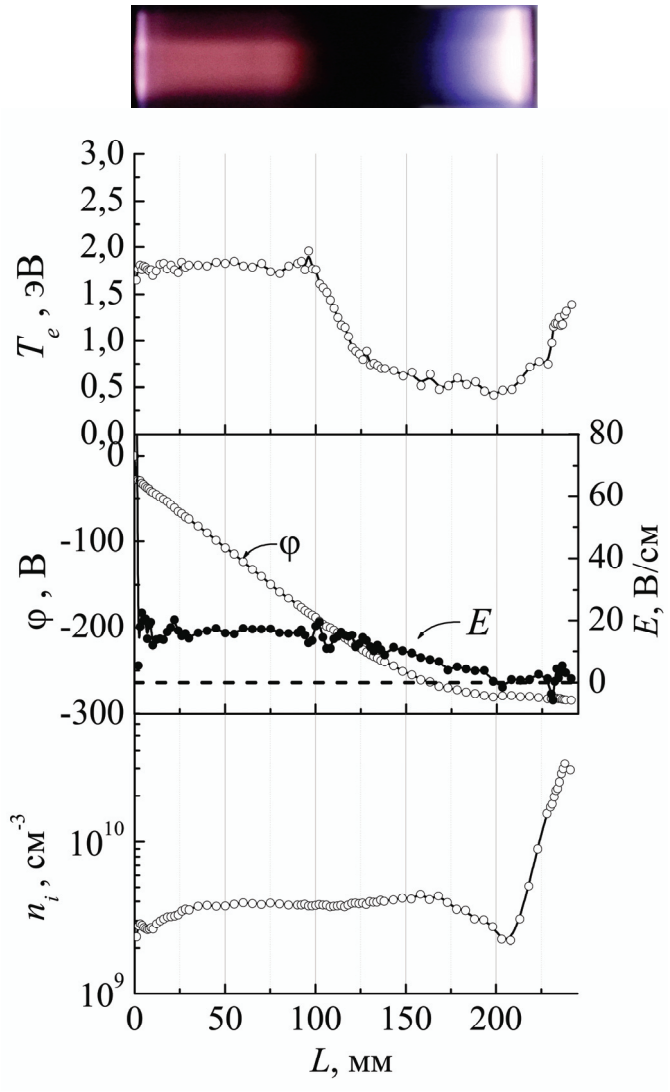


Рис.10. Фотография разряда, а также осевые профили температуры электронов, напряженности электрического поля потенциала плазмы и плотности положительных ионов при давлении азота 0,5 Торр и величине разрядного тока 15 мА.

Обычно темное фарадеево пространство относят к катодным частям тлеющего разряда, в состав которых входят также катодный слой и отрицательное свечение. В книге Грановского [9] эту область называют переходной от катодных частей к положительному столбу. Полученные нами результаты свидетельствуют о том, что темное фарадеево пространство не может быть отнесено к катодным частям, так как в нем присутствуют процессы интенсивной ионизации. По-видимому, оно является начальной (предварительной) фазой положительного столба.

ВЫВОДЫ

В работе методом одиночного ленгмюровского зонда исследованы осевые профили параметров плазмы (температуры электронов, напряженности электрического поля, потенциала и плотности плазмы) тлеющего разряда постоянного тока в азоте для давлений газа в диапазоне p = 0,05 – 0,5 Торр. Измерения проведены в трубке диаметром 55 мм при расстоянии между электродами 245 мм.

Получено, что максимумы плотности плазмы и температуры электронов наблюдаются в отрицательном свечении, где напряженность электрического поля мала. Минимумы этих параметров находятся на границе отрицательного свечения и темного фарадеевого пространства. При низких давлениях газа положительный столб стратифицирован, а при давлениях газа выше 0,5 Торр становится однородным.

Обнаружено, что в темном фарадеевом пространстве осевой профиль плотности плазмы имеет максимум, который может быть даже выше, чем средняя плотность плазмы в положительном столбе (этот результат не был описан в литературе и является новым). По-видимому, в этой области разряда электроны набирают достаточную энергию в усиливающемся электрическом поле, и может происходить ступенчатая ионизация при их столкновениях с метастабильными молекулами азота. Целесообразно назвать темное фарадеево пространство начальной (предварительной) фазой положительного столба, так как в нем присутствуют процессы ионизации, сравнимые по интенсивности с положительным столбом.

Планируется провести зондовые исследования осевой структуры тлеющего разряда в других газах (аргон, кислород, N_2O), а не только в азоте, чтобы уточнить механизм повышенной ионизации в темном фарадеевом пространстве.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rayzer Yu.P. Fizika gazovogo razryada. – M.: Nauka, 1987. - 592 s.
2. Zvelto O. Printsipy lazerov. – M.: Mir, 1990. – 560 s.
3. Chen F.F. Industrial applications of low-temperature plasma physics // Phys. Plasmas. – 1995. – Vol. 2, № 6. – P. 2164–2175.
4. Soloshenko I.A., Tsiolko V.V., Khomich V.A., Shchedrin A.I., Ryabtsev A.V., Bazhenov V.Yu., Mikhno I.L. Sterilization of medical products in low-pressure glow discharges // Plasma Physics Reports. – 2000. – Vol.26, №.9. – P. 792-800.
5. Engel' A. Ionizovannye gazy. – M.: Gos. izd-vo fiz.-mat. lit-ry, 1959. - 332 s.
6. Khovatson A.M. Vvedenie v teoriyu gazovogo razryada. – M.: Atomizdat, 1980. - 184 s.
7. Lieberman M.A., Lichtenberg A.J. Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. - New York: Wiley. – 1994. – 572 p.
8. Von Engel A. Electric Plasmas: Their Nature and Uses. – London: Taylor and Francis, 1983. – 242 p.

9. Granovskiy V.L. Elektricheskiy tok v gazakh. - M.: Nauka, 1971. - 490 s.
10. Brown S.C. Basic Data of Plasma Physics. – New York: The Massachusetts Institute of Technology and Wiley, 1959. – 336 p.
11. Francis G. The Glow Discharge at Low Pressure. in Encyclopedia of Physics, Ed. Flugge S., 1956, Springer, Berlin, Vol. 22, P.53-208.
12. Leb L. Osnovnye protsessy elektricheskikh razryadov v gazakh. – M.: Gos. izd-vo tekhniko-teoreticheskoy literatury, 1950. – 672 s.
13. Loeb L.B. Fundamental Processes in Electrical Discharges in Gases. - New York: Wiley. – 1939. – 371 p.
14. Townsend J.S. Electricity in Gases. – Oxford: Clarendon Press, 1915, 496 p.
15. Raizer Yu.P., Shneider M.N. Simplified kinetic equation for electrons in nonuniform fields of arbitrary strength in connection with the cathode sheath of a glow discharge // Soviet J. Plasma phys. – 1989. – Vol. 15, №. 3. – P. 184-191.
16. Raizer Yu.P., Shneider M.N. Longitudinal structure of the cathode portions of glow discharges // High temperature. – 1991. – Vol.29, №. 6. – P. 833-844.
17. Everett V., Jones K.T., Scelsi G.B., Woolsey G.A. Measurement of Electrical Discharge Parameters Using Optical Fibres // Aust. J. Phys. - 1995. - Vol. 48, №.3. - P. 527-541.
18. Lister G.G. Low-pressure gas discharge modeling // J. Phys. D: Appl. Phys. - 1992. - Vol. 25, №. 12. - P. 1649-1680.
19. Anderson J.M. Ultimate and Secondary Electron Energies in the Negative Glow of a Cold-Cathode Discharge in Helium // J. Appl. Phys. - 1960. - Vol. 31, №. 3. - P. 511-515.
20. Solntsev, G.S., Orlov, A.I., and Dovzhenko, V.A., On the Mechanism of Determination of the Function of Energy Distribution of Electrons in the Plasma of Negative Glow Discharge // Radiotekh. Elektron. – 1970. – Vol.15, №.9. – P. 1980-1982.
21. Aleskovskii A.M. Kinetic Theory of the Negative Glow // Soviet Phys. Techn. Phys. - 1972. – Vol. 17, №.9. – p. 1458-1464.
22. Evtushenko G.S., Gridnev A.G., Murav'ev I.I. Distribution of electrokinetic characteristics in a negative glow discharge plasma // Russian Physics Journal. - 1975. – Vol.18, №. 9. - P. 1281-1286.
23. Boeuf J.P., Pitchford L.C. Field reversal in the negative glow of a DC glow discharge // J. Phys. D: Appl. Phys. - 1995. - Vol. 28, №. 10. - P. 2083-2088.
24. Emeleus K.G. The Faraday Dark Space // Proceedings of the Royal Irish Academy. - 1934/1935. - Vol. 42. - P. 31-36.
25. Emeleus K.G., Duffendack O.S. Spectral and Impact Phenomena in the Faraday Dark Space // Phys. Rev. . – 1935. –Vol.47, №. 6. – P. 460–466.
26. Ecker G., Emeleus K.G. On the Diffusion Theory of the Faraday Dark Space // Annalen der Physik. – 1965. – Vol.470, №. 1-2. – P. 53–59.
27. Hurt W.B. The Faraday Dark Space of a Glow Discharge // American Journal of Physics – 1969. – Vol.37, №. 1. - P. 47-51.
28. Woolsey G.A., Reynolds R.M., Montgomery W.B., Emeleus K.G. The negative glow and Faraday dark space in near-normal neon discharges // International Journal of Electronics – 1969. – Vol.26, №. 6. – P. 505-517.
29. Aizentson A.E. Diffusion model for the Faraday Dark Space in a Glow Discharge// Soviet Phys. Techn. Phys. – 1972. – Vol.16. – p. 2032-2037.
30. Coe S.E., Lister G.G. Modeling of the negative glow and Faraday dark space of a low-pressure Hg–noble gas discharge // Journal of Applied Physics – 1992. – Vol.71, №. 10. – P. 4781-4787.
31. Vysikailo F.I., Glova A.F., Smakotin M.M. Steady-state glow discharge in nitrogen with a negative current-voltage characteristic // Soviet J. Plasma Phys. – 1988. – Vol. 14, №. 6. – P. 434-435.
32. Kagan Yu.M., Cohen C., Avivi P. The Faraday dark space of a He glow discharge // J. Appl. Phys. - 1988. - Vol. 63, №. 1. - P. 60-63.
33. Schulz G.J., Brown S.C. Microwave Study of Positive Ion Collection by Probe // Phys. Rev. – 1955. – Vol.98, №. 6. – P. 1642–1649.
34. Zakrzewski Z., Kopiczynski T. Effect of collisions on positive ion collection by a cylindrical Langmuir probe // Plasma Physics. – 1974. – Vol.16. – P. 1195–1198.
35. Tichy M., Sicha M., David P., David T. A Collisional Model of the Positive Ion Collection by a Cylindrical Langmuir probe // Contrib. Plasma Phys. – 1994. – Vol.34, №. 1. – P. 59–68.

УДК 533. 915

АМБИПОЛЯРНАЯ ДИФФУЗИЯ В ПЛАЗМЕ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ ЭЛЕКТРОНОВ, ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ И ДВУХ СОРТОВ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ ИОНОВ

В.А. Лисовский [1,2]
[1] *Харьковский национальный университет*
61022, Харьков, пл. Свободы 4, Украина
[2] *Научный физико-технологический центр МОН и НАН Украины*
Харьков, 61022, пл. Свободы, 6, Украина
e-mail: lisovskiy@yahoo.com
Received 8 April 2012, accepted 18 May 2012
В данной работе исследована амбиполярная диффузия в электроотрицательной плазме. Рассмотрен случай плазмы, содержащей электроны, один сорт отрицательных ионов и два сорта положительных ионов. Получены формулы для коэффициента амбиполярной диффузии, которые в предельных случаях (один сорт отрицательных ионов, электроположительная плазма) приводятся к хорошо известным результатам. Показано, что в плазме с плотностью отрицательных ионов, более чем в 10 раз превышающей плотность электронов, необходимо учитывать подвижность отрицательных и положительных ионов. Выяснено, что в сильно электроотрицательной плазме диффузия перестает быть амбиполярной, коэффициенты амбиполярной диффузии заряженных частиц примерно равны их коэффициентам свободной диффузии.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: амбиполярная диффузия, отрицательные ионы, положительные ионы, электроотрицательная плазма.

AMBIPOLAR DIFFUSION IN A PLASMA CONSISTING OF ELECTRONS, NEGATIVE IONS AND TWO TYPES OF OF POSITIVE IONS

V.A. Lisovskiy [1,2]
[1] *Kharkov National University*
61022, Kharkov, Svobody sq. 4, Ukraine
[2] *Scientific Center of Physical Technologies*
Kharkiv, 61022, Svoboda Sq., 6, Ukraine
In this work we investigated the ambipolar diffusion in electronegative plasma. The case of a plasma containing electrons, one kind of negative ions and two kinds of positive ions is considered. The formulas for the coefficient of ambipolar diffusion are obtained, which in extreme cases (one kind of negative ions, electropositive plasma) give the well-known results. It is shown that in a plasma with a density of negative ions more than 10 times higher the density of electrons, it is necessary to take into account the mobility of positive and negative ions. It was found that in strongly electronegative plasmas diffusion is no longer ambipolar, the ambipolar diffusion coefficients of charged particles are approximately equal to their free diffusion coefficients.
KEY WORDS: ambipolar diffusion, negative ions, positive ions, electronegative plasma.

АМБІПОЛЯРНА ДИФУЗІЯ В ПЛАЗМІ, ЩО СКЛАДАЄТЬСЯ З ЕЛЕКТРОНІВ, НЕГАТИВНИХ ІОНІВ І ДВОХ СОРТІВ ПОЗИТИВНИХ ІОНІВ

В.О. Лісовський [1,2]
[1] *Харківський національний університет*
61022, Харків, пл. Свободи 4, Україна
[2] *Науковий фізико-технологічний центр МОН і НАН України*
Харків, 61022, пл. Свободи, 6, Україна
У цій роботі досліджено амбіполярну дифузію в електронегативній плазмі. Розглянуто випадок плазми, яка містить електрони, один сорт негативних іонів і два сорти позитивних іонів. Отримано формули для коефіцієнта амбіполярної дифузії, які в граничних випадках (один сорт негативних іонів, електропозитивна плазма) приводяться до добре відомих результатів. Показано, що в плазмі з щільністю негативних іонів, що більш ніж в 10 разів перевищує щільність електронів, необхідно враховувати рухливість негативних і позитивних іонів. З'ясовано, що в сильно електронегативній плазмі дифузія перестає бути амбіполярною, коефіцієнти амбіполярної дифузії заряджених частинок приблизно дорівнюють їх коефіцієнтам вільної дифузії.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: амбіполярна дифузія, негативні іони, позитивні іони, електронегативна плазма.

В квазинейтральной газоразрядной плазме низкого давления, состоящей из электронов и положительных ионов, наблюдается ионизационно-диффузионное равновесие, т.е. скорость рождения заряженных частиц благодаря ионизации молекул газа электронным ударом равна скорости их ухода на стенки трубки и электроды из-за амбиполярной диффузии [1,2]. При этом возникшее из-за разделения зарядов амбиполярное электрическое поле притормаживает электроны и ускоряет положительные ионы, заставляя их двигаться с одинаковой скоростью. Зная коэффициент амбиполярной диффузии D_a, можно оценить частоту ионизации в плазменном объеме, напряженность электрического поля, температуру электронов, а также поток положительных ионов на стенки, электроды, обрабатываемые материалы и т.д.

В технологических процессах травления, осаждения пленок, плазменной очистки и т.д. обычно

© Lisovskiy V.A., 2012

используются электроотрицательные газы, молекулы которых захватывают свободные электроны и формируют отрицательные ионы. Появление отрицательных ионов значительно уменьшает амбиполярный уход заряженных частиц из плазменного объема. Формулы для коэффициента амбиполярной диффузии в случае плазмы, содержащей электроны, а также по одному сорту положительных и отрицательных ионов, были получены в работах [2-8]. Для сильно электроотрицательной плазмы, когда плотность отрицательных ионов гораздо больше, чем электронов, коэффициент амбиполярной диффузии всего лишь вдвое превышает коэффициент свободной диффузии положительных ионов. Таким образом, наличие отрицательных ионов в больших концентрациях значительно уменьшает амбиполярный уход заряженных частиц из плазменного объема, что повышает плотность плазмы.

Однако в газоразрядной плазме одновременно присутствует несколько сортов как положительных, так и отрицательных ионов. Например, в источниках отрицательных ионов водорода при низком давлении обнаружены ионы H^+, H_2^+ и H^- с небольшой добавкой ионов H_3^+ [9]. При более высоких давлениях водорода преобладающими являются положительные ионы H_3^+, в то время как концентрации H^+ и H_2^+ пренебрежимо малы [10]. В ВЧ емкостном разряде в хлоре положительными ионами являются Cl_2^+ и Cl^+, а стабильным отрицательным ионом является Cl^- [11-13]. По два сорта положительных ионов наблюдаются также в различных смесях газов [13]: He/Cl_2 (He^+, Cl_2^+, Cl^-), He/HCl (He^+, HCl^+, Cl^-), He/CCl_4 (He^+, CCl_3^+, Cl^-) и т.д. Поэтому целесообразно провести теоретический анализ процесса амбиполярной диффузии в плазме, содержащей не только электроны и один сорт отрицательных ионов, но и хотя бы два сорта положительных ионов с различными коэффициентами диффузии и подвижностью. Нам не известны работы других авторов, в которых рассматривалась бы плазма с таким сложным составом.

Целью данной работы является построить аналитическую модель для амбиполярной диффузии в квазинейтральной плазме, содержащей один сорт отрицательных ионов, электроны и два сорта положительных ионов, а также провести анализ полученных уравнений.

АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АМБИПОЛЯРНОЙ ДИФФУЗИИ

Рассмотрим плазму с двумя сортами положительных ионов, а также с одним сортом отрицательных ионов и электронами. Запишем выражения для потоков электронов, отрицательных и положительных ионов:

$$\vec{\Gamma}_e = -D_e \cdot \vec{\nabla} n_e - \mu_e \cdot \vec{E} \cdot n_e, \tag{1}$$

$$\vec{\Gamma}_- = -D_- \cdot \vec{\nabla} n_- - \mu_- \cdot \vec{E} \cdot n_-, \tag{2}$$

$$\vec{\Gamma}_+ = -D_{1+} \cdot \vec{\nabla} n_{1+} - D_{2+} \cdot \vec{\nabla} n_{2+} + \mu_{1+} \cdot \vec{E} \cdot n_{1+} + \mu_{2+} \cdot \vec{E} \cdot n_{2+}, \tag{3}$$

где D и μ - коэффициент диффузии и подвижность, индексы “e”, “–”, “1+”, “2+” относятся к электронам, отрицательным ионам, а также к положительным ионам первого и второго сорта, соответственно, E – напряженность электрического поля. При этом плазма является квазинейтральной:

$$n_{1+} + n_{2+} = n_- + n_e, \tag{4}$$

то есть суммарная плотность всех положительных ионов равна сумме плотностей отрицательных ионов и электронов. Принимаем также, что суммарные потоки положительных и отрицательных заряженных частиц равны:

$$\vec{\Gamma}_+ = \vec{\Gamma}_{1+} + \vec{\Gamma}_{2+} = \vec{\Gamma}_- + \vec{\Gamma}_e. \tag{5}$$

Введем коэффициент α, равный отношению плотностей отрицательных ионов и электронов $\alpha = n_-/n_e$. Также будем предполагать, что плотности положительных ионов первого и второго сорта связаны соотношением $n_{2+} = \lambda \cdot n_{1+}$.

Выразим из (1) и (2) напряженность электрического поля E

$$\vec{E} = -\frac{\vec{\Gamma}_- + \vec{\Gamma}_e + D_- \cdot \vec{\nabla} n_- + D_e \cdot \vec{\nabla} n_e}{n_e \cdot (\mu_- \cdot \alpha + \mu_e)}, \tag{6}$$

подставим ее в (3) и получим уравнение для потока положительных ионов:

$$\vec{\Gamma}_+ = -\vec{\nabla} n_{1+} \cdot \frac{(1+\lambda)(\mu_- \cdot \alpha + \mu_e)(D_{1+} + \lambda \cdot D_{2+}) + (1+\alpha)(\mu_{1+} + \lambda \cdot \mu_{2+}) \left[D_- \cdot \left(\frac{\nabla n_-}{\nabla n_{1+}} \right) + D_e \cdot \left(\frac{\nabla n_e}{\nabla n_{1+}} \right) \right]}{(1+\lambda)(\mu_- \cdot \alpha + \mu_e) + (1+\alpha)(\mu_{1+} + \lambda \cdot \mu_{2+})} \tag{7}$$

Далее введем коэффициент $\gamma = T_e / T_i$, равный отношению температур электронов и ионов, при этом считаем температуры всех типов ионов одинаковыми $T_i = T_{1+} = T_{2+} = T_-$.

Пусть плотности электронов и отрицательных ионов подчиняются распределению Больцмана

$$n_e = n_{e0} \cdot \exp\left(\frac{e\Phi(r)}{kT_e}\right), \tag{8}$$

$$n_- = n_{-0} \cdot \exp\left(\frac{e\Phi(r)}{kT_i}\right), \tag{9}$$

где индекс “0” относится к центру разряда (например, в случае ВЧ емкостного разряда) или к оси разрядной трубки (при описании положительного столба разряда постоянного тока). Предположение о больцмановском равновесии для электронов и отрицательных ионов справедливо только в отсутствие направленных потоков этих заряженных частиц. Однако такой подход часто используется при описании газоразрядной плазмы. Тогда

$$\nabla n_e = n_e \cdot \frac{e\Phi'(r)}{kT_e}, \tag{10}$$

$$\nabla n_- = n_- \cdot \frac{e\Phi'(r)}{kT_i}. \tag{11}$$

Из (10) и (11) следует, что

$$\frac{\nabla n_-}{\nabla n_e} = \alpha \cdot \gamma. \tag{12}$$

Для квазинейтральной плазмы можем написать

$$\nabla n_+ = \nabla n_- + \nabla n_e, \tag{13}$$

при этом

$$\nabla n_+ = \nabla n_{1+} + \nabla n_{2+} = \nabla n_{1+} \cdot (1+\lambda), \tag{14}$$

$$\nabla n_{1+} = \frac{\nabla n_- + \nabla n_e}{1+\lambda}. \tag{15}$$

Тогда для отношений градиентов плотностей электронов, отрицательных и положительных ионов легко получить

$$\frac{\nabla n_e}{\nabla n_{1+}} = \frac{1+\lambda}{\alpha \cdot \gamma + 1}, \tag{16}$$

$$\frac{\nabla n_-}{\nabla n_{1+}} = \frac{\alpha \cdot \gamma \cdot (1+\lambda)}{\alpha \cdot \gamma + 1}. \tag{17}$$

В дальнейшем будем также использовать соотношение Эйнштейна $D = T \cdot \mu$, которое для каждого сорта заряженных частиц связывает коэффициент диффузии, подвижность и температуру, т.е. $D_e = T_e \cdot \mu_e$, $D_- = T_i \cdot \mu_-$, $D_{1+} = T_i \cdot \mu_{1+}$, $D_{2+} = T_i \cdot \mu_{2+}$.

Подставим (16) и (17) в (7) и после несложных преобразований получим поток положительных ионов

$$\vec{\Gamma}_+ = -D_a \cdot \vec{\nabla} n_+, \tag{18}$$

где D_a – коэффициент амбиполярной диффузии

$$D_a = (D_{1+} + \lambda \cdot D_{2+}) \cdot \frac{1+\gamma+2\cdot\alpha\cdot\gamma}{(1+\alpha\cdot\gamma)\cdot\{1+\lambda+(1+\alpha)\cdot(\mu_{1+}+\lambda\cdot\mu_{2+})/[\mu_-\cdot\alpha+\mu_e]\}}. \tag{19}$$

В случае не очень больших α, когда $\mu_e >> \alpha \cdot \mu_-$ с учетом большой подвижности электронов по сравнению с положительными ионами $\mu_e >> \mu_{1+}, \mu_{2+}$ из уравнения (19) следует:

$$D_a = \frac{D_{1+} + \lambda \cdot D_{2+}}{1+\lambda} \cdot \frac{1+\gamma+2\cdot\alpha\cdot\gamma}{1+\alpha\cdot\gamma}. \tag{20}$$

Если в плазме присутствует только один сорт положительных ионов, т.е. при $\lambda = 0$, то (19, 20) принимают общепринятый вид [2-8]:

$$D_a = D_{1+} \cdot \frac{1+\gamma+2\cdot\alpha\cdot\gamma}{(1+\alpha\cdot\gamma)\cdot\{1+(1+\alpha)\cdot\mu_{1+}/(\mu_-\cdot\alpha+\mu_e)\}}, \tag{21}$$

$$D_a = D_{1+} \cdot \frac{1+\gamma+2\alpha\cdot\gamma}{1+\alpha\cdot\gamma} \quad . \tag{22}$$

Обычно в плазме высокочастотного емкостного разряда, а также в положительном столбе тлеющего разряда постоянного тока температура ионов близка к температуре молекул нейтрального газа и значительно меньше температуры электронов, т.е. $\gamma = T_e/T_i >> 1$. Тогда при достаточно большой концентрации отрицательных ионов α (при выполнении соотношения $\mu_e >> \alpha\cdot\mu_-$) коэффициент амбиполярной диффузии в плазме с отрицательными ионами вдвое больше коэффициента свободной диффузии положительных ионов, т.е. $D_a = 2\cdot D_{1+}$.

Если концентрация положительных ионов второго сорта значительно больше, чем первого, т.е. $\lambda >> 1$, то из (20) имеем коэффициент амбиполярной диффузии

$$D_a = D_{2+} \cdot \frac{1+\gamma+2\alpha\cdot\gamma}{1+\alpha\cdot\gamma}. \tag{23}$$

В электроположительной плазме, когда $\alpha = 0$, формула (20) принимает вид

$$D_a = \frac{D_{1+} + \lambda\cdot D_{2+}}{1+\lambda}\cdot(1+\gamma). \tag{24}$$

Для электроположительной плазмы с одним сортом положительных ионов из (24) получаем хорошо известное выражение для коэффициента амбиполярной диффузии $D_a = D_{1+}\cdot(1+\gamma)$ [1,2].

В другом предельном случае, когда $\mu_e << \alpha\cdot\mu_-$, формула (19) преобразуется к виду

$$D_a \approx \left(D_{1+} + \lambda\cdot D_{2+}\right)\cdot\frac{2}{1+\lambda+\left(\mu_{1+}+\lambda\cdot\mu_{2+}\right)/\mu_-}. \tag{25}$$

В электроотрицательной плазме с одним сортом положительных ионов имеем

$$D_a \approx D_{1+}\cdot\frac{2}{1+\left(\mu_{1+}/\mu_-\right)}. \tag{26}$$

Так как подвижности положительных и отрицательных ионов сравнимы по величине, то при $\mu_e << \alpha\cdot\mu_-$ имеем соотношение $D_a \approx D_{1+}$, т.е. в сильно электроотрицательной плазме коэффициент амбиполярной диффузии положительных ионов примерно равен коэффициенту свободной диффузии положительных ионов.

До этого мы рассматривали только амбиполярную диффузию положительных ионов согласно уравнению (8). Теперь выясним, какими становятся коэффициенты отрицательных ионов и электронов в сильно электроотрицательной плазме. Автор [14] разработал аналитическую теорию, подобную нашей, для квазинейтральной плазмы, содержащей электроны и по одному сорту положительных и отрицательных ионов, и получил выражения для потоков и коэффициентов амбиполярной диффузии для всех трех сортов заряженных частиц. Для положительных ионов уравнение для коэффициент амбиполярной диффузии, приведенное в [14], совпадает с нашим (21). Для отрицательных ионов и электронов коэффициенты амбиполярной диффузии [14] равны, соответственно:

$$D_{a-} = D_+\cdot\frac{1}{\gamma}\cdot\frac{\mu_-}{\mu_e}\cdot\frac{1+\gamma+2\alpha\gamma}{1+\mu_+\cdot(1+\alpha)/\mu_e+\alpha\cdot\mu_-/\mu_e}, \tag{27}$$

$$D_{ae} = D_+\cdot\frac{1+\gamma+2\alpha\gamma}{1+\mu_+\cdot(1+\alpha)/\mu_e+\alpha\cdot\mu_-/\mu_e}, \tag{28}$$

где D_+ - коэффициент свободной диффузии положительных ионов. Уравнение (27) после простых преобразований принимает вид

$$D_{a-} = D_+\cdot\frac{1+\gamma+2\alpha\gamma}{\alpha\gamma}\cdot\frac{1}{1+\mu_+/\mu_-+\mu_e/(\alpha\cdot\mu_-)+\mu_+/(\alpha\cdot\mu_-)}, \tag{29}$$

в котором двумя последними членами в знаменателе второй дроби при $\mu_e << \alpha\cdot\mu_-$ и $\alpha >> 1$ можно пренебречь, что дает

$$D_{a-} \approx D_+\cdot\frac{1+\gamma+2\alpha\gamma}{\alpha\gamma}\cdot\frac{1}{1+\mu_+/\mu_-} \approx D_+\cdot\frac{2}{1+\mu_+/\mu_-} \approx D_+ \approx D_-, \tag{30}$$

так как положительные и отрицательные ионы имеют одинаковые температуры и близкие подвижности и коэффициенты свободной диффузии.

В свою очередь, уравнение (28) при $\mu_e << \alpha\cdot\mu_-$ и $\mu_e << \alpha\cdot\mu_+$ преобразуется к виду:

$$D_{ae} \approx D_+ \cdot 2\gamma \cdot \frac{\mu_e}{\mu_- + \mu_+} \approx \frac{D_+}{\mu_+} \cdot \frac{T_e}{T_i} \cdot \frac{2\mu_e}{1 + \mu_-/\mu_+} \approx \frac{2D_e}{1 + \mu_-/\mu_+} \approx D_e \cdot \qquad (31)$$

Из полученных нами уравнений (26), (30) и (31) следует, что в сильно электроотрицательной плазме, когда не только $\alpha >> 1$, но и $\mu_e << \alpha \cdot \mu_-$, коэффициенты амбиполярной диффузии положительных и отрицательных ионов, а также электронов близки к коэффициентам их свободной диффузии. То есть, в сильно электроотрицательной плазме диффузия перестает быть амбиполярной (даже при большой плотности плазмы), а становится свободной, т.е. заряженные частицы разных сортов и знаков перестают влиять на диффузионное движение друг друга.

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА АМБИПОЛЯРНОЙ ДИФФУЗИИ

Для начала рассмотрим случай, когда плазма содержит положительные ионы двух сортов с сильно различающимися подвижностями μ_{1+}, μ_{2+} и коэффициентами диффузии D_{1+}, D_{2+}. Пусть в гелии имеется небольшая добавка кислорода. В такой смеси обычно присутствуют положительные атомарные ионы гелия He^+ (для которых $\mu_{1+} = 7{,}9 \cdot 10^3$ см^2/(В·с), $D_{1+} = 205{,}5$ см^2/с), молекулярные ионы кислорода O_2^+ (подвижность и коэффициент диффузии которых в гелии равны $\mu_{2+} = 1{,}596 \cdot 10^4$ см^2/(В·с), $D_{2+} = 415$ см^2/с), отрицательные ионы O^- (подвижность которых в гелии равна $\mu_- = 1{,}672 \cdot 10^4$ см^2/(В·с)), а также электроны с подвижностью в гелии $\mu_e = 8{,}6 \cdot 10^5$ см^2/(В·с). Подвижность электронов была взята из книги [1], а подвижности положительных и отрицательных ионов в гелии - из [15].

На рис.1 представлены результаты расчета для He/O_2 смеси, полученные с помощью формулы (20), для температуры электронов $T_e = 5$ эВ ($\gamma = T_e/T_i = 192{,}3$) и величин $\alpha = 10$ и 100. Из рисунка видно, что с ростом параметра λ (отношения концентраций положительных ионов второго и первого сорта) коэффициент амбиполярной диффузии D_a монотонно изменяется от значения, определяемого уравнением (22) (когда имеются только ионы первого сорта), до величины D_a для ионов второго сорта, которую можно определить с помощью уравнения (23). Увеличение параметра α приводит к уменьшению коэффициента амбиполярной диффузии.

На рис.2 показаны подобные зависимости, но уже для $T_e = 1$ эВ ($\gamma = T_e/T_i = 38{,}5$) и широкого диапазона величин $\alpha = 0 \div 100$. Максимальный коэффициент амбиполярной диффузии наблюдается при полном отсутствии отрицательных ионов ($\alpha = 0$), но даже небольшие концентрации отрицательных ионов в плазме приводят к значительному уменьшению коэффициента D_a. Например, присутствие всего одного отрицательного иона на 10 электронов ($\alpha = 0{,}1$) понижает коэффициент амбиполярной диффузии в 14 раз по сравнению со случаем отсутствия отрицательных ионов в плазме. Но дальнейшее повышение величины α приводит к тому, что зависимости $D_a(\lambda)$ для больших α практически накладываются.

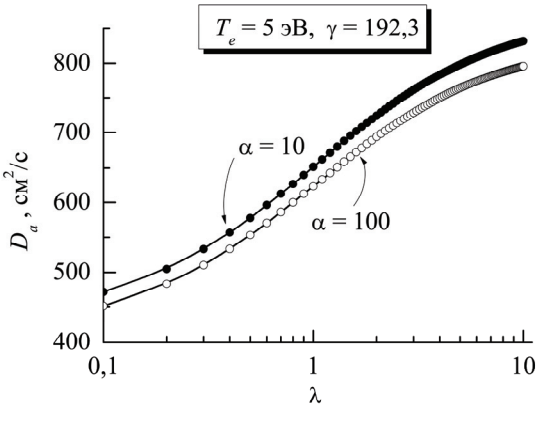


Рис.1. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра λ для He/O_2 смеси при температуре электронов $T_e = 5$ эВ ($\gamma = 192{,}3$) для двух величин $\alpha = 10$ и 100. Расчет с помощью формулы (20).

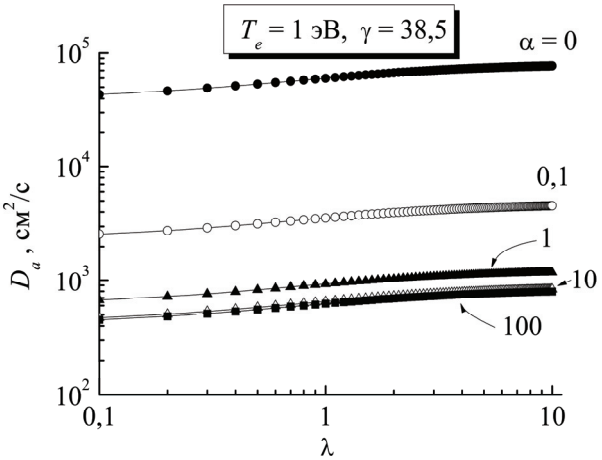


Рис.2. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра λ для He/O_2 смеси при температуре электронов $T_e = 1$ эВ ($\gamma = 38{,}5$) для величин $\alpha = 0$, 0,1, 1, 10 и 100. Расчет с помощью формулы (20).

Если зафиксировать параметр λ, то при малых α коэффициент амбиполярной диффузии максимален и с ростом α быстро уменьшается, достигая при больших α насыщения (рис.3). В случае плазмы с двумя сортами положительных ионов величина D_a при этом равна

$$D_a = 2 \cdot \frac{D_{1+} + \lambda \cdot D_{2+}}{1 + \lambda}. \qquad (32)$$

Если $D_{1+} < D_{2+}$, то при более высоких λ зависимость $D_a(\alpha)$ проходит выше, чем для $\lambda = 0$. Но при $\lambda > 10$

зависимости $D_a(\alpha)$ практически накладываются, а величина коэффициента амбиполярной диффузии определяется уравнением (23).

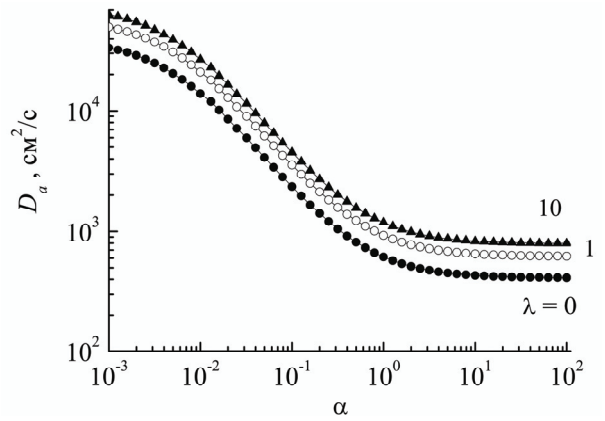


Рис.3. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра α для He/O_2 смеси при температуре электронов $T_e = 5$ эВ для величин $\lambda = 0$, 1 и 10. Расчет с помощью формулы (20).

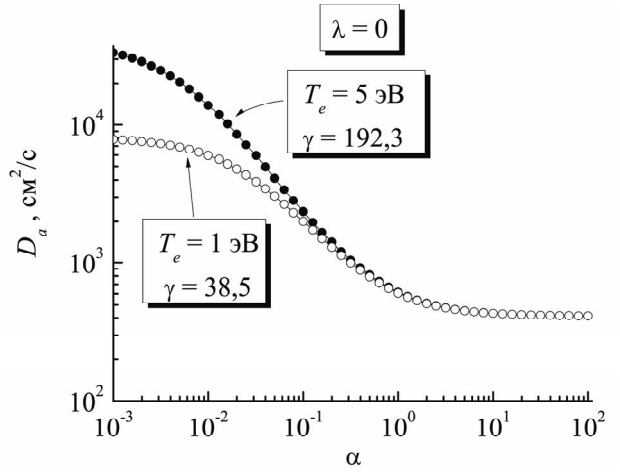


Рис.4. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра α для He/O_2 смеси при температуре электронов $T_e = 1$ эВ и $T_e = 5$ эВ для $\lambda = 0$. Расчет с помощью формулы (20).

На рис.4 показаны зависимости $D_a(\alpha)$ в случае присутствия в плазме только одного сорта положительных ионов ($\lambda = 0$) для двух разных значений $\gamma = T_e/T_i = 192{,}3$ ($T_e = 5$ эВ) и $\gamma = 38{,}5$ ($T_e = 1$ эВ). Для малых α эти две зависимости различаются, коэффициент амбиполярной диффузии выше при более высоких γ. С дальнейшим увеличением α эти кривые сближаются и при $\alpha > 1$ величина электронной температуры T_e практически не влияет на процесс амбиполярной диффузии.

Теперь выясним, когда можно применять простую формулу (20) для описания амбиполярной диффузии в электроотрицательной плазме, и когда она не справедлива и нужно использовать формулу (19). Напомним, что формула (20) была получена авторами [2-8] из (19) для случая $\mu_e >> \alpha \cdot \mu_-$. В настоящей работе рассмотрен также другой предельный случай, когда $\mu_e << \alpha \cdot \mu_-$. Оценим величину отношения подвижностей μ_e/μ_- для рассматриваемой нами смеси гелия с кислородом. Из приведенных выше значений подвижностей электронов и отрицательных ионов в гелии имеем $\mu_e/\mu_- = 50{,}6$. Очевидно, что формула (20) начнет давать завышенные результаты для D_a уже при заметно меньших величинах α. Для простоты снова примем, что в плазме имеется только один сорт положительных ионов, т.е. $\lambda = 0$, а температура электронов $T_e = 5$ эВ ($\gamma = T_e/T_i = 192{,}3$). На Рис.5 показаны две кривые, полученные с помощью формул (21) и (22). Эти кривые практически совпадают при низких $\alpha \le 1$, но дальнейшее увеличение α приводит к тому, что кривая, полученная с помощью формулы (21), проходит заметно ниже, чем для (22). При больших α кривая для (22) стремится к значению $D_a = 2 \cdot D_{1+}$. Очевидно, что в случае больших α коэффициент амбиполярной диффузии на самом деле меньше, чем удвоенный коэффициент свободной диффузии положительных ионов.

Теперь рассмотрим амбиполярную диффузию в сильно электроотрицательном газе SF_6 [16]. Этот газ хорошо исследован, основными положительными ионами в газоразрядной плазме в нем являются SF_5^+ ($\mu_{1+} = 449{,}2$ см^2/(В·с), $D_{1+} = 11{,}68$ см^2/с) и SF_3^+ ($\mu_{2+} = 494{,}8$ см^2/(В·с), $D_{2+} = 12{,}86$ см^2/с), основной отрицательный ион SF_6^- ($\mu_- = 411{,}9$ см^2/(В·с)), а подвижность электронов в нем равна $\mu_e = 1{,}16 \cdot 10^5$ см^2/(В·с)). Значения подвижности и коэффициента диффузии для положительных и отрицательных ионов были взяты из работ [17-19]. Подвижность электронов была определена для приведенного электрического поля $E/p = 174{,}6$ В/(см Торр), когда частоты ионизации и прилипания электронов к молекулам одинаковы (именно этот случай обычно наблюдается в положительном столбе разряда постоянного тока в SF_6, а также в ВЧ емкостном разряде). На Рис.6 приведены зависимости коэффициента амбиполярной диффузии от α, полученные с помощью формул (21) и (22). Из рисунка видно, что кривые, полученные с помощью этих формул, близки в диапазоне $\alpha \le 10$. При повышении α кривая, рассчитанная по формуле (22), асимптотически стремится к значению $D_a = 2 \cdot D_{1+}$. Однако кривая для (21) при больших α близка к $D_a = D_{1+}$. В работе [16] приводятся данные зондовых измерений в в ВЧ емкостном разряде SF_6, из которых следует, что $\alpha = 300$-5000. Как видно из Рис.6, при использовании простой формулы (22) полученный коэффициент амбиполярной диффузии оказывается примерно в 2 раза выше, чем реально имеющий место в газовом разряде в SF_6 и определенный с помощью формулы (21). Поэтому использование формулы (22), а также $D_a = 2 \cdot D_{1+}$, несмотря на их удобство, приводит к некорректным результатам.

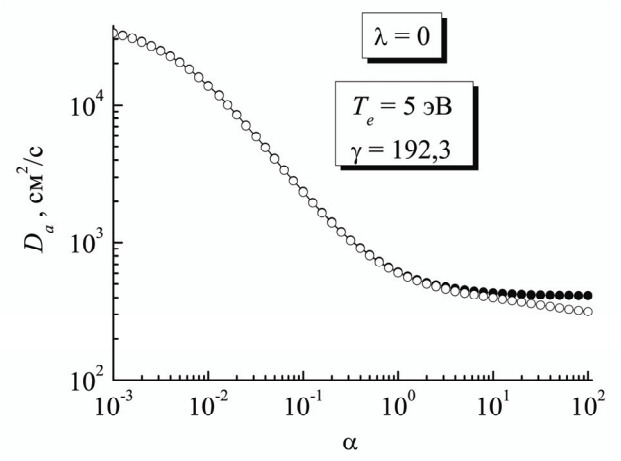


Рис.5. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра α для He/O_2 смеси при температуре электронов $T_e = 5$ эВ для $\lambda = 0$. Расчет с помощью формул (21) (окружности) и (22) (точки).

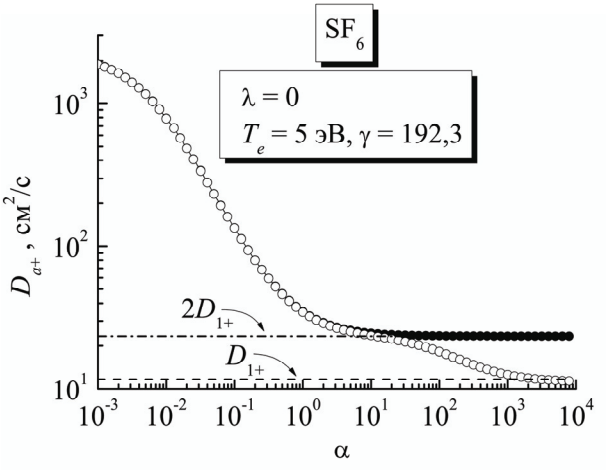


Рис.6. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра α для SF_6 при температуре электронов $T_e = 5$ эВ для $\lambda = 0$. Расчет с помощью формул (21) (окружности) и (22) (точки).

Следующим рассмотрим слабо электроотрицательный кислород. Основными отрицательными ионами в нем являются O^- [21] (с подвижностью в собственном газе ($\mu_- = 2{,}43\cdot10^3$ см^2/(В·с) [15]), концентрации ионов O_2^- и O_3^- не превышают 10–20 % от общей плотности отрицательных ионов. В плазме имеются также электроны ($\mu_e = 1{,}16\cdot10^5$ см^2/(В·с)) и два сорта положительных ионов: O_2^+ ($\mu_{1+} = 1700$ см^2/(В·с), $D_{1+} = 45{,}5$ см^2/с) и небольшая добавка O^+ ($\mu_{2+} = 2430$ см^2/(В·с), $D_{2+} = 60{,}6$ см^2/с), которой обычно при гидродинамическом моделировании разряда пренебрегают. Сведения о величине α, приведенные в литературе, значительно различаются. В кислородном разряде, поддерживаемом СВЧ поверхностной волной [22], при давлении 0,015 Торр получено $\alpha \approx 0{,}3$. Для ВЧ емкостного разряда при давлениях кислорода 0,1 Торр и 0,2 Торр определены значения $\alpha \le 0{,}6$ и $\alpha \le 1{,}2$, соответственно [23]. В том же ВЧ емкостном разряде в камере GEC (Gaseous Electronics Conference Reference Cell) для давления кислорода 0,1 Торр приводится значение $\alpha \approx 2$ [24]. В тлеющем разряде постоянного тока в кислороде найдено $\alpha \approx 6$ при 1 Торр [25]. Следующие работы [26-29] были посвящены исследованиям ВЧ емкостного разряда в кислороде. Авторы работы [26] приводят величину коэффициента $\alpha \approx 18$ при давлении 10 мТорр. При давлениях 0,1 Торр и 0,5 Торр с ростом ВЧ разрядного тока величина коэффициента α уменьшалась от 11,6 до 7,4 и от 18,6 до 10,8, соответственно [27]. Неожиданно большая величина $\alpha = 38$ была получена при давлении $7{,}5\cdot10^{-3}$ Торр авторами [28]. Самые большие величины α были найдены с помощью гидродинамического моделирования [29]: при $p = 0{,}5$ Торр $\alpha \approx 100$ и $\alpha \approx 50$ для ВЧ напряжений на электродах 75 В и 150 В, соответственно.

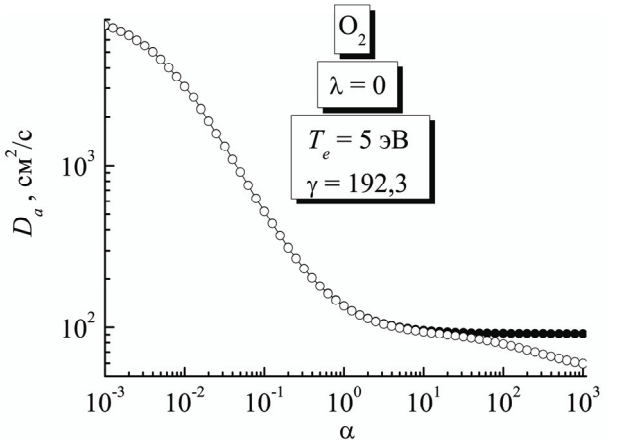


Рис.7. Зависимость коэффициента амбиполярной диффузии от параметра α для кислорода при температуре электронов $T_e = 5$ эВ для $\lambda = 0$. Расчет с помощью формул (21) (окружности) и (22) (точки).

На рис.7 показаны зависимости коэффициента амбиполярной диффузии $D_a(\alpha)$, рассчитанные с помощью формул (21, 22) для случая $\lambda = 0$, т.е. при наличии только одного сорта положительных ионов O_2^+. Из рисунка следует, что при $\alpha \le 10$ эти две зависимости близки, что для небольших концентраций отрицательных ионов позволяет пользоваться простой формулой (22) для описания амбиполярного ухода заряженных частиц из плазмы. Однако при более высоких α кривые расходятся, и при $\alpha = 100$ величина D_a для формулы (21) примерно на 14 % меньше, чем для (22).

Следовательно, как для SF_6, так и для кислорода и кислородсодержащих смесей газов простые формулы (20) и (22) (в которых пренебрегается ионной подвижностью по сравнению с электронной) применимы только при небольших величинах $\alpha = n_-/n_e \le 10$. При больших α нужно использовать формулы (19) и (21) для описания амбиполярного ухода заряженных частиц из плазменного объема.

При больших концентрациях отрицательных ионов одним из важных механизмов потерь заряженных частиц становится рекомбинация отрицательных ионов с положительными. Однако этот процесс повлияет на

пространственное распределение плотности плазмы, но не на величину коэффициента амбиполярной диффузии, поэтому в данной работе вклад рекомбинации не учитывался.

ВЫВОДЫ

В работе представлена аналитическая модель амбиполярной диффузии в квазинейтральной электроотрицательной плазме, состоящей из электронов, одного сорта отрицательных ионов и двух сортов положительных ионов. Такая ситуация часто имеет место в технологических газоразрядных камерах, используемых для травления полупроводниковых материалов, осаждения тонких пленок, плазменной стерилизации и т.д., поэтому для описания этих процессов необходимо знать скорость ухода заряженных частиц из плазменного объема вследствие амбиполярной диффузии. Получены формулы, позволяющие определить коэффициент амбиполярной диффузии при наличии в плазме электронов, отрицательных ионов и при произвольных отношениях концентраций двух различных сортов положительных ионов.

Показано, что повышение коэффициента $\alpha = n_-/n_e$ приводит к уменьшению амбиполярного потока из плазменного объема, содержащего не только один, но и два сорта положительных ионов. При небольших величинах $\alpha \leq 1$ повышение температуры электронов увеличивает коэффициент амбиполярной диффузии. Для более высоких α амбиполярный уход заряженных частиц не зависит от температуры электронов и параметра $\gamma = T_e/T_i$.

Получено, что при $\alpha < 10$ можно пренебрегать подвижностью отрицательных и положительных ионов по сравнению с подвижностью электронов и пользоваться простыми формулами (20) и (22). Однако при более высоких α необходимо учитывать также подвижности ионов и определять коэффициент амбиполярной диффузии по формулам (19) и (21). В сильно электроотрицательной плазме диффузия заряженных частиц (электронов, положительных и отрицательных ионов) перестает быть амбиполярной, коэффициенты амбиполярной диффузии этих частиц становятся примерно равными их коэффициентам свободной диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Raizer Y.P. Gas Discharge Physics. - Berlin: Springer, 1991. - 449 p.
2. Lieberman M.A., Lichtenberg A.J. Principles of plasma discharges and materials processing. - Hoboken, New Jersey: Wiley, 2005. - 757 p.
3. Lichtenberg A.J., Vahedi V., Lieberman M.A., Rognlien T. Modeling electronegative plasma discharges // J. Appl. Phys. - 1994. - Vol.75, №.5. - P. 2339-2347.
4. Stoffels E., Stoffels W.W., Vender D., Haverlag M., Kroesen G.M.W., de Hoog F.J. Negative ions in low pressure discharges // Contrib. Plasma Phys. - 1995. - Vol.35, №.4-5. - P. 331-357.
5. Kouznetsov I.G., Lichtenberg A.J., Lieberman M.A. Modelling electronegative discharges at low pressure // Plasma Sources Sci. Technol. - 1996. - Vol.5, №.4. - P. 662-676.
6. Lee Y.T., Lieberman M.A., Lichtenberg A.J., Bose F., Baltes H., Patrick R. Global model for high pressure electronegative radio-frequency discharges // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1997. - Vol.15, №.1. - P. 113-126.
7. Lichtenberg A.J., Lieberman M.A., Kouznetsov I.G., Chung T.H. Transitions and scaling laws for electronegative discharge models // Plasma Sources Sci. Technol. - 2000. - Vol.9, №.1. - P. 45-56.
8. Kim S., Lieberman M.A., Lichtenberg A.J., Gudmundsson J.T. Improved volume-averaged model for steady and pulsed-power electronegative discharges // J. Vac. Sci. Technol. A. - 2006. - Vol.24, №.6. - P. 2025-2040.
9. Hagelaar G.J.M., Fubiani G., Boeuf J.-P. Model of an inductively coupled negative ion source: I. General model description // Plasma Sources Sci. Technol. - 2011. - Vol.20, №.1. - P. 015001 (16pp).
10. Radouane K., Despax B., Yousfi M., Couderc J.P., Klusmann E., Meyer H., Schulz R., Schulze J. Two-dimensional electrical modeling of asymmetric radio-frequency discharges for geometry effect analysis. Comparison with experiments // J. Appl. Phys. - 2001. - Vol.90, №.9. - P. 4346-4354.
11. Aydil E.S., Economou D.J. Theoretical and experimental investigations of chlorine RF glow discharge // J. Electrochemical Society. - 1992 - Vol.139, №.5. - P. 1396-1406.
12. Ashida S., Lieberman M.A. Spatially averaged (global) model of time modulated high density chlorine plasmas // Jpn. J. Appl. Phys. - 1997. - Vol.36, №.2. - P. 854-861.
13. Sommerer T.J., Kushner M.J. Monte Carlo - fluid model of chlorine atom production in Cl_2, HCl, and CCl_4 radio-frequency discharges for plasma processing // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1992. - Vol.10, №.5. - P. 2179-2187.
14. Thompson J.B. Negative Ions in the Positive Column of the Oxygen Discharge // Proc. Phys. Soc. – 1959. – Vol.73, №.5. – P. 818-821.
15. McDaniel E.W., Mason E.A. The mobility and diffusion of ions in gases. - New York: Wiley, 1973. - 422 p.
16. Kono A. Negative ions in processing plasmas and their effect on the plasma structure // Applied Surface Science. - 2002. - Vol.192, №.1. - P. 115-134.
17. De Urquijo-Carmona J., Alvarez I., Cisneros C., Martinez H. Mobility and longitudinal diffusion of SF_3^+ and SF_5^+ in SF_6 // J. Phys. D: Appl. Phys. - 1990. - Vol.23, №.7. - P. 778-783.
18. De Urquijo-Carmona J., Alvarez I., Martinez H., Cisneros C. Mobility and longitudinal diffusion of SF_5^- and SF_6^- in SF_6 // J. Phys. D: Appl. Phys. - 1991. - Vol.24, №.5. - P. 664-667.

19. Nakamura Y. Transport coefficients of electrons and negative ions in SF_6 // J. Phys. D: Appl. Phys. - 1988. - Vol.21, №.1. - P. 67-72.
20. Lisovskiy V.A., Yegorenkov V., Booth J.-P., Landry K., Douai D., Cassagne V. Electron drift velocity in SF_6 in strong electric fields determined from rf breakdown curves // J. Phys. D: Appl. Phys. - 2010. - Vol.43, №.38. - P. 385203 (7pp).
21. Stoffels E., Stoffels W.W., Vender D., Kando M., Kroesen G.M.W., de Hoog F.J. Negative ions in a radio-frequency oxygen plasma // Phys. Rev. E. - 1995. - Vol.51, №.3. - P. 2425-2435.
22. Schiffer C., Uhlenbusch J. Negative-oxygen-ion detection by a crossed-beam photodetachment technique // Plasma Sources Sci. Technol. - 1995. - Vol.4, №.3. - P. 345-352.
23. Amemiya H. Diagnostics of negative ions using probe and laser in plasmas (oxygen discharge) // Vacuum. – 2000. – Vol.58, №. 2-3. – P. 100-116.
24. Katsch H.-M., Goehlich A., Kawetzki T., Quandt E., Dobele H.-F. Attachment-induced ionization instability of a radio frequency excited discharge in oxygen // J. Appl. Phys. - 1999. - Vol.75, №.14. - P. 2023-2025.
25. Ivanov V.V., Klopovsky K.S., Lopaev D.V., Rakhimov A.T., Rakhimova T.V. Experimental and theoretical investigation of oxygen glow discharge structure at low pressures // IEEE Trans. Plasma Sci. – 1999. – Vol.27, №.5. – P. 1279-1287.
26. Vender D., Stoffels W.W., Stoffels E., Kroesen G.M.W., de Hoog F.J. Charged-species profiles in electronegative radio-frequency plasmas // Phys. Rev. E. - 1995. - Vol.51, №.3. - P. 2436-2444.
27. Kaga K., Kimura T., Ohe K. Spatial profile measurements of charged particles in capacitively-coupled RF (13.56 MHz) oxygen discharges // Jpn. J. Appl. Phys. – 2001. – Vol.40, №.1. – P. 330-331.
28. Bryant P., Dyson A., Allen J.E. Langmuir probe measurements of weakly collisional electronegative RF discharge plasmas // J. Phys. D: Appl. Phys. - 2001. - Vol.34, №.1. - P. 95-104.
29. Shibata M., Nakano N., Makabe T. O_2 RF dischrge structure in parallel plates reactor at 13.56 MHz for material processing // J. Appl. Phys. - 1995. - Vol.77, №.12. - P. 6181-6187.

УДК 621.372.8

COMPUTER SIMULATION OF EFFICIENCY ENHANCEMENT THROUGH PROFILING GUIDING MAGNETIC FIELD AT COAXIAL GYRO-BWO

V.M. Khoruzhiy
National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"
Academicheskaya str.,1, Kharkov, 61108, Ukraine
E-mail: khoruzhiy@kipt.kharkov.ua
Received 30 April 2012, accepted 19 May 2012

The gyro-BWO is a UHF powerful oscillator for cm and mm band of wavelength in which relativistic electrons beam is used for coupling with a backward wave on normal Doppler effect. The first research of gyro-devices was published in 60th. Possible applications of gyro-devices UHF radiation are the followings: electron cyclotron resonance heating of plasma for controlled fusion, communication, spectroscopic researches, high-resolution radars etc. Investigations of gyro-BWO confirm that an essential limitation of the considered device is the small efficiency. One of possibilities for efficiency enhancing is to use profiling guiding magnetic field along an interaction region. We investigated dependence of efficiency increasing under using optimal profiling guiding magnetic field by special law. As a result of effective process bunch formation under special conditions most electrons can be confined in the energy-losing phase HF field. Efficiency enhancement takes place from initial value $\eta \sim 0.1$ for homogenous guiding field to $\eta \sim 0.3$ for profiling one.
KEY WORDS: microwaves, gyro-devices, backward wave oscillators, guiding magnetic field, efficiency, computer simulation.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УВЕЛИЧЕНИЯ КПД ПРИ ПРОФИЛИРОВАНИИ ВЕДУЩЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ В КОАКСИАЛЬНОЙ ГИРО-ЛОВ

В.М. Хоружий
Национальный научный центр "Харьковский физико-технический институт"
Ул. Академическая, 1, Харьков, 61108,Украина

Гиро-ЛОВ это мощный СВЧ генератор в сантиметровом и миллиметровом диапазоне длин волн, в котором релятивистский пучок электронов взаимодействует с обратной волной на нормальном эффекте Доплера. Первые исследования по гиро-приборам были опубликованы в 60-х годах. Возможные применения СВЧ излучения гиро-приборов следующие – это предварительный нагрев плазмы на эффекте циклотронного резонанса для управляемого термоядерного синтеза, для спектроскопических исследований, в радарах высокого разрешения и др. Исследование гиро-ЛОВ показали, что существенным ограничением для рассматриваемого генератора является малый КПД. Одной из возможностей увеличения КПД является профилирование ведущего магнитного поля в области взаимодействия. Мы исследовали зависимость увеличения КПД при использовании профилирования ведущего магнитного поля по определенному закону. При этих условиях эффективный процесс формирования банча приводил к тому, что большинство электронов оказывались в энергозатратной фазе ВЧ поля. Имело место увеличение КПД от начального значения $\eta \sim 0{,}1$ для однородного ведущего магнитного поля до значения $\eta \sim 0{,}3$ для профилированного магнитного поля.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: микроволны, гиро-приборы, генератор на обратной волне, ведущее магнитное поле, КПД, компьютерное моделирование.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗБІЛЬШЕННЯ ККД ПРИ ПРОФІЛЮВАННІ ВЕДУЧОГО МАГНІТНОГО ПОЛЯ В КОАКСІАЛЬНОЇ ГИРО-ЛЗХ

В.М. Хоружий
Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут"
вул. Академічна, 1, Харків, 61108,Україна

Гиро-ЛЗХ- це потужний НВЧ генератор у см і мм діапазоні довжин хвиль, у якому релятивістський пучок електронів взаємодіє зі зворотною хвилею на нормальному ефекті Доплера. Перші дослідження з гиро-приладів були опубліковані в 60-х роках. Можливі застосування НВЧ випромінювання гиро-приладів – це попереднє нагрівання плазми на ефекті циклотронного резонансу для керованого термоядерного синтезу, спектроскопічних дослідженнях, радарах високого вирішення та ін. Дослідження гиро-ЛЗХ показали, що істотним обмеженням для розглянутого генератора є малий ККД. Однієї з можливостей збільшення ККД є профілювання ведучого магнітного поля в області взаємодії. Ми досліджували залежність зростання ККД при використанні профілювання ведучого магнітного поля по визначеному закону. При цих умовах ефективний процес формування банча приводив до того, що більшість електронів опинялись в енерговитратної фазі ВЧ поля. В остаточному підсумку мало місце збільшення ККД від початкового значення $\eta \sim 0{,}1$ для однорідного ведучого магнітного поля до значення $\eta \sim 0{,}3$ для профільованого магнітного поля.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: мікрохвилі, гиро-прилади, генератор на зворотній хвилі, магнітне поле, що веде, коефіцієнт корисної дії (ККД), комп'ютерне моделювання.

The gyro-BWO is a HF powerful oscillator for cm and mm band of wavelength in which relativistic electrons beam (REB) is used for coupling with a backward wave on normal Doppler effect. The first research of gyro-devices was published in 60th [1]. The state of the art of gyro-BWO program is represented in Ref. [2], [3]. Possible applications

© *Khoruzhiy V.M.*, 2012

of the HF radiation of obtained power levels are the followings: electron cyclotron resonance heating (ECRH) of plasma for controlled fusion, communication, spectroscopic researches, high-resolution radars etc.

In our paper the case of coaxial waveguide is investigated for gyro-BWO elaboration. The choice of coaxial waveguide conditioned by greater value of vacuum limiting current of REB for one comparatively to the other types of waveguide. Results of the linear and non-linear analytical investigation of coaxial gyro-BWO operation are presented in Ref. [4, 5].

An electron beam and waveguide support the oscillations with circular frequency ω, which can be described by the expressions for normal Doppler effect, accordingly

$$\omega = k_z V_z + n\Omega_H / \gamma_0 \quad (1)$$

$$\omega^2 = c^2 k_\perp^2 + c^2 k_z^2, \quad (2)$$

where $\Omega_H = \frac{eH_z^g}{mc}$ is non-relativistic gyro-frequency of electrons with energy $W=m_0 c^2(\gamma_0 - 1)$, H_z^g -guiding magnetic field, γ_0 -relativistic factor, k_z, V_z -longitudinal wave number and velocity, n=0,±1,±2… An operating mode for gyro-BWO is near to interception of a straight line (1) and hyperbola (2) in coordinate plane (ω, k_z) (for gyro-BWO the longitudinal wave number k_z <0). An ordinary efficiency value for coaxial gyro-BWO is ~10% for homogenous guiding magnetic field H_z^g.

The major attractive feature of the gyro-BWO is frequency tunability, which can be achieved by management the magnetic field or beam voltage. However, the efficiency of the gyro-BWO is relatively lower than one of other gyro-devices. Investigation results of efficiency enhancement in gyro-BWO were reported in Ref. [6-15]. In Ref. [6-9], the efficiency of the gyro-BWO has been found to be significantly improved by tapering the magnetic field. Results found revealed that the magnetic field tapering with a positive gradient tended to increase the initial frequency mismatch leading to the efficiency enhancement.

In Ref. [10-13] a tapered interaction structure (the reduction of the waveguide radius along the interaction region) was proposed and used in the experiment. The gyro-BWO with a tapered magnetic field and waveguide wall radius was analyzed in Ref. [14, 15].

The aim of our paper is enhancement of efficiency in coaxial gyro-BWO through profiling of guiding magnetic field.

HIGH EFFICIENCY AND BUNCHED BEAM FORMATION

Optimal conditions for this process determine further process of reduction total beam energy converting to radiation. It follows that greater electrons can be located in the energy-losing phase as a result. The bunched beam formation process in gyro-BWO has difference from standard bunching process because of amplitude of EM wave depends on longitudinal coordinate. That reduction of EM amplitude might be compensated by changing position electron bunch as a whole one relatively phase of EM wave. It is possible to do through local variation of guiding magnetic field for compensating of EM field amplitude reduction along longitudinal coordinate during formation process only by changing total (helical) phase, including EM wave phase plus helical phase of guiding magnetic field

$$\Psi = k_z z - \omega t - \Omega_H t / \gamma .$$

Confinement of as many electrons as possible takes place in energy-losing phase due to phase shift under optimal bunched beam formation. As a result phase shift of bunched beam's formation in energy-losing phase takes place.

COMPUTER SIMULATION

We investigated in our paper efficiency enhancement in coaxial gyro-BWO through profiling of guiding magnetic field $H_z^g(z)$ at longitudinal direction z as

$$H_z^g(\xi) = H_{z0}^g(1 + \alpha(\xi / \bar{L})^j \cos^m(\pi\xi / 2\bar{L}))^{1/2}, \quad (3)$$

comparatively to homogenous case $H_z^g = H_{z0}^g$, where α is non-homogeneity amplitude, $\xi = z\omega / c$ is normalizing longitudinal coordinate, $\bar{L} = L\omega / c$ is normalizing waveguide length, $\xi / \bar{L} = z / L$, j>0, m>0. A corresponding transversal component one is

$$H_r^g(z) = -\frac{r}{2}\frac{\partial H_z^g}{\partial z},$$

where r is transversal coordinate.

We considered waveguide exciting mode TE_{01} with components of an electromagnetic field E_φ, H_r, H_z under satisfy conditions (1, 2). For computer simulation we used equations for electrons motion and exciting field TE_{01} from Ref. [5]. We investigated coaxial gyro-BWO with oscillation frequency $f_0 = 7.7\,GHz$ for satisfying expressions (1, 2),

homogenous guiding magnetic field $H_{z0}^{g} = 6.1kOe$, inner radius of the coaxial waveguide gyro-BWO $b = 3cm$, outer radius one is $a = 5cm$, inner beam radius is $r_b = 3.9cm$, outer beam radius is $r_a = 4.1cm$, energy of injected electron beam is $W_0 = 511keV$ ($\gamma_0 = 2$), an initial ratio transversal momentum to longitudinal one μ =1, length of system is $L = 60cm$, cut off frequency $f_c = 7.5GHz$, starting current $I_{st} = 3.7A$, limiting vacuum current $I_{\lim} = 6.6kA$ for coaxial waveguide. Maximal efficiency $\bar{\eta}_{\max} \approx 0.11$ is under input beam current I_b=0.6kA for homogenous guiding field and cited above gyro-BWO parameters [5]. Computer simulation of optimal regime gyro-BWO performance time averaged efficiency $\bar{\eta}$ was carried out for determination values α, m and *j* of profiling guiding magnetic field (3) under the same input electron beam current I_b=0.6kA.

First, we have to determine location of guiding field maximum relatively longitudinal coordinate ξ under j=1 and $H_{z0}^{g} = 6.1kOe$. Results of that investigation are presented in Table 1 under I_b=0.6kA.

Table 1

Location of guiding field

$\bar{\eta}$	0.19	0.27	0.29	0.32	0.29	0.26
m	0	2	4	6	7	9
α	0.69	1.6	2.4	2.9	3.2	3.7
$\xi_0 / \bar{L}$	-	0.41	0.3	0.25	0.24	0.21
$\frac{H_{z\max}^{g}(\xi_0)}{H_{z0}^{g}}$	-	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2

We can see from Table 1 maximal value of time averaged efficiency $\bar{\eta}_{\max}$ =0.32 is under m=6, α =2.9 and $\xi_0 / \bar{L} = z_0 / L$=0.25. The location of maximum one $\xi_0 / \bar{L}$ can be determined analytically from expression (3)

$$mx_0 tg(x_0) = j ,$$

where $x_0 = \pi z_0 / (2L)$, or approximately for $x_0 \ll 1$

$$\xi_0 / \bar{L} = z_0 / L \approx (2\sqrt{j/m})/\pi , \quad (m \neq 0) . \tag{4}$$

Second step is determining optimal amplitude of additional guiding magnetic field under cited above fixed *m*=6, $\xi_0 / \bar{L}$ =0.25 and *j*=1. An amplitude variation takes place due to variation of parameter α from (3).

Table 2

Optimal amplitude of guiding magnetic field

$\bar{\eta}$	0.22	0.32	0.28
$(H_z^g)_{\max}(\xi_0) / H_{z0}^{g}$	1.19	1.2	1.22
α	2.7	2.9	3.1

We can see from Table 2 maximal efficiency $\bar{\eta}_{\max}$ =0.32 takes place under $(H_z^g)_{\max} / H_{z0}^{g} = 1.2$ (α=2.9) in our case.

Finally, third step is determining optimal width $\Delta\xi_1 / \bar{L}$ of profiling guiding magnetic field (3) under fixed $\xi_0 / \bar{L}$ =0.25 and $(H_z^g)_{\max} / H_{z0}^{g} = 1.2$. A width variation takes place due to level variation of parameter j from (3) under m/j=const (4) for fixed maximum location $\xi_0 / \bar{L}$ =0.25. Widening of guiding magnetic field takes place under 1>j>0, narrowing of one takes place under j>1 relatively width of field distribution under j=1.

Table 3

Optimal width of guiding magnetic field

$\bar{\eta}$	0.144	0.32	0.18
J	0.5	1	2
M	3	6	12
α	1.14	2.9	18.5
$\Delta\xi_1 / \bar{L}$	0.53	0.41	0.29

In our case maximal efficiency $\overline{\eta}_{\max}$ =0.32 (see Table 3) takes place under *j*=1 (m=6, α =2.9) and width $\Delta\xi_1/\overline{L}$=0.41 for $H_z^g(\xi_1) = H_z^g(\xi_1 + \Delta\xi_1) = 1.1H_{z0}^g$.

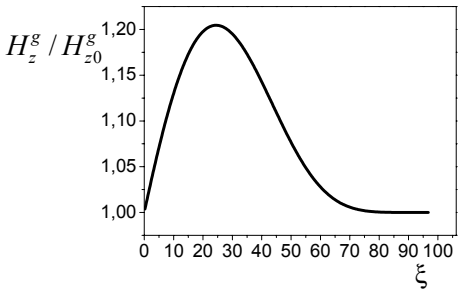


Fig.1. Dependence normalized magnetic field amplitude $H_z^g(\xi)/H_{z0}^g$ on dimensionless longitudinal coordinate ξ.

Hence, we determined location, amplitude and width values of profiling guiding magnetic field for our gyro-BWO parameters.

In our case optimal process for bunching of input electron beam takes place under

$$\text{m=6, } \alpha = 2.9, \text{ j=1,} \qquad (5)$$

for expression (3). In fig.1 we can see longitudinal distribution of guiding magnetic field for parameters (5).

The new profile of guiding magnetic field changes spatial distribution of EM wave amplitude $C_\varphi = eE_\varphi/(mc\omega)$ along longitudinal coordinate. A spatial distribution of normalized amplitude on longitudinal coordinate ξ practically haven't local maximum comparatively with several local maxima (see Fig.2) homogenous one.

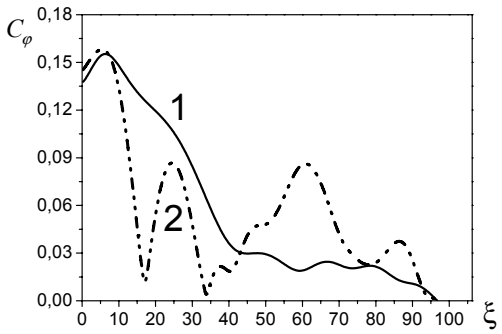


Fig.2. Dependence of normalized amplitude C_φ on dimensionless longitudinal coordinate ξ (curve 1 is for profiling guiding magnetic field (3), curve 2 is for homogenous one under $H_z^g(z) = H_{z0}^g$). Normalized observation time $\tau_0 = k_z ct = 1500$.

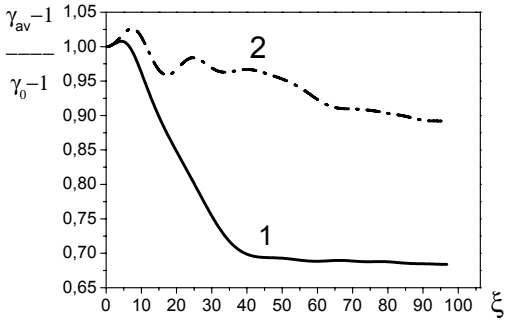


Fig.3. Dependence normalized average bunch energy $(\gamma_{av}\text{-}1)/(\gamma_0\text{-}1)$ on dimensionless longitudinal coordinate ξ (curve 1 is for profiling guiding magnetic field , curve 2 is for homogenous one). Normalized observation time $\tau_0 = k_z ct = 1500$.

The dependence of normalized average bunch energy $(\gamma_{av}\text{-}1)/(\gamma_0\text{-}1)$ on dimensionless longitudinal coordinate ξ has a monotone character in contrast to homogenous distribution (fig.3). The energy loss has maximal value at the first half of interaction region.

For determining frequency characteristics of output signal spectrum analysis was obtained for normalized spectrum density $S(f - f_0)$

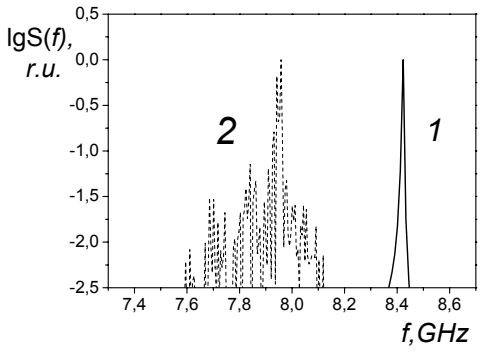


Fig.4. Dependence normalized spectrum density S(f) on frequency f (curve 1 is for profiling guiding magnetic field (3), curve 2 is for homogenous one under $H_z^g(z) = H_{z0}^g$.

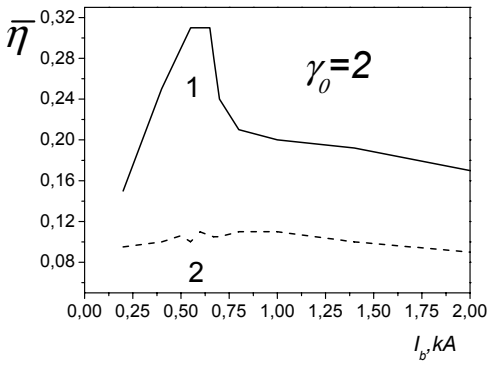


Fig.5. Dependence time averaged efficiency $\overline{\eta}$ from injection beam current I_b (curve 1 is for profiling guiding magnetic field (3), curve 2 is for homogenous one $H_z^g(z) = H_{z0}^g$).

Dependence normalized spectrum density S(f) on frequency f for homogenous guiding magnetic field (stochastic oscillations) and for profiling one (stationary oscillations for the same remaining conditions) is shown in fig.4. We can see in fig.4 conversion stochastic oscillations under homogenous guiding magnetic field to stationary oscillations for profiling one.

Then we used computer simulation for investigation efficiency $\overline{\eta}$ dependence on injection beam current I_b under fixed parameters of guiding field α, m and j [see eq. (5)]. For given injection energy $\gamma_0 = 2$ efficiency $\overline{\eta} \geq 0.25$ is for $0.7kA \geq I_b \geq 0.4kA$ (see fig. 5). Efficiency $\overline{\eta}$ for profiling guiding field has essentially greater value than $\overline{\eta}$ for homogenous case. Average output longitudinal energy $(\gamma_{av,z|} - 1)/(\gamma_{0,|z} - 1)$ of a bunch increases by 10% for homogenous guiding magnetic field and by 15 % for profiling one under $\gamma_0 = 2$ and $I_b = 0.6kA$.

The main reason for relatively lower gyro-BWO efficiency is its spatial distribution of the wave power that reaches a maximum near the entrance of the electron beam and decays along the propagation direction of electrons. This power profile leads to non-optimal formation of bunched electron beam at the beginning of gyro-BWO under homogenous distribution of guiding magnetic field.

We suggested non-homogenous distribution (3) for creation the most optimal conditions during process bunch formation of input electron beam. In fig.6-8 you can see difference between bunch formation for homogenous guiding magnetic field and non-homogenous one on phase plane energy-phase for various fixed values of longitudinal coordinate ξ (I_b =0.6kA, $\gamma_0 = 2$). For all of figures circles correspond to homogenous case, black points correspond to non-homogenous one.

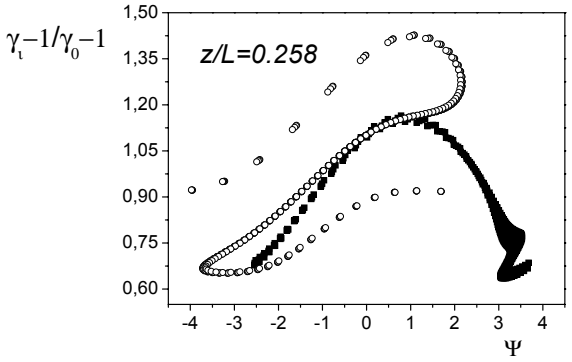


Fig.6. Dependence normalized energy of the particles beam γ_i-1/γ_0-1 on helical (total) phase Ψ for z/L=0.258 (black points correspond profiling field, circles correspond homogenous field).

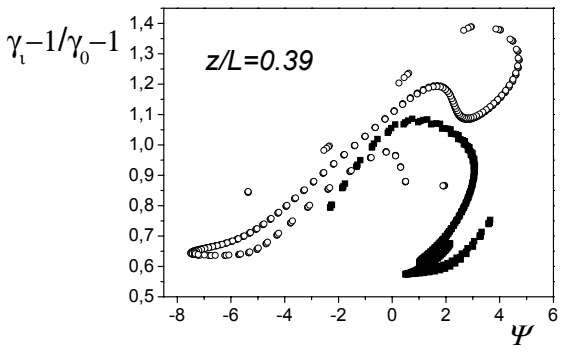


Fig.7. Dependence normalized energy of the particle beam γ_i-1/γ_0-1 on helical (total) phase Ψ for z/L=0.39.

The majority particles for profiling guiding magnetic field have energy-loosing phase from the beginning bunch formation process comparatively homogenous one (see fig. 6). An effective bunch formation process takes place along longitudinal coordinate (fig.7, 8).

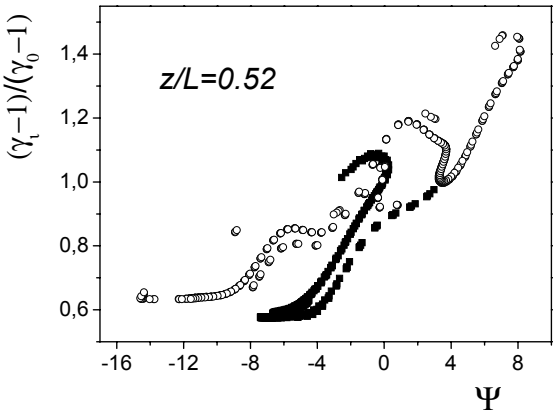


Fig.8. Dependence normalized energy of the particles beam γ_i-1/γ_0-1 on helical (total) phase Ψ for z/L=0.52.

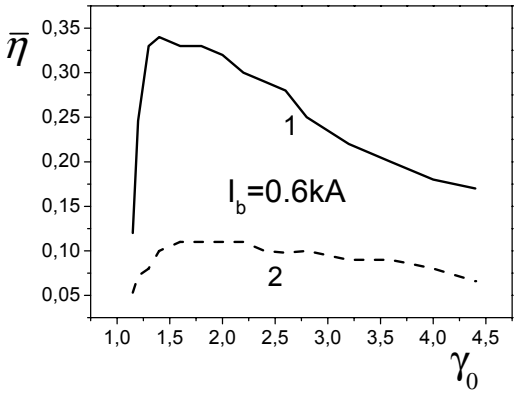


Fig.9. Dependence time averaged efficiency $\overline{\eta}$ on relativistic factor γ_0 (curve 1 is for profiling guiding magnetic field (3), curve 2 is for homogenous one under $H_z^g(z) = H_{z0}^g$).

As result phase portrait of bunched beam along longitudinal coordinate is more compact in comparison with homogenous guiding magnetic field. An effective formation of bunched beam in energy-losing phase leads to most electrons can be confined in the losing energy phase even after completion a compact bunching process (fig.8).

We obtained enhancing of gyro-BWO's efficiency for given injection beam energy $W_0 = 511keV$ ($\gamma_0 = 2$) as indicated above. Then we investigated dependence $\overline{\eta}$ on injection energy W_0 under condition $H_{z0}^g / \gamma_0 \approx const$. Dependence time averaged efficiency $\overline{\eta}$ on relativistic factor γ_0 under injection beam I_b=0.6kA is shown in fig.9. Let's consider more detailed energy range close to $\overline{\eta}$ peak in Fig.9 for profiling field.

Table 4

Dependence efficiency on injection energy

W_0, keV	102	153	307	613	715
γ_0	1.2	1.3	1.6	2.2	2.4
H_{z0}^g, kOe	3.5	3.9	4.8	6.7	7.4
$\overline{\eta}$	0.25	0.33	0.33	0.3	0.29

High efficiency value $\overline{\eta} \approx 0.3$ takes place not only for injection $\gamma_0 = 2$, but for sufficiently wide range energy $\gamma_0 = (1.2 \div 2.4)$ too (see Table 4).

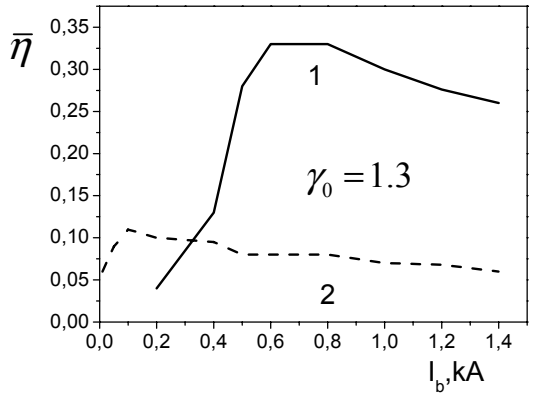


Fig.10. Dependence time averaged efficiency $\overline{\eta}$ from injection beam current I_b (curve 1 is for profiling guiding magnetic field (3), curve 2 is for homogenous one $H_z^g(z) = H_{z0}^g$)

Finally, under fixed parameters of guiding field α, m and j (3) we considered dependence of time averaged efficiency $\overline{\eta}$ on injection beam current I_b under new injection beam energy $W_0 = 153keV$ ($\gamma_0 = 1.3$). For given injection energy $\gamma_0 = 1.3$ efficiency $\overline{\eta} \geq 0.25$ is for $1.4kA \geq I_b \geq 0.5kA$ (see Fig.10). Maximal efficiency $\overline{\eta} \approx 0.3$ is close to injection beam current $I_b \approx 0.6$kA the same as for injection energy $\gamma_0 = 2$. Increasing of starting current takes place under profiling guiding magnetic field takes place from $I_{st} = 3.7A$ (homogenous magnetic field) to $I_{st} = 17A$ for profiling one under $\gamma_0 = 2$. Oscillations of competition mode TE_{11} f=4 GHz under given resonance conditions (1) and (2) are unlikely event. The TE_{11} mode is separated far enough from the operating TE_{01} mode under the given conditions. Resonant frequency of the TE_{11} mode is f = 4GHz, the frequency of the TE_{01} mode is f=7.7GHz in our case.

CONCLUSIONS

In our paper we obtained enhancement of gyro-BWO's efficiency from 11% (homogenous distribution of guiding magnetic field) up to 32% (non-homogenous one) through profiling of magnetic field (3). Oscillation frequency has fixed value under satisfying equations (1), (2). As a result of effective process of bunch formation under special conditions most electrons can be confined in the energy-losing phase. Results of our investigations haven't static character for other gyro-BWO's parameters or other gyro-devices. In every case parameter values of profiling guiding magnetic field (maximum field coordinate, amplitude and width of like-bell guiding field distribution) are subject of investigations.

The obtained efficiency is closely to gyrotron's efficiency (without single stage depressed collector (SDC) for energy recovery). The current mechanism can also be applied to interpret the efficiency enhancement in other gyrotron oscillators (for example, cyclotron autoresonance maser in Ref. [16]) with profiling guiding magnetic field.

REFERENCES

1. Gaponov A.V., Petelin M.I., Julpatov V.K. Induced radiation of excited classical oscillators and its using in radio-frequency electronics // Izvestija VUZov (USSR), Radiofizika-1967.-Vol. 10, №9,10.-P. 1414-1453.
2. Thumm M.K. State-of-the-Art of High Power Gyro-Devices and Free Electron Masers // Preprint, FZKA 7392, Forschungszentrum Karlsruhe-2008.
3. Spencer T.A., Stump M.D., Hendricks K.J., Gilgenbach R.M. Investigation of lower order mode suppression in a high current, high voltage gyro-BWO experiment // Plasma Science, IEEE Conference Record – Abstracts-1996. - P.287. doi: 10.1109 /PLASMA. 1996.551640

4. Borodkin A.V., Khoruzhiy V.M., Onishchenko I. N., Sotnikov G.V. Coaxial Gyro-BWO. 1. Linear Theory. Starting currents // Ukrainian Journal of Physics-2004. - Vol. 49, №2. - P.126-131. (http://www.ujp.bitp.kiev.ua/)
5. Borodkin AV., Khoruzhiy V.M., Onishchenko I. N., Sotnikov G.V. Coaxial Gyro-BWO. 2. Nonlinear Theory // Ukrainian Journal of Physics-2005. - Vol.50, №11. - P.1230-1236. (http://www.ujp.bitp.kiev.ua/)
6. Ganguly A. K., Ahn S. Nonlinear analysis of the gyro-BWO in three dimensions // Intl. J. of Electronics. - 1989. - Vol. 67, №.2, - P. 261 – 276.
7. Ganguly A.K., Ahn S. Optimization of the efficiency in gyrotron backward wave oscillator of a tapered axial magnetic field // App1. Phys. Lett. - 1989.- Vol.54, №6. - P.514-516.
8. Lin A.T. Dependence of efficiency on magnetic field in gyro-backward wave oscillators // Physical Review A. - 1992.-Vol. 46, №. 8. -P.2314-2317.
9. Lin A.T. Chin-Chien Lin Mechanisms of efficiency enhancement in gyrotron backward-wave oscillators with tapered magnetic fields // Phys. Fluids B. - 1993. - Vol.5, № 7. - P.2314-2317.
10. Walter M.T., Gilgenbach R.M., Menge P.R., Spencer T.A**.** Effects of tapered tubes on long-pulse microwave emission from intense e-beam gyrotron-backward-wave-oscillators // IEEE Trans. Plasma Sci.-1994.- Vol. 22, № 5. - P. 578-584.
11. Kou C.S., Chen C.H. and Wu T.J. Mechanisms of efficiency enhancement by a tapered waveguide in gyrotron backward wave oscillators // Physical Rev. E-1998.- Vol. 57, № 6, -P.7162-7168.
12. Grudiev A., Schunemann K. Numerical analysis of an injection-locked gyrotron backward-wave oscillator with tapered sections// Physical. Rev. E.-2003.- Vol. 68. -P.016501.
13. Hung C.L., Yeh Y.S.,Chang T.H. A coaxial-waveguide gyrotron backward-wave oscillator with tapered waveguide cross section. Proc. of 8th Int. Workshop ”-Strong Microwaves and Terahertz waves: Sources and Applications”, 2011.-P.84-85.
14. Nusinovich G.S. and Dumbrajs O. Theory of gyro-backward wave oscillators with tapered magnetic field and waveguide cross section // IEEE Trans. Plasma Sci.-1996.- Vol. 24, № 3. -P.620 – 629.
15. Walter M.T., Gilbenbach R.M., Luginsland J.W. et al. Effects of tapering on gyrotron backward-wave oscillators: Special issue on high power microwave generation // IEEE Trans. Plasma Sci.- 1996.- Vol. 24, № 3. -P. 636-647.
16. Chen S.H. and Dawn T.Y. Study of efficiency enhancement through magnetic field profiling in cyclotron autoresonance maser. // Phys. Plasmas, 1995.-Vol.2, №3.- P. 959-964.

УДК .533.9

ФОКУСИРУЮЩИЕ КИЛЬВАТЕРНЫЕ ПОЛЯ ДЛЯ УСКОРЯЕМОГО ЭЛЕКТРОННОГО СГУСТКА В ПЛАЗМЕННО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ

Р.Р. Князев, Г.В. Сотников
ННЦ «Харьковский физико-технический институт»
61108, ул. Академическая 1, Харьков, Украина
E-mail: sotnikov@kipt.kharkov.ua
Received 9 April 2012

Исследовано возбуждение кильватерных волн электронным сгустком в изотропном плазменно-диэлектрическом волноводе. Показано, что возбуждаемое поле состоит из двух слагаемых: поля ленгмюровской волны и поля собственных волн диэлектрического волновода. При определенной плотности плазмы продольная компонента ленгмюровской волны существенно меньше продольной компоненты диэлектрических волн, а поперечные компоненты поля ленгмюровской волны существенно больше поперечных компонент диэлектрических волн. При этом периоды этих двух типов волн существенно отличаются. Это позволяет обеспечить ускорение тестового сгустка полем диэлектрической волны с его одновременной фокусировкой плазменной волной.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ускорение, фокусировка, кильватерное поле, сгусток, диэлектрический волновод, плазма

FOCUSING OF ELECTRON BUNCHES WAKE FIELDS IN A PLASMA-DIELECTRIC WAVEGUIDE

R.R. Kniazev, .G.V. Sotnikov
NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"
1, Akademicheskaya st., Kharkov, Ukraine, 61108

The excitation of wake waves by the electron bunch in an isotropic plasma-dielectric waveguide is studied. It is shown that the excited field consists of two components: the field of the Langmuir wave and the field of eigenmodes of a dielectric waveguide. At a certain plasma density, the longitudinal component of the Langmuir waves is much smaller longitudinal component of the dielectric waves and transverse field components of the Langmuir wave is much larger transverse components of the dielectric waves. The periods of these two types of waves differ significantly. This allows to provide the acceleration of the test bunch by a field of the dielectric wave with its simultaneous focusing by the plasma wave field.
KEY WORDS: acceleration, focusing, wakefield, bunch, dielectric waveguide, plasma

ФОКУСУВАННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ЗГУСТКІВ КІЛЬВАТЕРНИМИ ПОЛЯМИ В ПЛАЗМОВО-ДІЕЛЕКТРИЧНОМУ ХВИЛЕВОДІ

Р.Р. Князев, Г.В. Сотніков
ННЦ "Харківський фізико-технічний інститут"
вул. Академічна 1, м. Харків, Україна, 61108

Досліджено збудження кільватерних хвиль електронним згустком в ізотропному плазмово-діелектричному хвилеводі. Показано, що збуджене поле складається з двох складових: поля ленгмюрівської хвилі і поля власних хвиль діелектричного хвилеводу. При певній щільності плазми поздовжня компонента ленгмюрівської хвилі істотно менше поздовжньої компоненти діелектричних хвиль, а поперечні компоненти поля ленгмюрівської хвилі істотно більше поперечних компонент діелектричних хвиль. При цьому, періоди цих двох типів хвиль істотно відрізняються. Це дозволяє забезпечити прискорення тестового згустку полем діелектричної хвилі з його одночасним фокусуванням плазмової хвилею.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: прискорення, фокусування, кільватерне поле, згусток, діелектричний хвилевід, плазма

Ускорение заряженных частиц кильватерными полями, создаваемыми лазерным импульсом или сгустками заряженных частиц при их распространении в замедляющих средах, является перспективным, бурно развивающимся направлением в физике высоких энергий. Благодаря сверхбольшим ускоряющим градиентам кильватерные методы ускорения позволяют достичь энергии ускоренных частиц Тэв-ного диапазона при значительно меньших длинах, чем традиционные ускорители. Один из методов ускорения кильватерными полями, возбуждаемыми релятивистскими электронными сгустками, в качестве замедляющей среды использует плазму [1], создаваемую теми же электронными сгустками [2] или внешним источником. В частности, в качестве внешнего источника в работах [3,4] было предложено использовать капиллярный разряд. Сама капиллярная трубка является замедляющей средой, поэтому при распространении в ее канале лазерного импульса или электронных сгустков наряду с плазменными кильватерными волнами будут возбуждаться собственные волны диэлектрической структуры, модифицированные присутствием плазмы в транспортном канале. До настоящего времени влияние электродинамических свойств материала капиллярных трубок на возбуждение плазменных кильватерных волн не исследовано.

Цель работы: на примере цилиндрического волновода гигацерцового диапазона рабочих частот исследовать возбуждение кильватерных волн релятивистским электронным сгустком в диэлектрическом волноводе с заполненным изотропной плазмой ускорительным каналом. На основе полученных выражений для компонент электромагнитного поля изучить пространственную структуру поперечных сил и рассмотреть возможность фокусировки ускоряемых частиц в возбуждаемых полях.

© Kniazev R.R., Sotnikov G.V., 2012

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для исследования влияния диэлектрической среды на возбуждение плазменной кильватерной волны найдем кильватерное поле электронного сгустка, движущегося в плазменном волноводе с кольцевой диэлектрической вставкой. Плазменный волновод представляет собой однородный плазменный цилиндр радиуса a, окруженный идеально проводящим кожухом радиуса b. Диэлектрическая вставка заполняет все пространство между кожухом и плазмой. Возбуждение волновода будем рассматривать в приближении линейной изотропной плазмы, имеющей плотность n_p.

Для начала определим кильватерное поле сгустка, имеющего форму бесконечно тонкого осесимметричного кольца радиуса r_0. Возбуждаемое азимутально-симметричное кильватерное поле описывается следующей системой уравнений Максвелла:

$$\frac{\partial E_r}{\partial z}-\frac{\partial E_z}{\partial r}=-\frac{1}{c}\frac{\partial H_\varphi}{\partial t},\quad -\frac{\partial H_\varphi}{\partial z}=\frac{1}{c}\frac{\partial D_r}{\partial t},\quad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rH_\varphi\right)=\frac{1}{c}\frac{\partial D_z}{\partial t}+\frac{4\pi}{c}j_z, \tag{1}$$

где E_r, E_z - радиальная и продольная компоненты электрического поля, D_r, D_z - радиальная и продольная компоненты электрической индукции, H_φ - азимутальная компонента магнитного поля, плотность тока равна

$$j_z=\frac{Q}{2\pi r}\delta(r-r_0)\delta(\tau-t_0), \tag{2}$$

$\tau=t-z/v_0$, t_0 - время, когда сгусток пересекает плоскость $z=0$, v_0 - его скорость, Q - заряд сгустка, δ - дельта-функция Дирака.

КИЛЬВАТЕРНОЕ ПОЛЕ СГУСТКА

Вследствие (2) зависимость вынужденного решения системы (1) от времени и продольной координаты определяется только переменной τ. Выполнив преобразование Фурье по переменной τ

$$(\vec{E}_\omega,\vec{H}_\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau(\vec{E},\vec{H})\exp(i\omega\tau), \tag{3}$$

из системы (1), (2) получим уравнение для Фурье-образа продольной компоненты электрического поля:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\partial E_{z\omega}}{\partial r}\right]-\frac{\omega^2}{v_0^2}\left[1-\beta_0^2\varepsilon(\omega)\right]E_{z\omega}=i\frac{Q}{\pi v_0^2}\frac{\omega}{\varepsilon(\omega)}\left[1-\beta_0^2\varepsilon(\omega)\right]\frac{\delta(r-r_0)}{r}\exp(i\omega t_0). \tag{4}$$

Радиальная компонента электрического поля и азимутальная компонента магнитного поля выражаются через $E_{z\omega}$:

$$E_{r\omega}=i\frac{c}{\omega}\frac{\beta_0}{\beta_0^2\varepsilon(\omega)-1}\frac{\partial E_{z\omega}}{\partial r},\quad H_{\varphi\omega}=\beta_0\varepsilon(\omega)E_{r\omega} \tag{5}$$

$\beta_0=v_0/c$; $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_p(\omega)=1-\omega_p^2/\omega^2$, если $r<a$ и $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_d$ если $a\le r<b$; $\omega_p=\sqrt{4\pi e^2 n_p/m}$ - плазменная частота, $-e$ и m - заряд и масса электрона; ε_d - относительная проницаемость диэлектрической втулки, которую мы предполагаем не зависящей от частоты.

Уравнение (4) эквивалентно системе из трех уравнений, записанных в каждой из частичных областей $r<r_0$, $r_0<r<a$ и $a<r\le b$. Решив его совместно с граничными условиями:

$$\begin{aligned}&E_{z\omega}(r=0)<\infty,\ E_{z\omega}(r=b)=0,\ E_{z\omega}(r=r_0-0)=E_{z\omega}(r=r_0+0),\ E_{z\omega}(r=a-0)=E_{z\omega}(r=a+0),\\&H_{\varphi\omega}(r=a-0)=H_{\varphi\omega}(r=a+0),\ H_{\varphi\omega}(r=r_0+0)-H_{\varphi\omega}(r=r_0-0)=\frac{Q}{\pi c r_0}\exp(i\omega t_0)\end{aligned} \tag{6}$$

получим:

$$E_{z\omega}(r<a)=-iA_pI_0(\kappa_p r_<)\left(K_0\left(\kappa_p r_>\right)+\frac{I_0\left(\kappa_p r_>\right)K_0\left(\kappa_p a\right)}{I_0\left(\kappa_p a\right)}\frac{\dfrac{\varepsilon_p(\omega)}{\sqrt{1-\beta_0^2\varepsilon_p(\omega)}}\dfrac{K_1\left(\kappa_p a\right)}{K_0\left(\kappa_p a\right)}-\gamma_d\dfrac{F_1(\kappa_d a,\kappa_d b)}{F_0\left(\kappa_d a,\kappa_d b\right)}}{D(\omega)}\right)\exp(i\omega t_0) \tag{7}$$

$$E_{z\omega}(a\le r\le b)=-i\frac{Q}{\pi ac\beta_0}\frac{1}{D(\omega)}\frac{I_0(\kappa_p r_0)}{I_0(\kappa_p a)}\frac{F_0(\kappa_d r,\kappa_d b)}{F_0\left(\kappa_d a,\kappa_d b\right)}\exp(i\omega t_0)$$

В выражениях (7) введены обозначения $A_p=\dfrac{Q\omega}{\pi c^2}\dfrac{1-\beta_0^2\varepsilon_p(\omega)}{\beta_0^2\varepsilon_p(\omega)}$, I_0, I_1 и K_0, K_1 - модифицированные функции Бесселя и Макдональда нулевого и первого порядка, соответственно;

$F_0(x,y)=J_0(x)N_0(y)-N_0(x)J_0(y)$, $F_1(x,y)=-J_1(x)N_0(y)+N_1(x)J_0(y)$, $J_0(x),J_1(y)$ и $N_0(x),N_1(y)$ – функции Бесселя и Неймана нулевого и первого порядка, соответственно; $\kappa_p^2=\frac{\omega^2}{v_0^2}\left(1-\beta_0^2\varepsilon_p(\omega)\right)$, $\kappa_d^2=\frac{\omega^2}{v_0^2}\left(\beta_0^2\varepsilon_d-1\right)$, $\gamma_d=\varepsilon_d/\sqrt{\beta_0^2\varepsilon_d-1}$. Знак $<(>)$ означает наименьшее (наибольшее) из значений r и r_0. Дисперсионная функция $D(\omega)$, входящая в знаменатели выражений (7), имеет вид:

$$D(\omega)=\frac{\varepsilon_p(\omega)}{\sqrt{1-\beta_0^2\varepsilon_p(\omega)}}\frac{I_1\left(\kappa_p a\right)}{I_0\left(\kappa_p a\right)}+\gamma_d\frac{F_1(\kappa_d a,\kappa_d b)}{F_0\left(\kappa_d a,\kappa_d b\right)} \tag{8}$$

Остальные компоненты электромагнитного поля выражаются через $E_{z\omega}$ с использованием соотношений (5).

Выполнив обратное преобразование Фурье, после вычисления интегралов с использованием теории вычетов получим окончательные выражения для кильватерного поля сгустка, имеющего форму бесконечно тонкого кольца:

$$E_z(r_0,t_0,r,\tau)=-\frac{2Q}{a^2}\Theta(\tau-t_0)\begin{cases}k_p^2a^2\frac{I_0(k_pr_<)}{I_0(k_pa)}\Delta_0(k_pa,k_pr_>)\cos\omega_p(\tau-t_0)+\frac{2a}{v_0}\sum_s\frac{I_0(\kappa_p^sr_<)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{I_0(\kappa_p^sr_>)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{\cos\omega_s(\tau-t_0)}{D'(\omega_s)}, & r<a\\ \frac{2a}{v_0}\sum_s\frac{I_0(\kappa_p^sr_0)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{F_0(\kappa_d^sr,\kappa_d^sb)}{F_0(\kappa_d^sa,\kappa_d^sb)}\frac{\cos\omega_s(\tau-t_0)}{D'(\omega_s)}, & a\le r\le b\end{cases}, \tag{9}$$

$$E_r(r_0,t_0,r,\tau)=\frac{2Q}{a^2}\Theta(\tau-t_0)\begin{cases}k_pa^2\frac{d}{dr}\left(\frac{I_0(k_pr_<)\Delta_0(k_pa,k_pr_>)}{I_0(k_pa)}\right)\sin\omega_p(\tau-t_0)\\ +\frac{2a}{v_0}\sum_s\frac{I_1(\kappa_p^sr_<)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{I_0(\kappa_p^sr_>)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{\sin\omega_s(\tau-t_0)}{D'(\omega_s)\sqrt{1-\beta_0^2\varepsilon_p(\omega_s)}}, & r<a\\ -\frac{2a}{v_0\sqrt{\beta_0^2\varepsilon_d-1}}\sum_s\frac{I_0\left(\kappa_p^sr_0\right)}{I_0\left(\kappa_p^sa\right)}\frac{F_1(\kappa_d^sr,\kappa_d^sb)}{F_0\left(\kappa_d^sa,\kappa_d^sb\right)}\frac{\sin\omega_s\left(\tau-t_0\right)}{D'(\omega_s)}, & r>a\end{cases}, \tag{10}$$

$$H_\varphi(r_0,t_0,r,\tau)=\frac{4Q}{ac}\Theta(\tau-t_0)\begin{cases}\sum_s\frac{\varepsilon_p(\omega_s)}{\sqrt{1-\beta_0^2\varepsilon_p(\omega_s)}}\frac{I_0(\kappa_p^sr_0)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{I_1(\kappa_p^sr)}{I_0(\kappa_p^sa)}\frac{\sin\omega_s(\tau-t_0)}{D'(\omega_s)}, & r<a\\ -\frac{4\varepsilon_d}{\sqrt{\beta_0^2\varepsilon_d-1}}\sum_s\frac{I_0\left(\kappa_p^sr_0\right)}{I_0\left(\kappa_p^sa\right)}\frac{F_1(\kappa_d^sr,\kappa_d^sb)}{F_0\left(\kappa_d^sa,\kappa_d^sb\right)}\frac{\sin\omega_s\left(\tau-t_0\right)}{D'(\omega_s)}, & a\le r\le b\end{cases}, \tag{11}$$

где: $\Theta(x)$ - функция Хэвисайда; $k_p=\omega_p/v_0$, $\kappa_p^s=\kappa_p(\omega=\omega_s)$, $\kappa_d^s=\kappa_d(\omega=\omega_s)$, $D'(\omega_s)=\left.\frac{dD(\omega)}{d\omega}\right|_{\omega=\omega_s}$, а собственные частоты ω_s определяются из решения дисперсионного уравнения:

$$D(\omega_s)=0. \tag{12}$$

Первые слагаемые в выражениях для электрического поля (9)-(10) описывают поле ленгмюровских колебаний ($\varepsilon_p=0$, $\omega=\omega_p$), оно локализовано в канале транспортировки, на его границе это поле обращается в нуль и не зависит от параметров диэлектрической структуры. Эти слагаемые в (9)-(10) совпадают с выражениями для электрических полей ленгмюровских колебаний в изотропном плазменном волноводе [5,6], если в этих выражениях устремить радиус плазменного цилиндра к бесконечности $a\to\infty$, мы придем к выражениям для кильватерных полей в безграничной плазме [7]. Оставшиеся слагаемые в (9)-(11) описывают электрическое поле собственных колебаний диэлектрической структуры (для краткости будем называть их диэлектрическими). Отметим, что в соответствии с (11) магнитное поле кильватерной волны не содержит поля ленгмюровских колебаний.

Для нахождения кильватерного поля сгустка конечных размеров с произвольным распределением заряда внутри него необходимо проинтегрировать выражения (7) по всем r_0,t_0 с соответствующей функцией распределения:

$$\left[\vec{E}(r,\tau),\vec{H}(r,\tau))\right]=\int_{-\infty}^{t}dt_0\int dr_0r_0\,n(r_0,t_0)\left[\vec{E}(r_0,t_0,r,\tau),\vec{H}(r_0,t_0,r,\tau)\right]\Big/\int_{-\infty}^{\infty}dt_0\int dr_0r_0n(r_0,t_0) \tag{13}$$

где $n(r_0,t_0)$ описывает распределение заряда внутри сгустка, r_1, r_2 - внутренний и внешний радиус сгустка.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Приведем результаты численных расчетов кильватерного поля. Для численных расчетов выберем диэлектрический волновод с поперечными размерами $a = 1{,}1$ см, $b = 4{,}3$ см, проницаемостью $\varepsilon_d = 2{,}1$ (фторопласт), энергия электронного сгустка равна 5 Мэв (скорость $v_0 = 2{,}985 \cdot 10^{10}$ см/сек), заряд сгустка $Q = -0{,}32$ нКл. Будем считать, что распределение заряда внутри сгустка однородно и описывается выражением:

$$n(r_0, t_0) = \frac{v_0}{L_b (r_2^2 - r_1^2)} \left[\Theta(t_0) - \Theta(t_0 - L_b / v_0)\right]\left[\Theta(r_1) - \Theta(r_2)\right], \qquad (14)$$

r_1, r_2 - внутренний и внешний радиус сгустка, L_b - длина сгустка. Возьмем для расчетов $r_1 = 0{,}3$ см, $r_2 = 1{,}0$ см, $L_b = 1{,}7$ см.

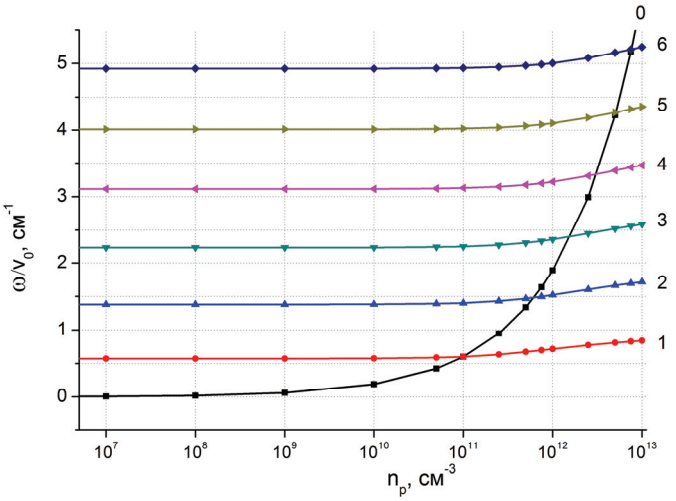


Рис. 1. Собственные частоты диэлектрической структуры в зависимости от плотности плазмы:
кривая 0-ленюровская волна, кривые 1-6 – первые 6 решений дисперсионного уравнения (12), (8).

На рис. 1 приведены зависимости собственных частот плазменно-диэлектрического волновода от плотности плазмы. Кривые 1-6 соответствуют собственным волнам диэлектрического волновода, модифицированным присутствием плазмы в пролетном канале. При плотности плазмы $n_p = 10^{11}$ см$^{-3}$ частота первой радиальной моды диэлектрической волны равна частоте ленгмюровской волны. На всем рассматриваемом диапазоне плотностей плазмы собственные частоты диэлектрических волн слабо зависят от плотности плазмы. Это позволяет независимо управлять частотами и амплитудами диэлектрических и ленгмюровской волн.

Как следует из рис. 1 резонансная частота первой радиальной гармоники диэлектрического волновода в отсутствие плазмы равна $\omega = 17{,}025 \cdot 10^9$ рад/сек, или ее пространственный период равен ~11см. Известно [5, 6], что амплитуда поля ленгмюровской волны максимальна при определенной плотности плазмы. Для приведенных выше параметров волновода и сгустка максимумы амплитуд продольного и поперечного электрического поля локализованы приближенно при одной и той же плотности плазмы $n_p = n_p^m \sim 10^{12}$ см$^{-3}$, что соответствует значению безразмерного параметра $k_p a \sim 2$. Расчеты показывают, что для такой плотности плазмы электрические поля легмюровской волны значительно превосходят суммарные кильватерные поля, обусловленные возбуждением радиальных мод диэлектрического волновода. Т.е. результирующее поле будет формироваться, в основном, ленгмюровской волной, в которой продольное и поперечное поле сдвинуты по фазе на $\pi/2$. Для ускоряемого сгустка это будет означать отсутствие фокусировки возбуждаемым кильватерным полем. С уменьшением плотности плазмы от n_p^m амплитуды продольного и поперечного поля ленгмюровской волны уменьшаются. При некоторой плотности плазмы продольное поле ленгмюровской волны становится меньше суммарного продольного поля диэлектрических мод[1]. Но радиальное электрическое поле ленгмюровской волны все еще значительно превосходит суммарное поперечное поле диэлектрических мод. Эти два типа волн – ленмюровская и диэлектрическая – имеют в общем случае разные пространственные периоды, поэтому максимуму полного продольного поля может соответствовать минимум полного поперечного поля. Таким образом, размещая тестовый сгусток в максимуме ускоряющего поля диэлектрической волны, можно одновременно фокусировать его полем ленгмюровской волны. Ниже мы приводим один из таких возможных вариантов.

На рис.2-рис.3 приведены результаты расчетов для плотности плазмы $n_p = 10^{10}$ см$^{-3}$ (частота плазменной волны $\omega_p = 5{,}64 \cdot 10^9$ рад/сек, длина волны $\lambda_p = 2\pi v_0 / \omega_p = 33{,}2$ см). На рис. 2 показано аксиальное распределение продольной и поперечных сил, действующей на пробную частицу, расположенную на расстоянии 1см от оси волновода. Из сравнения приведенных зависимостей следует, что размещая тестовый сгусток на расстоянии 7,5см или 20,6см от головы ведущего сгустка можно обеспечить ускорение заряженных частиц с их одновременной радиальной фокусировкой. Как видно из рисунка, радиальная сила имеет почти гармоническую зависимость от продольной координаты с периодом равным ~33см, т.е. ленгмюровская волна вносит преобладающий вклад в радиальную силу. В тоже время её вклад в продольную силу, ускоряющую тестовые частицы, преобла-

[1] Само поле диэлектрических мод при уменьшении плотности плазмы изменяется слабо в соответствии со сказанным при обсуждении рис.1.

дающе мал. Продольная сила, в основном, определяется собственными модами диэлектрического волновода ее сложная зависимость от продольной координаты связана с возбуждением нескольких радиальных мод диэлектрического волновода.

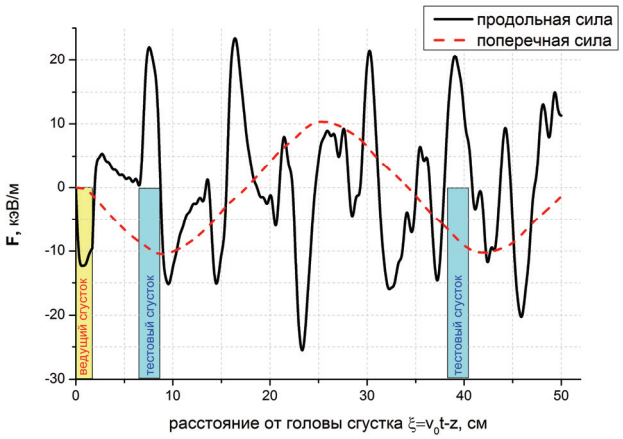


Рис.2. Аксиальный профиль продольной (сплошная линия) и поперечной сил (пунктирная линия), действующих на пробную частицу, расположенную на расстоянии 1см от оси волновода. Здесь $\xi = v_0 t - z$, голова ведущего сгустка расположена при $\xi = 0$.

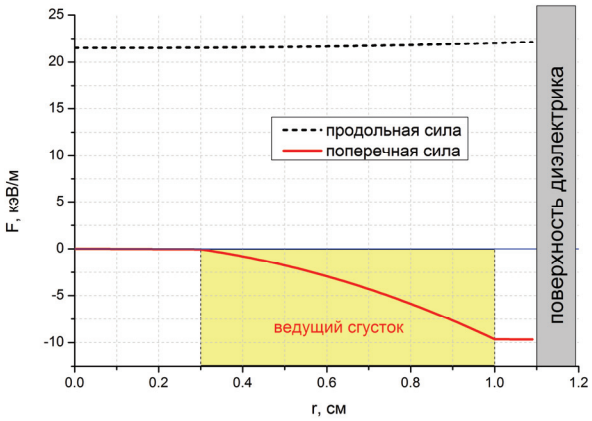


Рис.3. Поперечный профиль продольной (пунктирная линия) и поперечной сил (сплошная линия), действующих на пробную частицу, расположенную на расстоянии 7,562см от головы ведущего сгустка.

На рис. 3 показано радиальная зависимость продольной и поперечных сил, действующей на пробную частицу, расположенную в первом из максимумов ускоряющего поля, на расстоянии 7,562см позади головы ведущего сгустка. Продольная сила слабо изменяется в поперечном сечении транспортного канала, а радиальная сила остается фокусирующей по всему сечению канала.

ВЫВОДЫ

При исследовании возбуждения кильватерных полей электронным сгустком в плазменно-диэлектрическом волноводе обнаружено, что заполнение изотропной плазмой определенной плотности вакуумного канала транспортировки диэлектрического волновода приводит к появлению фокусирующего кильватерного поля, действующего на ускоряемый сгусток. Оптимизация обнаруженного механизма фокусировки тестового сгустка по плотности плазмы и другим параметрам диэлектрического волновода будет проведена в дальнейших исследованиях.

Работа выполнена с частичной поддержкой гранта STCU No. P522.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chen P., Dawson J.M., Huff R.W., Katsouleas T. Acceleration of electrons by the interaction of a bunched electron beam with a plasma // Phys. Rev. Lett. - 1985. - Vol.54, №.7. - P. 693-696.
2. Hogan M.J., Barnes C.D., Clayton C.E. et.al. Multi-GeV Energy Gain in a Plasma-Wakefield Accelerator // Phys. Rev. Lett. - 2005. - Vol.95. - P.054802.
3. Steinhauer L.C., Kimura W.D. Quasistatic capillary discharge plasma model // Phys. Rev. ST - Accelerators and Beams. – 2006. - Vol.9. – P.081301.
4. Butler A., Spence D.J., Hooker S.M. Guiding of High-Intensity Laser Pulses with a Hydrogen-Filled Capillary Discharge Waveguide // Phys. Rev. Lett. – 2002. - Vol.89. – P.185003.
5. Balakirev V.A., Karbushev N.I., Ostrovskiy A.O., Tkach Yu.V. Teoriya cherenkovskikh usiliteley i generatorov na relyativistskikh puchkakh. – Kiev: Naukova dumka, 1993. – 161c.
6. Balakirev V.A., Karas' V.I., Tolstoluzhskiy A.P., Faynberg Ya.B. Vozbuzhdenie kil'vaternykh poley relyativistskim elektronnym sgustkom v radial'no-neodnorodnoy plazme // Fizika plazmy. - 1997. - T.23, №4. - S.316-324.
7. Keinigs R., Jones M.E. Two-dimensional dynamics of the plasma wakefield accelerator // Phys. Fluids. - 1987. - Vol. 30, №1. - P.252-263.

PACS: 81.70.-q, 29.17.+w

DOSE MAPPING OF A GAMMA INDUSTRIAL RADIATION FACILITY USING A PRACTICAL AND COMPUTATIONAL DOSIMETRY

N. Boshnakova*, V.T. Lazurik, V.M. Lazurik, G. Popov, Yu. Rogov
V.N. Karasin Kharkiv National University
4 Svobody Sq., 61022, Kharkiv, Ukraine
** BULGAMMA, Sopharma PLC, Sophiya, Bulgaria*
E-mail: popov@univer.kharkov.ua
Received 9 April 2012, accepted 12 May 2012

Comparison results for absorbed dose mapping of the Co^{60} industrial radiation facility BULGAMMA of Sopharma PLC, Bulgaria using a practical and computational dosimetry are presented in the paper. The gamma radiation facility is based on JS-8500 Co^{60} irradiator produced by MDS Nordian, Canada. The absorbed dose distributions of gamma rays in an irradiated product on JS-8500 Co^{60} irradiator have been calculated using the ModeGR Monte Carlo software. The software ModeGR was designed specially for simulation of the absorbed dose distribution within multi-layer packages irradiated with gamma ray from flat panoramic Co^{60} source rack using a Monte Carlo method. Absorbed dose measurements into containers filled with material using Ethanol Chlorobenzene chemical dosimeters were carried out to validate the software ModeGR. The comparison results show that software ModeGR can be used as a predictive tool for detailed dose mapping in gamma irradiated product.
KEY WORDS: computational dosimetry, software ModeGR, Monte Carlo method, absorbed dose mapping, industrial gamma facility.

КАРТОГРАФИРОВАНИЕ ДОЗЫ ПРОМЫШЛЕННОГО ГАММА РАДИАЦИОННОГО ОБОРУДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРАКТИЧЕСКОЙ И КОМПЬЮТЕРНОЙ ДОЗИМЕТРИИ

Н. Бошнакова*, В.Т. Лазурик, В.М. Лазурик, Г.Ф. Попов, Ю.В. Рогов
Харьковский национальный университет им В.Н. Каразина
пл.Свободы 4, 61022, Харьков, Украина
** БУЛГАММА, Софарма, София, Болгария*

В работе рассматривается сравнение результатов картографирования поглощенной дозы гамма излучения Co^{60} на промышленном радиационном оборудовании БУЛГАММА, Софарма, София, Болгария с использованием практической и компьютерной дозиметрии. Гамма радиационное оборудование основано на излучателе JS-8500 Co^{60} производства фирмы MDS Nordian, Canada. Расчет распределение поглощенной дозы гамма излучения в облучаемой продукции на JS-8500 Co^{60} излучателе проводилось методом Монте Карло программой ModeGR. Программа ModeGR была специально разработана для моделирования распределение поглощенной дозы в многослойных мишенях, облучаемых гамма излучением на плоском панорамном излучателе Co^{60}. Измерение поглощенной дозы гамма излучения в контейнерах, заполненных материалом, проводилось химическими дозиметрами Ethanol Chlorobenzene для валидации программы ModeGR. Результаты сравнения экспериментальных и расчетных данных показали, что программа ModeGR может использоваться как инструментарий для предсказания детальной карты поглощенной дозы в гамма облученной продукции.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: компьютерная дозиметрия, программа ModeGR, метод Монте Карло, картографирование дозы, промышленный гамма излучатель.

КАРТОГРАФУВАННЯ ДОЗИ ПРОМИСЛОВОГО ГАМА РАДІАЦІЙНОГО ОБЛАДНАННЯ З ВИКОРИСТАННЯМ ПРАКТИЧНОЇ Й КОМП'ЮТЕРНОЇ ДОЗИМЕТРІЇ

Н. Бошнакова*, В.Т. Лазурик, В.М. Лазурик, Г.Ф. Попов, Ю.В. Рогов
Харківський національний університет ім В.Н. Каразіна
пл.Свободи 4, 61022, Харків, Україна
** БУЛГАММА, Софарма, Софія, Болгарія*

У роботі розглядається порівняння результатів картографування поглиненої дози гама випромінювання Co^{60} на промисловому радіаційному обладнанні БУЛГАММА, Софарма, Софія, Болгарія з використанням практичної й комп'ютерної дозиметрії. Гама радіаційне обладнання базується на випромінювачі JS-8500 Co^{60} виробництва фірми MDS Nordian, Canada. Розрахунок розподілу поглиненої дози гама випромінювання в продукції, що опромінюється на JS-8500 Co^{60} випромінювачі, проводився методом Монте Карло програмою ModeGR. Програма ModeGR була спеціально розроблена для моделювання розподілу поглиненої дози в багатошарових мішенях, що опромінюються гама випромінюванням на плоскому панорамному випромінювачі Co^{60}. Вимірювання поглиненої дози гама випромінювання в контейнерах, заповнених матеріалом, проводилося хімічними дозиметрами Ethanol Chlorobenzene для валідації програми ModeGR. Результати порівняння експериментальних і розрахункових даних показали, що програма ModeGR може використовуватися як інструментарій для прогнозування детальної карти поглиненої дози в гама опроміненої продукції.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: комп'ютерна дозиметрія, програма ModeGR, метод Монте Карло, картографування дози, промисловий гама випромінювач.

Gamma ray emitters like cobalt-60 became popular radiation sources for medical and industrial applications. More than 250 gamma ray irradiators are currently in operation in Member States of the International Atomic Energy Agency

© Boshnakova N., Lazurik V.T., Lazurik V.M., Popov G., Rogov Yu., 2012

(IAEA) [1]. The kinds of applications that use gamma radiation have steadily increased, from crosslinking, polymerization and sterilization of health care products to food irradiation and environmental applications such as flue gases, wastewater and sludge treatment. Emerging applications could be in the fields of nanomaterials, structure engineered materials (sorbents, composites, ordered polymers, etc.) and natural polymers.

To control these processes the routine dosimetry procedures must be carried out to identify the positions of minimum and maximum absorbed dose within the product containers and to establish gamma source operational parameters. A detailed dose mapping of the industrial gamma radiation facility, optimization of the gamma irradiator geometry can be performed using computer modeling (computational dosimetry), which allows to reduce significantly the routine dosimetric measurements [2, 3].

The Co^{60} industrial radiation facility BULGAMMA is used for sterilization of health care products, pharmaceuticals, drugs, cosmetics and food irradiation [4]. JS-850 gamma facility comprise a typical flat panoramic Co^{60} irradiator with overlapping product, a water filled storage pool and shuffle–dwell conveyer system [5].

Introduction success of radiation technologies into practice substantially depends on development of computational dosimetry which is based on verified and validated programs, capable effectively calculate absorbed dose distributions in processes of an irradiation [3, 6]. Authors have developed the software ModeGR specially for simulation of the absorbed dose distributions within multi-layer packages irradiated with gamma ray from flat panoramic Co^{60} source rack using a Monte Carlo (MC) method [6, 7]. The software ModeGR was used for simulation of some practical tasks in gamma radiation processing on the Co^{60} industrial radiation facility BULGAMMA.

The objective of this study was the performing of benchmarking (BM) experiments on gamma radiation facility to validate software ModeGR. BM experiments are based on comparison of simulation results against measurement results for the absorbed dose distributions in containers with product irradiated by gamma ray on the BULGAMMA industrial gamma radiation facility.

GAMMA RADIATION FACILITY AND DOSIMERTY SYSTEM

Experimental validation of theoretical predictions for absorbed dose distribution formation into containers with product irradiated with gamma ray was carried out on the radiation facility BULGAMMA based on JS-850 Co^{60} type gamma irradiator of Sopharma PLC, Bulgaria. JS-850 Co^{60} gamma irradiator is a wet storage, tote-box irradiator produced by MDS Nordian, Canada. JS-850 replenishment was in 2007 with total irradiator activity 98.484 Ci after source reloading. JS-850 comprise a typical flat panoramic Co^{60} irradiator with overlapping product, a water filled storage pool and shuffle–dwell conveyer system. Co^{60} source rack consist of 15 modules in 5x3 array. Only 4 modules in 2 x 2 array comprise the 10 pencils with active cobalt-60 slugs encapsulated into stainless steel capsule.

Conveyor system provides the following regimes irradiation the product containers, such as static, one pass continuous, multipass continuous or multipass shuffle–dwell. The aluminum containers with product are pneumatic moved around the Co^{60} source rack on a conveyor in 4 parallel rows at two levels on each sides of the source rack. Two levels are characterized by horizontal and vertical movements of the product containers. There are 63 dwell positions for the product container at eight passages. Position on one corner is empty. As a result, the product container irradiated with gamma ray at two sided. The aluminum container size is 60cm (width), 50cm (depth), and 90cm (height) with wall thickness in 2mm.

The absorbed dose distributions were measured with Ethanol Chlorobenzene (ECB) routing dosimeters. ECB dosimeter consists of dosimetric solution encapsulated in glass ampoule with diameter 10.7mm and volume 2ml. This dosimeter comprises an aerated solution of Chlorobenzene and water in ethanol to which a small quantity of acetate is added. The absorbed dose was calculated from a calibration curve connecting it with the electric conductivity of the dosimetric solution measured with oscilotitrator.

The maximum of the combined uncertainty related to dose determination in the heterogeneous targets with ECB dosimeters did not exceed 7.6 % (for 2 standard deviations). The uncertainty is a combination of the uncertainties related with dosimetry system calibration, in reproducibility of the series of experiments, irradiated materials into container variability, oscillometric reader variability.

Two benchmarking (BM) experiments were planned and performed on the gamma facility to validate software ModeGR.

1. The comparison of measurement and simulation results for dose mapping in 4 aluminum (Al) containers filled with reference materials and routing dosimeters irradiated with gamma ray and located on the lower and top levels of the conveyer line was planned in the BM-1 task. Product containers were irradiated in static position near the center of gamma source rack. In this special case the big gradient in the ADDs along all axises of container with gamma irradiated product should be observed.

2. The comparison of measurement and simulation results for the dose uniformity ratio (DUR) in Al containers filled with medical devices such as hemodialyzers and routing dosimeters irradiated with gamma ray in all 63 dwell positions was planned in the BM-2 task. It is a typical task in the technology related with radiation sterilization of medical devices. In this case the gamma ADDs should be uniform in the irradiated product in the range which is characterized by value of DUR = D_{max}/D_{min}, where D_{max} and D_{min} - maximum and minimum absorbed dose in an irradiated product.

GEOMETRICAL MODELS OF GAMMA RADIATION FACILITY FOR MC SIMULATION

Various types of gamma irradiators and methods of product container irradiation with gamma ray are used to reduce the dose uniformity ratio in an irradiated product and to maximize gamma radiation energy utilization. Panoramic irradiators are more suitable for industrial gamma ray processing.

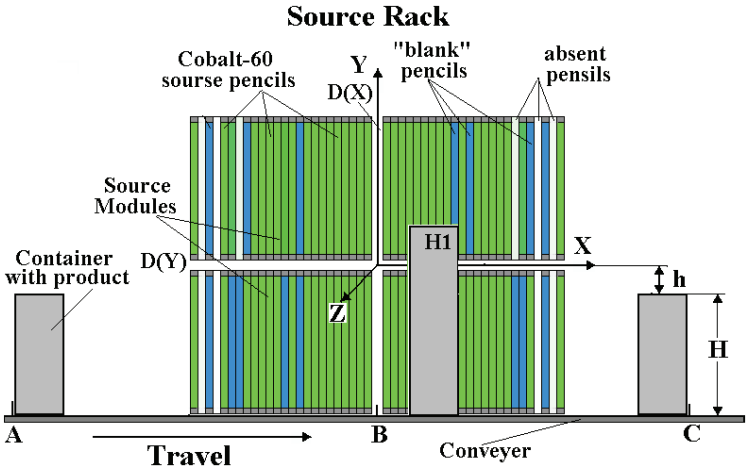


Fig.1. Geometrical arrangement of ^{60}Co source modules, conveyer and containers with product. The model of flat panoramic source rack comprises of four source modules, in 2 x 2 array.

Detailed description of geometrical model of gamma ray facility with irradiated targets was made for panoramic planar ^{60}Co source rack which is used as gamma source in the software ModeGR. In the computer model, the ^{60}Co source rack is represented as a rectangular planar frame with number of modules from 4 up to 20, which should be mounted in two levels, with uniform/non uniform distribution of ^{60}Co strength. General number of ^{60}Co source pencils in the source rack can be in the range from 1 up to 800.

Irradiated product can be represented in form of container with homogeneous materials as well as of container filled with stack of plates. The stack of plates can be interleaved with dosimetric films.

The product on a conveyer platform can be irradiated in tree modes:

• static mode - the container with product will irradiated in stationary regime;

• continuous mode - the container with product will continuously move on a conveyer platform in parallel with surface of source rack;

• shuffle-dwell mode - the container with product will discontinuously move on a conveyer platform in parallel with surface of source rack to a new irradiation position and then remaining at rest for a dwell time at that position. The dwell time is the time interval during which a process load is at rest at an irradiation position.

There are two types of source pencils which are used in the gamma source model:

• active cobalt-60 slugs encapsulated into stainless steel capsule, and

• a “blank,” inactive stainless steel cylinder.

Typical source pencil constructions is presented in Fig.1. All pencils types have the same geometrical characteristics but they can have various activity the ^{60}Co.

Typical source modules manufactured by firm MDS Nordian, Canada comprises 40-48 of the above cobalt-60 source pencils. The model of source module with pencils arrangement is presented in Fig.1. In this model the number of pencils in the source module can be in the range from 0 to 200. It is allows one source module to present as 1-5 typical source modules.

As a result, we can represent source rack with 20 typical source modules, in 2×10 array.

The schematic model of the flat panoramic source rack with arrangement of source modules, conveyer and irradiated containers with product is presented in Fig.1.

Distance D(X) and distance D(Y) characterize the displacement between modules along axis X and axis Y. Point A on Fig.1 characterize the entrance of back side of container with product into gamma radiation field (into irradiation room) in direction of conveyer movement.

Point C on Fig.1. characterize the exit of front face of container with product out gamma radiation field (out of irradiation room) in direction of conveyer movement. The container with product can continuously or discretely move on a conveyer platform in parallel with surface of source rack from the point A to the point C.

The computer model allows calculate:

• the transit dose - the dose received by the product in its movement into and out of the irradiation field (i.e. from the point A to first dwell position plus from end dwell position to the point C);

• the shuffle dose - the dose received by the product during its movement from one dwell position to the next.

The computer model allows calculate the absorbed dose distribution and optimize dose uniformity within product irradiated on Co^{60} multipass shuffle–dwell irradiator. The schematic model of a typical Co^{60} multipass shuffle–dwell irradiator with overlapping product to gamma source configuration is presented in Fig.2. The 64 Aluminum containers with product are moved around the Co^{60} source rack on a conveyor 8 passes at two levels. Two levels are characterized by horizontal and vertical movements of the product containers.

In multipass shuffle–dwell mode of operation, the product containers stay at the designated irradiation positions around the radiation source for a certain dwell time, and then they all move to the next positions, such that each container irradiated at each dwell position before leaving the irradiation room. There are 8 dwell positions for each of the passes and 64 for the eight passes. As a result, the product irradiated with gamma ray at two sided.

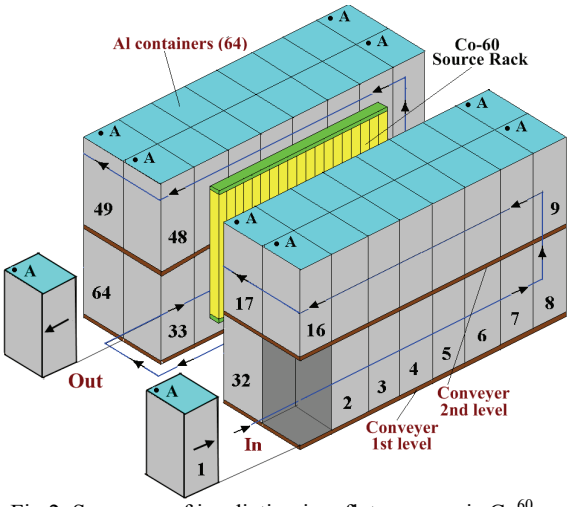


Fig.2. Sequence of irradiation in a flat panoramic Co^{60} source rack, multipass, two direction, multiposition.

The 64 aluminum containers with product are moved around the Co^{60} source rack on a conveyor 8 passes at two levels. "A" is a fixed point on the side surface of the process load, which passes through the irradiation room on both sides of the Co^{60} source rack from position 1 to position 64, with four passes on each side of the source

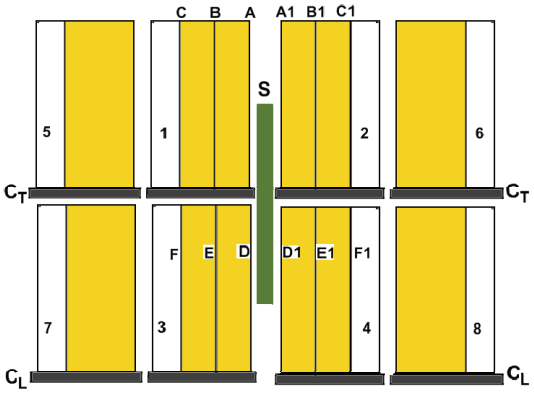


Fig.3. Experimental setup. S – gamma source rack, C_T – conveyer line on the top level, C_L – conveyer line on the lower level, 1, 2, 3, 4 –containers with reference materials and dosimeters, 5, 6, 7, 8 – containers with reference materials. A, B, C and A1, B1, C1 – positions of carton plates with dosimeters in two containers on the top level of conveyer line symmetrically from opposite side of source rack, D, E, F and D1, E1, F1 - positions of carton plates with dosimeters in two containers on the lower level of conveyer line symmetrically from opposite side of source rack.

DOSE MAPPING IN CONTAINERS WITH REFERANCE MATERIALS AND WITH MEDICAL DEVICES

In the first BM-1 experiment, four aluminum containers filled with reference materials and dosimeters were located near the center of source rack. Two containers were located on the lower level of conveyer line symmetrically from opposite side of source rack and two containers were located on the top level of conveyer line symmetrically from opposite side of source rack and symmetrically relatively two containers on the lower level. These containers were close surrounded from all side with the same containers filled with reference materials only without dosimeters. The package of gypsum-carton plates was used as reference material.

Fifteen ECB dosimeters were bonded to the specially made carton plate in different positions. Three carton plates with dosimeters were inserted between gypsum-carton plates on various distance from the entrance surface of Al containers.

1st carton plate with dosimeters was inserted between inner part of front side of aluminum container and the package of gypsum-carton plates.

2nd carton plate with dosimeters was inserted into the package center between gypsum-carton plates.

3d carton plate with dosimeters was inserted after the package of gypsum-carton plates.

Forty five dosimeters were located in each container with reference materials.

Full size of the package of gypsum-carton plates with dosimeter plates was 58x27x90cm, where:

the size 58cm located in parallel with source rack surface in direction of conveyer movement **(axis X),**

the size 90 cm - in parallel with source rack surface in direction of source rack height **(axis Y),**

the size 27cm is the package thickness of gypsum-carton plates with dosimeter plates and located perpendicular to source rack surface **(axis Z)** (See Fig. 3).

The grid of dosimeters in one container with reference materials is presented in Fig. 4a. The plates with 15 dosimeters in the first container are marked by A, B and C, in the second container – by A1, B1 and C1. Plates A and A1 are the entrance plates for gamma rays which are located from opposite sides of source rack. At that, all dosimeters with the same number in the two containers are symmetrically located from opposite side of source rack. Carton plates A and A1 with dosimeters were positioned on the distance 1cm from the entrance surface of Al containers. Carton plates B and B1 – on the distance 13cm, carton plates C and C1 – on the distance 27cm from the entrance surface of Al containers. The same dispositions of carton plates D, E, F and D1, E1, F1 with dosimeters are observed in two containers on the lower level.

The dispositions of 15 dosimeters on all carton plates along the height of source rack **(axis Y)** and along conveyer movement **(axis X)** are the same. An example dispositions of all 15 dosimeters on carton plate A1 is presented in Fig.4b. Counting of the dosimeter coordinates are carried out from right top corner of container side which is parallel to surface of source rack. All containers with reference materials and dosimeters were irradiated in static position 5400 s (90 min).

For the simulation of the absorbed dose in the gamma-irradiated product, accounting for the difference of gamma source activity in comparison with time of the source replenishment and time experiment was performed in accordance with the MDS-Nordian Table "Timer-Setting Table for Irradiator" by multiplication of the dwell time value by a coefficient 0.76.

This comparison experiment allows to investigate in detail the dose map structure in the reference materials in the

positions of maximal activity of the gamma source rack. In these four positions all irradiated product obtained maximal value of the absorbed dose in comparison with the other 59 positions.

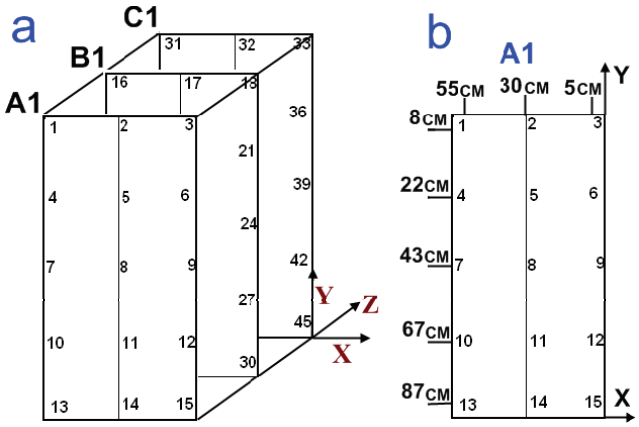


Fig.4. Dosimeters location in container.
a) Grid of dosimeters in container with reference materials.
b) The dispositions of 15 dosimeters on A1 carton plate along the height of source rack (axis Y) and along the conveyer movement (axis X), in cm.

In the process of experimental data handling of the absorbed dose map in 4 containers with reference product irradiated with gamma ray on two levels of conveyer system the following results were obtained for further analysis:

• The values of dose averaging over two dosimeters with the same number which are symmetrically located in two containers from opposite side of source rack on the lower and top levels. Dosimeters with the same number with symmetrically positions in two containers from opposite side of source rack are located in the pair sheets on the top level A-A1, B-B1, C-C1 and on the lower level – D-D1, E-E1, F-F1 (See Fig. 3).

• The absolute values for difference of absorbed dose values between two dosimeters with the same number which are symmetrically located in two containers from opposite side of source rack.

In the second BM-2 experiment a some aluminum containers filled with medical devices such as hemodialyzers were irradiated with gamma ray at two sided due to eight passes at two levels in all 63 dwell positions. 4 carton boxes with 20 hemodialyzers in each box were inserted in each aluminum container. Hemodialyzer construction mainly includes PE cylinder with diameter 3.8 cm and length 29cm which is filled with filter made of cellulose and closed from two sides with plastic cap. 4 carton boxes with size 38×29×35.5 cm were placed in 2(axis Y)x 2(axis X) array in each container. 20 hemodialyzers in 5(axis Z)×4(axis X) array were located in each carton box.

In one of container in each of four boxes 6 ECB dosimeters were bonded to 6 hemodialyzers at the center length of PE cylinders. ECB dosimeters in each box were bonded to the 1st , 3^{d} and 5th cylinders in the 1st row and to the 16th, 18th and 20th cylinders in the 4th row. All number of ECB dosimeters in the container was 24.

Container with dosimeters was located in the middle of containers group with hemodialyzers. Containers group with hemodialyzers was surrounded from all side with the containers filled with reference materials.

Container with hemodialyzers and with dosimeters was gamma irradiated in all 63 dwell positions with dwell time 2570 second. Bulk density of product in container was 0.054 g/cm^3.

RESULTS AND DISCUSSIONS

BM-1 experiment. Four aluminum containers filled with reference materials and dosimeters were irradiated in static positions near the center of source rack. Simulation of the gamma absorbed dose distribution in the containers filled with reference materials and dosimeters materials was carried out by the software ModeGR.

The irradiation method “Discrete mode” in the software ModeGR allows to simulate the product irradiation in a stationary regime. To do so, it has to be specified that the irradiation will be performed in 3 positions (“Number of positions” = 3), see Fig.1. Moreover, the left and right boundaries of irradiation must be set greater than source rack size (parameters “Left part of irradiation field” and “Right part of irradiation field”). For this case, the 1st and 3^{d} container positions will be located relatively to the source rack center on the distance values which are marked in the windows “Left part of irradiation field” (point A, Fig.1) and “Right part of irradiation field” (point C, Fig.1). The 2nd container position will be located in the point of conveyor line equal to the half of distance between the 1st and 3^{d} container positions. In the case when the values of “Left part of irradiation field” and ”Right part of irradiation field” are equal, the container in 2nd position will be located near the center of gamma source rack (point B, Fig.1) and contributions from containers in the 1st and 3^{d} positions can be neglected.

The comparison of simulation and measurement results for dosimeters which are located on the pair carton sheets A-A1, B-B1, D-D1, D-D1, E-E1and F-F1 in two containers from opposite side of source rack on the conveyer top and lower levels as function of containers height (axis Y) are presented in the Fig.5. As it is seen from the Fig.5. the big gradient of the absorbed dose values in the containers are observed along 3 spatial axises (X, Y, Z). The values of absorbed dose in positions Z=1cm, Z=13cm and Z=27cm are characterized the behavior of the gamma dose distributions along container thickness, axis Z. The values of absorbed dose in positions X=5cm, X=30cm and X=55cm are characterized the behavior of the gamma dose distributions along container width, axis X.

The comparison of simulation and measurement results for dosimeters which are located on the pair carton sheets A-A1, B-B1, D-D1 in two containers from opposite side of source rack on the conveyer top level has the same behavior as in on the pair carton sheets D-D1, E-E1and F-F1 on the conveyer lower level.

Detailed analysis of experimental results into BM-1 experiment have shown that the maximal difference of

absorbed doses for two dosimeters with the same number with symmetrically positions in two containers from opposite side of source rack for top level is 1 kGy, for lower layer - 0.8 kGy. Such difference is less than 7% of maximal value of the absorbed dose in an irradiated material.

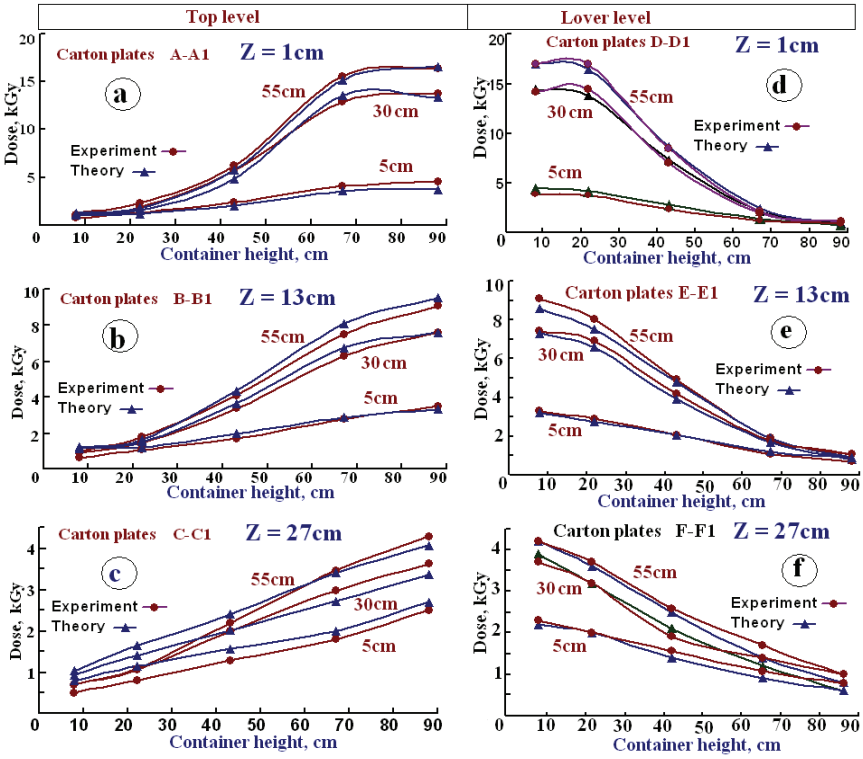


Fig.5. The absorbed dose distributions into dosimeters located on the pair carton sheets in two containers from opposite side of source rack as function of container height (axis Y). (a) Carton sheets A-A1, (b) B-B1, (c) C-C1 on the conveyer top level, and (d) carton sheets D-D1, (e) E-E1, (f) F-F1 on the conveyer lower level.

Maximal difference of the absorbed doses for two dosimeters with the same number with symmetrically positions in two containers from opposite side of source rack for top level is 1.4 kGy, for lower layer - 0.6 kGy.

Thus, it is possible to approve, that satisfactory agreement between results of computer modeling and dosimetric results in the main spatial areas of absorption of gamma ray energy is observed.

The differences which are observed in spatial points with small values of the absorbed dose from gamma radiation are related to the essential contribution to these points the gamma radiation scattered from walls of a room in which gamma source rack is located.

At computer simulation of the absorbed dose in materials irradiated with gamma ray, the influence of construction elements of radiation installation such as the rollers of conveyer system and other elements was not taken into account. It is necessary to carry out more precise experiments to estimate the influence of construction elements of radiation installation on formation of absorbed dose in gamma irradiated product. Such experiments will be carry out in a future.

On the basis of obtained data it is possible to estimate the value of the not taken into account the multiple scattered irradiation with the use of difference between calculated and measured values of the absorbed doses. For analyzed experiment this value can be estimated as value about 1 kGy.

BM-2 experiment. The comparison of simulation and measurement results for absorbed dose distributions in product container with hemodialyzers are presented in the Table.

The computer simulation with software RT-Office of the gamma dose map in product container loaded with hemodialyzers irradiated in regime of shuffle-dwell mode was performed in two stages:

• obtaining the data set for absorbed dose distributions in product container in each separate pass/level/side along gamma source rack (software ModeGR),

• building the dose map in an irradiated product on the base of the data set obtained for separate passes with variable parameters of irradiation (software RT-Builder).

It should be noted, that RT-Office is optimal for complicated radiation processes by using multi-stage simulation technology. In the 1st stage, the set of absorbed dose distributions in the product container will be calculated and stored for the following passes: top level - 1st row, top level – 2nd row, lover level - 1st row, lover level – 2nd row. The set of absorbed dose distributions were calculated with ModeGR. Let's assume that conveyor line is symmetrical relatively to the source rack and containers are homogeneously loaded with product. Then the dose distributions data into 8 passes can be obtained on the base of previously calculated dose distributions (at the 1st stage) for one pass by symmetry considerations.

RT-Builder was used at the 2nd stage. RT-Builder is the specialized tool of RT-Office for the calculation and analysis of the cumulative 3D dose distribution in product irradiated with various methods, such as multi-pass, multi-level, or multi-sided. The example below (see Table) is the simulation of a 3D dose distributions in a product container loaded with hemodialyzers.

Analysis of simulation and measurement results (see Table) into BM-2 experiment have shown that spatial dose distribution in the container with hemodialyzers is close to uniform. In this case the values of average dose (D_{av}) and

dose uniformity ratio (DUR) may be used for performing comparison of simulation and experimental data. Analysis results: for experiment D_{av} =22.2 kGy, DUR =1.1, for simulation D_{av} = 22.3kGy, DUR =1.1. Such coincidence of comparison results indicates that satisfactory agreement between results of computer modeling and dosimetric results is observed.

Table

Comparison of Simulation and Experimental results

		Lower level	Experimental Data	
Y=72cm	1st box			2nd box
X, cm	56cm	36cm	24cm	4cm
Z=4cm	22.6	23.24	21.97	20.43
Z=20cm	20.43	21.04	21.35	23.24
Z=37cm	20.43	21.97	22.6	23.24
		Top level	Experimental Data	
Y=36cm	3d box		4th box	
	Dose, kGy	Dose, kGy	Dose, kGy	Dose, kGy
X, cm	56cm	36cm	24cm	4cm
Z=4cm	21.97	23.24	23.24	23.24
Z=20cm	21.66	21.97	22.6	21.97
Z=37cm	21.97	22.6	22.6	22.6
		Lower level	Simulation	Data
Y=72cm	1st box			2nd box
X, cm	56cm	36cm	24cm	4cm
Z=4cm	22.1	22.6	22.5	22.9
Z=20cm	22	21.6	21.6	21.9
Z=37cm	22.1	22.6	22.5	22.9
		Top level	Simulation	Data
Y=36cm	3d box			4th box
X, cm	56cm	36cm	24cm	4cm
Z=4cm	22.5	22.6	22.5	23.3
Z=20cm	21.8	21.6	21.5	21.6
Z=37cm	22.5	22.6	22.5	23.3

It should be note, statistical analysis of deviations of experimental from simulation data for absorbed doses have shown that the deviations have stochastic character and can be interpret as statistical errors of experiment and simulation.

CONCLUSION

In two BM experiments the measured absorbed dose of Co^{60} gamma rays in dosimeters located into product are in agreement with the results obtained with the ModeGR software. This agreement indicate that the developed mathematical model in the ModeGR software is reliable and can be used for simulation of gamma ray processing. The comparison of simulation and experimental results show that ModeGR software can be used as a predictive tool for detailed dose mapping in an irradiated product on the Co^{60} industrial radiation facility.

Acknowledgements

The work was carried out with funding from the International Atomic Energy Agency, project RER-08010.

REFERENCES

1. International Atomic Energy Agency, Gamma irradiators for radiation processing. Vienna, 2005. - P.1-40.
2. ASTM Standard E2322-02 - "Standard Guide for Selection and Use of Mathematical Methods for Calculating Absorbed Dose in Radiation Processing Applications". Annual Book of ASTM Standards. – 2002. - Vol.12.
3. Lazurik V.T., Lazurik V.M., Popov G., Rogov Yu., Modeling of processes of an irradiation for industrial technologies // Journal of Kharkiv University, Math. Modeling. and Inf. Technol. Series. - 2004. - №.605, Issue 2. - P.72-89.
4. Ivanova M., Boshnakova N., Tsrunchev T. Radiation processing in Bulgaria. Proceed. of the Coordination Meeting of the TC RER/8/10 project. "Status and prospects of radiation processing in Europe". Warsaw, Poland. - 2005. - P.28-31.
5. Nordian. Canadian Irradiation Center. Producer of gamma irradiators. http://www.mdsnordion.com
6. Lazurik V.T., Lazurik V.M., Popov G., Rogov Yu., Zimek.Z. Information System and Software for Quality Control of Radiation Processing / IAEA: Collaborating Center for Radiation Processing and Industrial Dosimetry. - 2011. -Warsaw, Poland. - 232 p.
7. Boshnakova N. Lazurik V.T., Lazurik V.M., Popov G.F., Rogov Yu.V. Validation of the software ModeGR for simulation of gamma ray processing. Tezisy dokladov mezhd. konf. «Sovremennye problemy matematiki i ee prilozheniya v estestvennykh naukakh i informatsionnykh tekhnologiyakh. - Khar'kov. - 2011. – S.168.

УДК 621.039.546

НЕЙТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ СУХОМ ХРАНЕНИИ ОТРАБОТАВШЕГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

В.Г. Рудычев[1], Е.В. Рудычев[2], С.А. Письменецкий[1], А.Ф. Щусь[1]
[1]*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина*
г. Харьков, 61022 Украина, пл. Свободы, 4
[2]*Национальный Научный Центр «Харьковский физико-технический иститут»*
ул. Академическая 1, г. Харьков, Украина, 61108
E-mail: rud@pht.univer.kharkov.ua
Received 27 April 2012

Для расчета поля нейтронного излучения вокруг вентилируемого контейнера сухого хранения отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) Запорожской АЭС использован метод Монте-Карло, реализованный в пакете MCNP. Показано, что основным источником нейтронов в хранящемся ОЯТ является ^{244}Cm, вклад реакций (α, n) незначителен. Спектр нейтронов для моделирования был описан распределением Максвелла. Показано существенное отличие мощности дозы нейтронов в аксиальном и в радиальном направлениях из-за различия защитных свойств контейнера в соответствующих направлениях. Для усиления радиационной защиты от нейтронного излучения при хранении ОЯТ с повышенным выгоранием предложен дополнительный защитный экран и оптимизированы его размеры, обеспечивающие существенное снижение мощности дозы. Рассчитаны характеристики нейтронных потоков при длительном хранении ОЯТ.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ОЯТ, сухое хранение, MCNP-симуляция, внешнее излучение контейнера, нейтроны, зависимость от времени.

NEUTRON RADIATION UNDER THE DRY STORAGE OF THE SPENT NUCLEAR FUEL

V.G. Rudychev[1], Y.V. Rudychev[2], S.A. Pismenetskiy[1], A.F. Shchus
[1]*V.N. Karazin Kharkov National University*
Ukraine, Kharkiv, Svobody sq. 4, 61022
[2]*National Scientific Center, Kharkov Institute of Physics and Technology*
1, Akademicheskaya st., Kharkov, Ukraine, 61108
To calculate the neutron radiation field around a ventilated container filled with spent nuclear fuel at ZNPP dry accumulated Monte Carlo simulation package used implemented in MCNP. It is shown that the main source of neutrons in the spent fuel is stored ^{244}Cm, the contribution of (α,n) reactions is negligible. The neutron spectrum for the simulation was described by the Maxwell distribution. There is a significant difference between the neutron dose rate in the axial and radial directions due to the differences in the protective properties of the container in their respective areas. To strengthen the radiation protection from the neutron emission during storage of spent nuclear fuel with high burnup offered an additional shield, and its dimensions are optimized to ensure a significant reduction in dose. The characteristics of neutron fluxes in long-term storage of spent nuclear fuel are calculated.
KEY WORDS: SNF, dry storage, MCNP-simulation, external cask radiation, neutrons, time dependence.

НЕЙТРОННЕ ВИПРОМІНЮВАННЯ ПРИ СУХОМУ ЗБЕРІГАННІ ВІДПРАЦЬОВАНОГО ЯДЕРНОГО ПАЛИВА

В.Г. Рудичев[1], Е.В. Рудичев[2], С.О. Письменецький[1], О.Ф. Щусь[1]
[1]*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна*
м. Харків, 61022, пл. Свободи, 4, Україна
[2] *Національний науковий центр, «Харківський фізико-технічний інститут»*
м. Харків, вул. Академічна, 1
Для розрахунку поля нейтронного випромінювання навколо вентильованого контейнера сухого зберігання відпрацьованого ядерного палива(ВЯП) Запорізької АЕС було використано метод симуляції Монте-Карло, реалізований в пакеті MCNP. Доведено, що головним джерелом нейтронів відпрацьованого палива є ^{244}Cm, а внесок реакцій (α, n) є незначним. Спектр нейтронів для моделювання був описаний розподілом Максвелла. Доведено істотну різницю потужності дози в аксіальному і радіальному напрямках, яка виникає з-за відмінності захисних властивостей контейнера у відповідних напрямках. Для підсилення радіаційного захисту від нейтронного випромінювання при зберіганні ВЯП з підвищеним вигоранням запропоновано додатковий захисний екран і оптимізовані його розміри, які забезпечують істотне зниження потужності дози. Розраховані характеристики нейтронних потоків при довготривалому зберіганні ВЯП.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: ВЯП, сухе зберігання, MCNP-симуляція, зовнішнє випромінювання контейнера, нейтрони, залежність від часу.

Одной из проблем, стоящей перед атомной энергетикой Украины, является своевременное удаление из прireакторных бассейнов выдержки (БВ) отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). При переполнении БВ необходимо останавливать реакторы АЭС. Со времен СССР проводился вывоз ОЯТ на территорию Российской федерации. За последние годы стоимость вывоза отработавшего топлива существенно возросла, поэтому было принято решение о создании на крупнейшей в Европе Запорожской АЭС сухого хранилища отработавшего ядерного топлива со сроком хранения ОЯТ до 50 лет.

На Запорожской АЭС создано и с 2001г эксплуатируется сухое хранилище отработавшего ядерного

© Rudychev V.G., Rudychev Y.V., Pismenetskiy S.A., Shchus A.F., 2012

топлива [1]. Для сухого хранения используются специальные вентилируемые контейнеры (ВКХ), являющиеся модификацией под шестигранные ТВС ВВЭР-1000 контейнеров VSC-24 фирмы "Sierra Nuclear Corporation" США [2]. В них проводят загрузку отработавших ТВС после 5-летней выдержки, а затем размещают на территории АЭС. В работах [3,4] детально исследованы характеристики внешнего γ-излучения одиночного контейнера, а также прогноз радиационных характеристик при сроке хранения до 50 лет.

Целью настоящей работы является расчет и анализ внешнего нейтронного излучения одиночного контейнера, а также характеристики нейтронных потоков при длительном хранении ОЯТ.

Конструкция вентилируемого контейнера обеспечивает радиационную защиту и отвод остаточного тепла [1]. Внутри контейнера установлена многоместная герметичная корзина из углеродистой стали, в которой в шестигранных направляющих трубах, размещены ТВС. Корзина для улучшения теплопередачи заполнена гелием под давлением, близким к атмосферному. Между стенкой корзины и обечайкой контейнера имеется зазор, по которому вследствие естественной конвекции проходит воздух, унося излучаемое ТВС тепло. В совокупности металлическая стенка корзины толщиной 2,5 см, металлическая обечайка толщиной 7,5 см и бетонный корпус контейнера толщиной 70 см служат радиационной защитой в радиальном направлении. В аксиальном направлении ее образуют крышки корзины и контейнера, толщиной около 45 см стали и 5 см пластина водородсодержащей пластмассы для защиты от нейтронов.

ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕЙТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Нейтроны в ОЯТ образуются при спонтанном делении различных актиноидов и реакциях (α, n) в основном на легких элементах. Спонтанное деление тяжелых элементов является основным источником нейтронов. Выход нейтронов при спонтанном делении и в реакции $^{18}O(\alpha,n)^{21}Ne$ для отдельных актиноидов приведены в таблице 1 [5] (для отработавшего топлива с начальным обогащением 4,4%, средним выгоранием 41,5 МВт·сут/кгU после 5-летней выдержки). Изотоп кислорода ^{18}O содержится в количестве 0,2% в кислороде диоксида урана. Практически для большинства актиноидов вероятность спонтанного деления намного меньше, чем для альфа-распада (см. колонку 5 в табл. 1). Другая картина наблюдается для калифорния и более тяжелых четных элементов для которых эти вероятности одного порядка.

Таблица 1. Характеристики актиноидов

Изотоп	Преимущественный тип излучения	Период полураспада изотопа для спонтанного деления, лет.	Выход нейтронов в реакции (α,n) в оксиде, нейтр./с·расп.	Вероятность спонтанного деления на распад.	Множественность нейтронов спонтанного деления	Удельная активность, Бк/т, 5 лет выдержки, выгорание 41,5 МВт·сут./кгU	Выход нейтронов в реакции (α,n) в оксиде, нейтр./с·т	Выход нейтронов спонтанного деления, нейтр./с·т
1	2	3	4	5	6	7	8	9
^{235}U	α	3,50E+17	8,99E-09	2E-09	1,86	9,94E+08	8,94E+00	3,70E+00
^{236}U	α	1,95E+16	1,04E-08	1,2E-09	1,89	1,38E+10	1,44E+02	3,13E+01
^{238}U	α	8,20E+15	6,92E-09	5,45E-07	1,98	1,16E+10	8,03E+01	1,25E+04
^{238}Pu	α	4,77E+10	2,09E-08	1,84E-09	2,24	7,74E+13	1,62E+06	3,19E+05
^{239}Pu	α	5,48E+15	1,66E-08	4,4E-13	2,16	1,27E+14	2,11E+06	1,21E+02
^{240}Pu	α	1,16E+11	1,68E-08	5,66E-08	2,17	2,04E+13	3,43E+05	2,51E+06
^{241}Pu	β	2,50E+15	-	6,16E-15	2,25	4,3E+15	1,44E+03	5,96E+01
^{241}Am	α	1,05E+14	1,43E-08	4,11E-12	3,22	9,07E+12	1,30E+05	1,20E+02
^{242}Pu	α	6,84E+10	2,07E-08	5,45E-06	2,15	8,57E+10	1,77E+03	1,00E+06
$^{242}Am^{M}$	β	8,81E+11	-	1,6E-10	2,42	1,01E+11	0,00E+00	3,91E+01
^{242}Cm	α	6,56E+6	3,13E-08	6,81E-08	2,54	6,96E+11	2,18E+04	1,20E+05
^{244}Cm	α	1,35E+7	2,58E-08	1,34E-06	2,7	1,16E+14	2,99E+06	4,20E+08
Сумма							7,22E+06	4,24E+08

Как видно из таблицы, основным источником нейтронов (около 99%) является ^{244}Cm, с периодом полураспада 18,1 года. Энергетические спектры нейтронов, испускаемых при спонтанном делении актиноидов, подобны спектрам вынужденного деления ^{235}U и могут быть аппроксимированы распределением Максвелла [10] в виде:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{\pi\theta^3}} \exp(-E/\theta), \quad (1)$$

где E – энергия, МэВ, а θ - параметр жесткости, равный 1,33 МэВ для ^{244}Cm [10].

Форма спектра зависит от нескольких переменных, таких как энергия возбуждения осколков деления и выделяемая средняя энергия полного деления. Средняя энергия нейтронов около 2 МэВ, при низких энергиях спектральное распределение пропорционально энергии, а при высоких энергиях - экспоненциально уменьшается. Диапазон энергий нейтронов - от 0 до 10 МэВ.

Число нейтронов, испускаемых при спонтанном или вынужденном делении, называется множественностью нейтронов. В разных актах деления множественность нейтронов может изменяться от 0 до 6 или более в зависимости от распределения энергии возбуждения между осколками деления. Средняя множественность нейтронов при спонтанном делении актиноидов приведена в 6-м столбце табл. 1. С ростом атомного номера множественность растет.

Приведенные выше данные позволяют выполнить оценку количества нейтронов, образующихся в ОЯТ за счет спонтанного деления и альфа-распада актиноидов. При этом, как следует из сравнения данных в колонках 8 и 9 таблицы 1, основной вклад в общее количество нейтронов для ОЯТ с выдержкой 5 лет и выгоранием 41,5 МВт·сут./кгU дают нейтроны, образовавшиеся при спонтанном делении актиноидов, а именно - ^{244}Cm. Для расчетов транспорта нейтронов из области их образования в ОЯТ на поверхность контейнеров хранения было использовано спектральное распределение (1).

РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК НЕЙТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВНЕ КОНТЕЙНЕРА ХРАНЕНИЯ

Для расчета характеристик нейтронного излучения вне контейнера хранения применялась программа MCNP [6], которая широко используется для анализа защитных свойств конструкций в атомной промышленности США. MCNP (Monte Carlo N Particle) представляет собой многоцелевой код для расчета транспорта частиц в веществе, реализованный на базе метода Монте-Карло. Данный код позволяет рассчитать мощность дозы излучений (МД) и обрабатывать до 34 видов частиц в широком диапазоне энергий. Для фотонов это: 1 кэВ - 100 ГэВ. Для электронов: 1 кэВ - 1 ГэВ. Для нейтронов: (0- 150) МэВ.

В отличие от расчетов прохождения гамма-квантов в биологической защите ВКХ, где из-за большого ослабления приходится использовать метод минимизации дисперсии [3,4], при расчете транспорта нейтронов программный пакет MCNP допускает прямые расчеты защитных характеристик таких систем, как ВКХ.

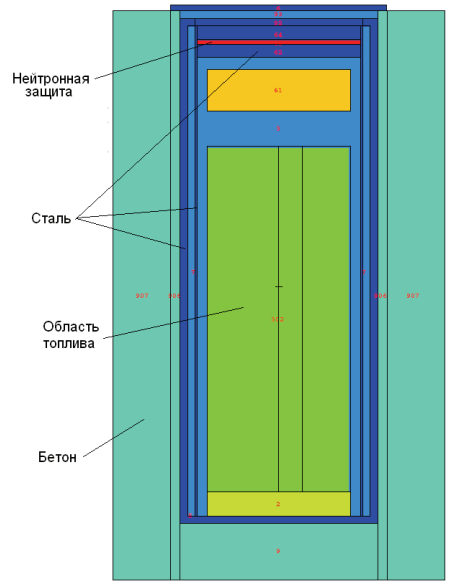


Рис.1. Пространственная модель конфигурации контейнера с однородным распределением активности источника

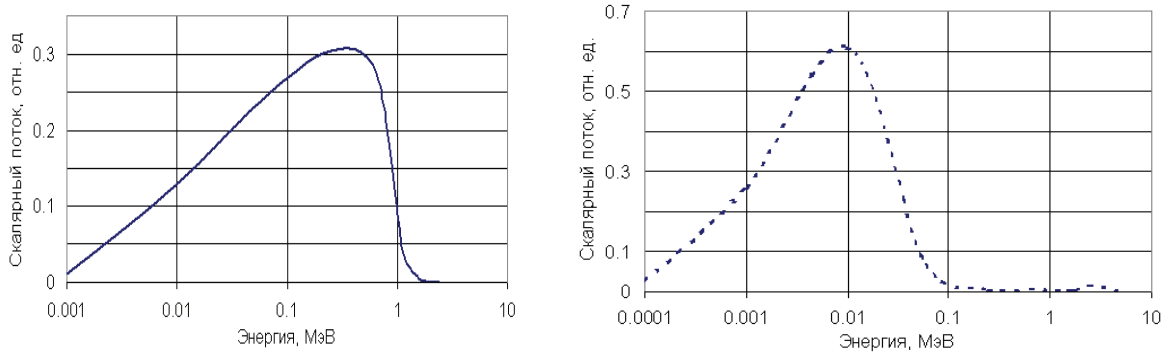
На рис.1. приведена пространственная модель конфигурации ВКХ с однородным распределением активности источника, используемая при расчете транспорта нейтронов. Отметим, что защитные свойства вентилируемого контейнера хранения для нейтронов существенно различны в радиальном и аксиальном направлениях. Эффективность защиты определяется используемыми конструкционными материалами. Значительная толщина бетона в радиальном направлении (≈ 70 см), содержащего большое количество элементов с малым атомным номером, эффективно замедляет и в дальнейшем поглощает нейтроны из ОЯТ. В аксиальном направлении основным поглотителем является сталь, толщина нейтронной защиты 5 см. Расчеты показывают, что угловое распределение потока нейтронов на крышке и боковой поверхности различаются слабо. На рис. 2 приведены спектры потока нейтронов на поверхности крышки ВКХ (в центре) и боковой поверхности (на половине высоты топлива).

Как видно из данных, приведенных на рис.2, нейтроны на боковой поверхности имеют существенно меньшую наиболее вероятную энергию по сравнению с энергией нейтронов на середине верхней крышки. Средняя энергия нейтронов вблизи боковой поверхности равна 0,083 МэВ, на крышке - 0,25 МэВ, а в исходном спектре – 2 МэВ.

На рис.3 приведена зависимость мощности дозы, создаваемой нейтронами на поверхности крышки и на расстоянии 1м от нее. Расчет выполнен для ОТВС с выгоранием 41,5 МВт·сут./кгU и выдержкой 5 лет.

Приведенные на рис.3 зависимости показывают, что на поверхности крышки (в центре) нейтроны создают достаточно высокую мощность дозы (≈104 мкЗв/ч). Мощность дозы быстро спадает с удалением от оси по радиусу и на краю крышки не превышает ≈ 0,05 мкЗв/ч. При высоте 1 м над поверхностью крышки ВКХ

мощность дозы на оси крышки меньше в 2,5 раза, а спад в радиальном направлении существенно медленнее (на краю до 0,4 мкЗв/ч).



а) б)

Рис. 2. Поток нейтронов на поверхности контейнера ВКХ
а) на поверхности крышки ВКХ, б) на боковой поверхности ВКХ

Мощность дозы на боковой поверхности ВКХ не превышает 0,6-0,8 мкЗв/ч, а при удалении на 1 м не превышает 0,02 мкЗв/ч.

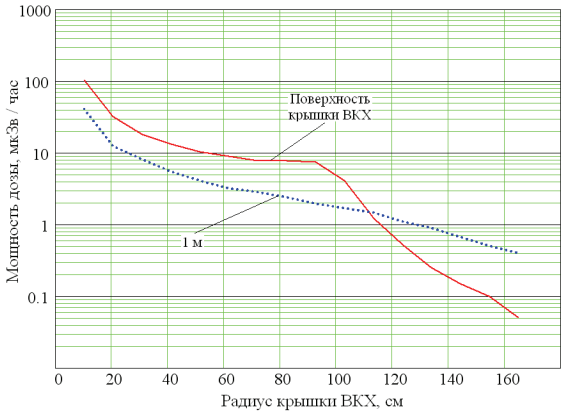


Рис.3. Зависимость мощности дозы от расстояния от оси крышки на поверхности крышки ВКХ (сплошная) и на высоте от нее 1м (пунктир)

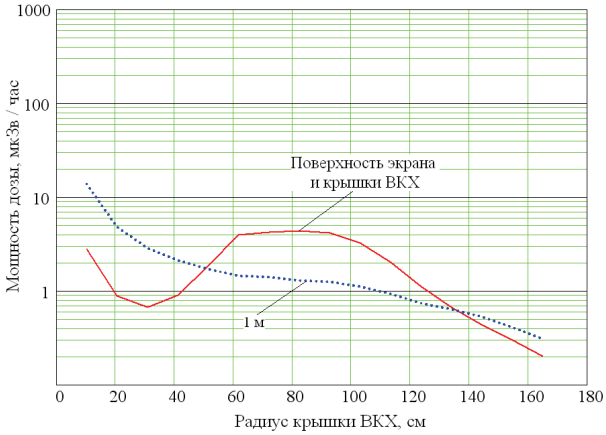


Рис.4. Зависимость мощности дозы от расстояния (радиуса) от оси крышки на поверхности защитного экрана, размещенного на крышке ВКХ, и на расстоянии от него 1 м.

Для повышения эффективности использования топлива в реакторы ВВЭР-1000 в последнее время загружается топливо с повышенным выгоранием, так называемые ТВС-А. Реакторы с таким топливом работают с 4-х летним циклом (кампанией) и при этом образуется значительное количество актиноидов, в том числе ^{244}Cm, создающего большой поток нейтронов [6].

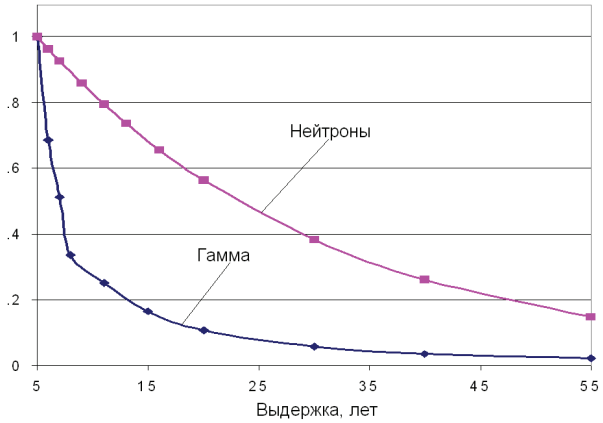


Рис.5. Зависимости мощности доз на поверхности контейнера от времени хранения ОЯТ, создаваемые нейтронами и гамма-квантами.

Мощность дозы, создаваемая нейтронами на поверхности крышки (в центре) при загрузке контейнера ОТВС-А превышает 300 мкЗв/ч. Для снижения мощности дозы на поверхности крышки контейнера может быть предложен вариант размещения сверху ВКХ дополнительного бетонного защитного экрана в виде диска. Выполнена оптимизация параметров экрана (диаметр и толщина), показано, что при толщине 20 см и диаметре 120 см (вес такого экрана около 500 кг) происходит существенное снижение мощности дозы на поверхности как экрана, так и крышке контейнера. Отметим, что диаметр контейнера 340 см. На рис.4 приведена зависимость мощности дозы на поверхности защитного экрана и на расстоянии 1м от него.

При обращении с ОЯТ важной характеристикой является спад мощности дозы (потоков гамма-квантов и нейтронов) снаружи контейнеров в зависимости от времени хранения. На рис.5 приведены зависимости мощности дозы создаваемые нейтронами и гамма-квантами [5] от времени хранения. Мощности дозы для нейтронов и гамма-квантов нормированы на их значения для 5 летней выдержки, соответственно. Приведенные на рис.5 данные показывают, что мощность

дозы, создаваемая гамма-квантами спадает значительно быстрее по сравнению с мощностью дозы от нейтронов. Это связано с тем, что основной вклад в МД вне контейнера хранения создают высокоэнергетические гамма-кванты с энергией свыше 450 кэВ [4] от изотопов, период полураспада которых значительно меньше чем период полураспада ^{244}Cm.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В пакете MCNP создана пространственная модель конфигурации вентилируемого контейнера хранения с однородным распределением активности нейтронного источника по объему ОЯТ.

Выполненные расчеты показали существенное отличие в мощности дозы, создаваемой нейтронами в аксиальном и в радиальном направлениях из-за различия защитных свойств контейнера.

Для обеспечения радиационной защиты при хранении ОЯТ с повышенным выгоранием проведена оптимизация размеров защитного экрана обеспечивающего существенное снижение мощности дозы.

Показано, что мощность дозы, создаваемая нейтронами, спадает значительно медленней, чем мощность дозы от гамма-квантов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Luchna A.Є., Lavrenchuk A.I., Sєdnєv V.A., Vasil'chenko V.M., Dvoyeglazov O.M., Medvedyev V.I., Pechera Yu.M. Sukhe skhovishche vidprats'ovanogo yadernogo palyva zaporiz'koyi AES. Zabezpechennya bezpeky. Mezhdunarodnaya konferentsiya "Aktual'nye problemy yadernoy fiziki i atomnoy energetiki". – 2006. - Kiev, http://www.kinr.kiev.ua/NPAE_Kyiv2006/proc/Luchna.pdf
2. Ventilated Storage Cask VSC-24. US NRC Certificate of Compliance. 05.07.93. NUREG-1350.
3. Klimov S.P., Lazurik V.T., Luchnaya A.E., Pis'menetskiy S.A., Rudychev V.G., Rudychev E.V. Kharakteristiki izlucheniya pri sukhom khranenii otrabotavshego yadernogo topliva na Zaporozhskoy AES // The Journal of Kharkiv National University, physical series: Nuclei, Particles, Fields. – 2009. - №845. - Vyp.1(41). - S.31-38.
4. Zalyubovskiy I.I., Pis'menetskiy S.A., Rudychev V.G., Klimov S.P., Luchnaya A.E., Rudychev E.V. Vneshnee izluchenie konteynera sukhogo khraneniya OYaT VVER-1000 Zaporozhskoy AES // Atomnaya energiya. – 2010. - T.109. - Vyp.6. – S.324-329.
5. Duglas R., Ensslin N., Kheystings S. i dr. Passivnyy nerazrushayushchiy analiz yadernykh materialov. - M.: Binom, 2000.
6. MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory. - 2005.
7. Aleksandrova Z.A., Bol'shov V.I., Kuznetsov V.F. i dr. Spektry mgnovennykh neytronov spontannogo deleniya ^{252}Cf, ^{244}Cm i ^{240}Pu // Atomnaya energiya. – 1974. - T.36. - Vyp.4. - S.282– 285.

PACS 07.85.Fv;41.50.+h;41.75.Ak;29.20.Ba

ИСТОЧНИК КВАЗИМОНОХРОМАТИЧЕСКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА БАЗЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО УСКОРИТЕЛЯ ПРОТОНОВ

С.А. Вершинский, А.Н. Бугай, М.И. Захарец, В.Л. Денисенко, В.Е. Сторижко
Институт прикладной физики НАН Украины
ул. Петропавловская, 58, Сумы 40030, Украина
E-mail: topicers@gmail.com
Received 21 March 2012, revised 26 April 2012, accepted 2 May 2012

Для создания высокоинтенсивного квазимонохроматического источника рентгеновского излучения с ионным возбуждением был использован электростатический ускоритель микроаналитического комплекса Института прикладной физики. Приведены результаты моделирования ионной оптики для источника. Для фокусирования рентгеновского излучения была выбрана поликапиллярная оптика. Проведены расчеты выхода квантов К-серии характеристического рентгеновского излучения и их сравнение с экспериментальными данными. Как показывают предварительные расчеты, использование протонных пучков с энергией в несколько МэВ позволяет получить одинаковый с электронным пучком с энергией 30-50 кэВ выход излучения К-линий, но при этом на два порядка понизить фон тормозного излучения и таким образом практически исключить необходимость применения фильтров или монохроматоров.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: квазимонохроматический источник рентгеновского излучения, электростатический ускоритель, рентгеновская оптика, измерения выхода рентгеновского излучения, ионно-оптическая система.

X-RAY QUASI-MONOCHROMATIC SOURCE BASED ON ELECTROSTATIC PROTON ACCELERATOR

S.A. Vershynskyi, O.M. Buhay, M.I. Zaharets, V.L. Denysenko, V.E. Storizhko
Institute of Applied Physics of NAS of Ukraine
58, Petropavlivska St., 40030 Sumy, Ukraine

The microanalytical facility based on an electrostatic accelerator available at the Institute of Applied Physics, is used to construct a high-intensity quasi-monochromatic X-ray source with ion excitation. The results of ion-optical system modeling for the source are presented. Polycapillary optics is chosen to perform X-ray focusing of radiation, produced by source. K-line yield calculations of characteristic X-rays are performed and compared with experimental data. As preliminary calculations show, 2 MeV proton beams provide the K-line yield similar to that obtained with 30 - 50 keV electron beams but with the bremsstrahlung background reduced by two orders of magnitude. Thus, filters or monochromators are practically unnecessary.
KEY WORDS: X-ray quasi-monochromatic source, electrostatic accelerator, X-ray optics, X-ray yield measurements, ion-optical system.

ДЖЕРЕЛО КВАЗІМОНОХРОМАТИЧНОГО РЕНТГЕНІВСЬКОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ НА БАЗІ ЕЛЕКТРОСТАТИЧНОГО ПРИСКОРЮВАЧА ПРОТОНІВ

С.О. Вершинський, О.М. Бугай, М.І. Захарець, В.Л. Денисенко, В.Ю. Сторіжко
Інститут прикладної фізики НАН України
вул. Петропавлівська, 58, Суми 40030, Україна

Для створення високоінтенсивного квазімонохроматичного джерела рентгенівського випромінювання з іонним збудженням був використаний електростатичний прискорювач мікроаналітичного комплексу Інституту прикладної фізики. Наведено результати моделювання іонної оптики для джерела. Для фокусування рентгенівського випромінювання із джерела була обрана полікапілярна оптика. Проведено розрахунки виходу квантів К-серії характеристичного рентгенівського випромінювання та їх порівняння з експериментальними даними. Як показують попередні розрахунки, застосування протонних пучків з енергією у декілька МеВ дозволяє отримати однаковий з електронним пучком з енергією 30-50 кеВ вихід випромінювання К-ліній, але при цьому на два порядки знизити фон гальмівного випромінювання і таким чином практично виключити необхідність в застосуванні фільтрів чи монохроматорів.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: квазімонохроматичне джерело рентгенівського випромінювання, електростатичний прискорювач, рентгенівська оптика, вимірювання виходу рентгенівського випромінювання, іонно-оптична система.

Широкое распространение рентгеновских методов исследования на базе источников синхротронного излучения (СИ) стимулировало революционный прогресс в рентгеновской оптике и создании позиционно-чувствительных детекторов. Можно ожидать, что возможности этих методов получат свое дальнейшее развитие в связи со строительством еще более мощных источников на базе лазеров на свободных электронах (XFEL), открывающих перспективу исследования физико-химических процессов в реальном масштабе времени. Серьезным недостатком указанных источников является их громоздкость и стоимость, что создает реальную проблему, в частности, их широкого применения в клинической практике. В связи с этим остается актуальной разработка компактных источников рентгеновского излучения с высокой яркостью на базе рентгеновских трубок. В качестве примера можно привести источник [1], в котором применена жидкометаллическая струя в качестве анода, что позволило получить яркость на уровне 10^{10} фотонов/(с·мм^2·мрад^2·0,1%$\Delta\lambda/\lambda$). Авторы этой разработки утверждают, что имеется перспектива увеличить

© Vershynskyi S.A., Buhay O.M., Zaharets M.I., Denysenko V.L., Storizhko V.E., 2012

яркость еще на три порядка величины и приблизиться к яркости источников СИ на поворотных магнитах [1].

Для генерации рентгеновского излучения можно также использовать пучки ионов. Так, в работе [2] протонный пучок с энергией 10-38 МэВ и сечением ~20 мм^2, генерируемый циклотроном, направлялся на стационарный охлаждаемый водой конвертер. В работе [3] протонный пучок фокусировался с помощью квадруплета электростатических квадрупольных линз (ЭКЛ) на конвертере из Ti, создавая эффективный размер фокального пятна на уровне примерно 50×50 микрон. Для создания рентгеновского микропучка диаметром 5 микрон и потоком 5-10 фотонов/с применялась зонная пластинка. Для предотвращения появления фона от ядерных реакций энергия протонного пучка была ограничена значением 1,8 МэВ.

В Институте прикладной физики НАН Украины реализуется программа по созданию компактного источника рентгеновского излучения на базе электростатического ускорителя протонов. Целью данной работы является описание квазимонохроматического источника рентгеновского излучения и первых экспериментальных исследований его характеристик.

РАСЧЕТ И ИЗМЕРЕНИЯ ВЫХОДА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ, ИНДУЦИРОВАННОГО ПРОТОННЫМ ПУЧКОМ

Экспериментальные и теоретические исследования выхода характеристического рентгеновского излучения важны для:

- выбора приемлемых значений углов между протонным пучком, направлением вывода рентгеновского излучения и поверхностью конвертера;
- выбора материала конвертера;
- определения характеристик источника монохроматического рентгеновского излучения и их сравнения с другими источниками;
- выбора оптимальных значений тока пучка и ускоряющего напряжения для источника;
- дальнейшей оптимизации параметров источника.

Процедура вычисления выхода характеристического рентгеновского излучения детально описана в нашей предыдущей работе [4], поэтому мы приведем лишь краткие выкладки.

Число зарегистрированных детектором квантов характеристического рентгеновского излучения из толстой мишени определяется следующим образом [4]:

$$N(E_0) = \frac{\varepsilon\omega I}{4\pi e}\int_{E_0}^{E_F}\frac{\sigma(E)}{S(E)}\exp\left(-\mu\frac{\cos\alpha}{\cos\beta}\int_{E_0}^{E}\frac{dE'}{S(E')}\right)dE \quad \left[\frac{фотонов}{c\cdot ср}\right], \tag{1}$$

где ε – эффективность детектора; ω – флуоресцентный выход; I – ток протонного пучка; e – заряд электрона; E_0 – начальная энергия протона; $\sigma(E)$ – сечение ионизации при энергии протонов E; $S(E)$ – тормозная способность материала мишени, измеряется в 10^{-15} эВ·см^2/атом; μ – линейный коэффициент ослабления; α и β – углы между нормалью к мишени и направлениями движения протона и рентгеновского фотона, соответственно.

При этом учитывается, что существует некоторая энергия протонов E_F, при которой протон все еще способен вызвать ионизацию атома мишени.

Для расчета дифференциального сечения ионизации в нашей работе была использована теория *ECPSSR* [5,6].

Для моделирования зависимости выхода рентгеновского излучения от разных параметров была разработана компьютерная программа. Проверка правильности вычислений базируется на сравнении полученных нами результатов с экспериментальными и теоретическими результатами, приведенными в работе [2]. Наблюдается хорошее согласие наших расчетов с результатами этой работы (рис.1). Необходимо также отметить, что для легких элементов выход рентгеновского излучения в зависимости от энергии больше, растет быстрее и быстрее выходит на “плато”, чем для тяжелых элементов (рис.1). Очевидно, нет необходимости увеличивать энергию протонного пучка после того, как выход рентгеновского излучения уже вышел на “плато”. Таким образом, можно сделать следующий вывод: для создания лабораторного квазимонохроматического источника рентгеновского излучения с высокой интенсивностью энергия протонного пучка должна быть ниже порога (p, n) реакций для выбранного материала конвертера и как можно ближе подходить к значению энергии, при которой выход рентгеновского излучения выходит на “плато”.

Также была отработана методика экспериментального измерения выхода характеристического рентгеновского излучения. Детектирование осуществлялось с помощью рентгеновского детектора Amptek XR-100SDD, который был установлен в вакууме и был экранирован от вторичных и рассеянных частиц с помощью Al фольги толщиной 40 мкм. Использовалась следующая геометрия эксперимента: $\alpha = 0°$, $\beta = 45°$. Перед мишенью был установлен электрод с потенциалом -300 В для того, чтобы вторичная электронная эмиссия не оказывала влияние на измерение заряда с помощью интегратора тока. Использовались толстые мишени из Cu, Ti и Zr. Результаты были скорректированы с учетом эффективности детектора. Как видно из рис.2, результаты расчетов и измерений, проведенных в этой работе и в [7], хорошо согласуются.

Выполненные в работе исследования позволяют сделать следующий вывод: применение протонных пучков с энергией 2 МэВ позволяет получить одинаковый с электронным пучком 30-50 КэВ выход излучения

K-линий (см. таблицу), но при этом на два порядка снизить фон тормозного излучения [8].

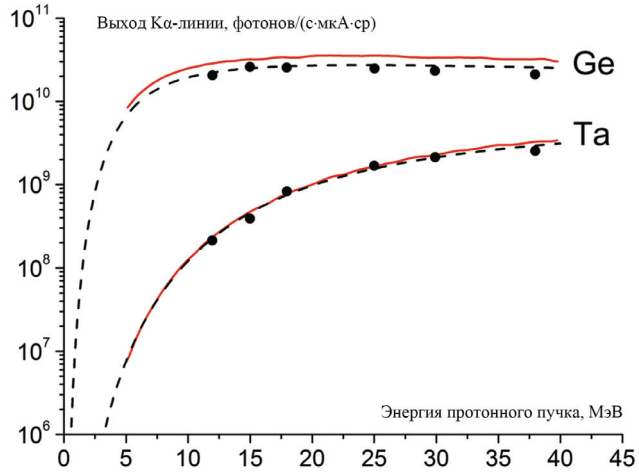


Рис.1. Сравнение результатов расчетов, проведенных в данной работе (пунктирная линия), с экспериментальными (точки) [2] и теоретическими значениями (сплошная линия) [2] выхода Kα-линии рентгеновского излучения для мишеней из Ta и Ge как функции энергии протонного пучка.

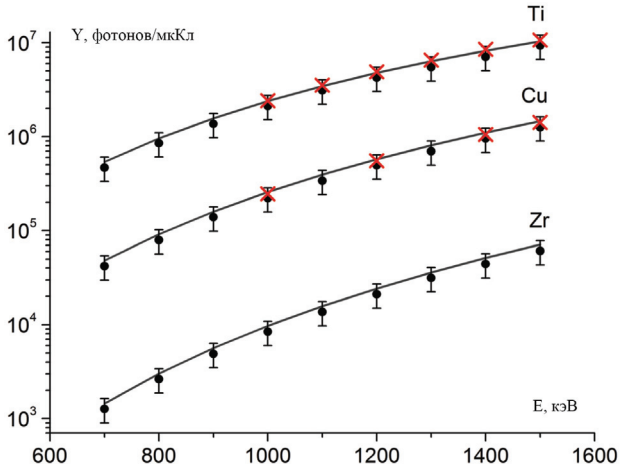


Рис.2. Теоретически рассчитанные (линии) и экспериментально измеренные (точки для этой работы и крестики для [7]) выходы Kα линии рентгеновского излучения для мишеней из Cu, Zr и K-серии для мишени из Ti как функция энергии протонного пучка.

Таблица

Сравнение выходов фотонов от электронного и протонного пучков [4].

Выход, $\frac{\text{фотонов}}{\text{частица}\cdot\text{ср}}$	Протоны		Электроны	
	1 МэВ	2 МэВ	30 кэВ	40 кэВ
Y(Cu)	$0{,}10\cdot10^{-4}$	$1{,}66\cdot10^{-4}$	$1{,}26\cdot10^{-4}$	$2{,}6\cdot10^{-4}$
Y(Ti)	$0{,}85\cdot10^{-4}$	$8{,}10\cdot10^{-4}$	$3{,}70\cdot10^{-4}$	$5{,}55\cdot10^{-4}$

Угловая ориентация мишени

Для определения оптимальной геометрии размещения мишени и окна для вывода рентгеновского излучения в атмосферу была исследована зависимость выхода рентгеновского излучения от углов α и β (рис.3).

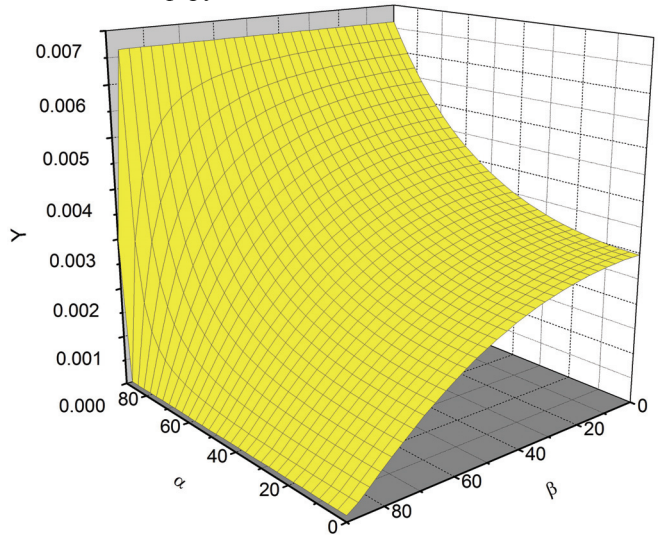


Рис.3. Результаты проведенных в данной работе расчетов выхода рентгеновского излучения Y из толстой Al мишени в зависимости от углов α и β при начальной энергии пучка 1.5 МэВ.
Выход дан в единицах фотонов/(протон·ср), α и β – в градусах.

Из проведенных расчетов видно, что при падении протонного пучка на мишень при больших значениях угла α поглощение рентгеновских лучей меньше, так как путь фотонов в веществе мишени в направлении β меньше в сравнении с нормальным падением протонного пучка на мишень. Поэтому для максимизации потока рентгеновского излучения угол α должен быть лишь немного меньше 90° (угол между пучком протонов и поверхностью мишени мал), а угол β должен быть близок к 0 градусов (по нормали к поверхности мишени). Однако существуют и другие факторы, которые необходимо учесть при построении источника. Так, в режиме микропучка необходимо найти оптимальное соотношение между вышеуказанными углами α и β, потоком рентгеновского излучения из мишени, а также параметрами ионно-оптической и рентгенооптической систем. При этом важными остаются эффективные размеры и форма области генерации рентгеновского излучения.

Энергия и ток пучка

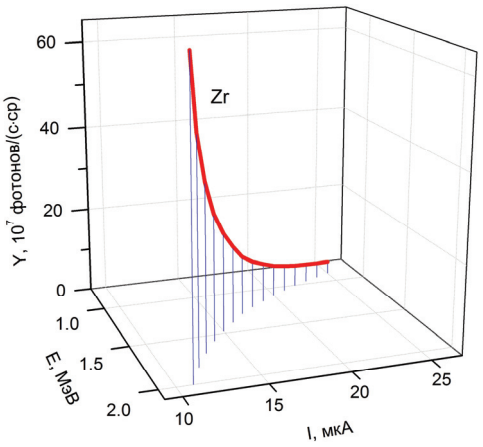


Рис.4. Выход рентгеновских квантов в зависимости от тока и энергии протонного пучка из Zr конвертера при фиксированной мощности.

Почти вся введенная пучком в конвертер мощность $P = IU$ (где I – ток пучка, U – ускоряющее напряжение) идет на нагревание мишени. Этот факт является важным для выбора I и U такими, чтобы выход рентгеновских квантов был максимальным, но не приводил к критическим повреждениям мишени.

Определим зависимость выхода рентгеновских квантов при фиксированной мощности, которая рассеивается на *Zr* конвертере, от тока и ускоряющего напряжения. Результаты расчетов при мощности 22 Вт приведены на рис.4.

Как видно из рис.4, для мишени из Zr при фиксированной мощности в данном диапазоне энергий величина выхода рентгеновских квантов имеет более сильную зависимость от энергии протонного пучка, чем от тока пучка. Причем эта зависимость имеет монотонный характер. Из результатов расчетов видно, что для получения большей интенсивности рентгеновского излучения нужно получить на ускорителе максимально возможное ускоряющее напряжение, при этом ток пучка следует ограничить до значения, которое необходимо вычислить исходя из максимальной мощности, которая может рассеяться на конвертере без его повреждения.

КОНФИГУРАЦИЯ ИСТОЧНИКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Описание ускорителя

В Институте прикладной физики НАН Украины ведутся работы по получению протонных пучков МэВ-ных энергий с микронными размерами [9]. Аналитический ускорительный комплекс (АУК) ИПФ НАНУ [10] позволил создать источник рентгеновского излучения. Источником протонов является малогабаритный электростатический ускоритель горизонтального типа, предназначенный для получения пучков протонов и ионов гелия со следующими характеристиками:

- энергия, *МэВ* 0,3-2,0;
- стабильность и моноэнергетичность энергии, *%* 0,1;
- ток пучка протонов, *мкА* до 50;
- режим работы непрерывный.

Система транспортировки пучка

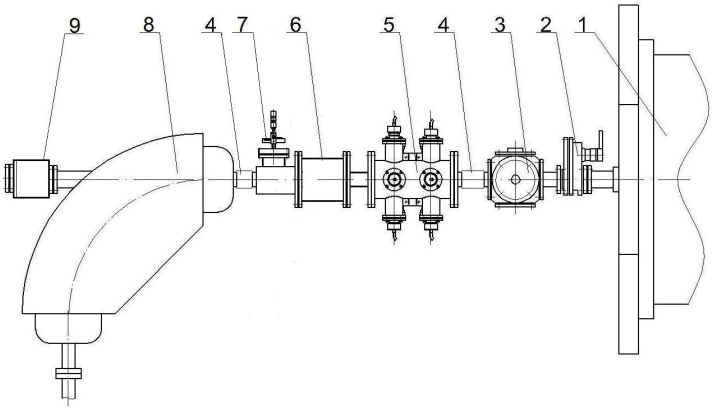


Рис.5. Схема источника рентгеновского излучения.
1 – ускоритель протонов “Сокол”; 2 – вакуумный затвор; 3 – камера мониторинга пучка; 4 – узлы сильфонной развязки; 5 – дублет ЭКЛ; 6 – камера конвертера; 7 – входное щелевое устройство магнитного анализатора; 8 – магнитный анализатор; 9 – система мониторинга пучка.

Ионный пучок из ускорителя (1) попадает в ионопровод (рис.5), где проходит сквозь вакуумный затвор (2) и камеру мониторинга пучка (3), соединенную с вакуумным постом. Пучок фокусируется с помощью дублета электростатических квадрупольных линз (5) и попадает в камеру (6), где в результате взаимодействия с мишенью-конвертером генерируется рентгеновское излучение.

С целью увеличения яркости источника необходимо уменьшить размеры ионного пучка на мишени и при этом сконцентрировать в этой области максимально возможную долю первоначального тока пучка. Для уменьшения размеров ионного пятна (области генерации рентгеновского излучения) в источнике используется дублет ЭКЛ, фокусирующие свойства которого не зависят от отношения заряда к массе ионов. Таким образом, для генерации рентгеновского излучения достигается возможность использования всех сортов ионов в пучке, который создает ускоритель.

Процедура моделирования ионно-оптической системы детально описана в нашей предыдущей работе [11], поэтому мы приведем лишь ее краткое описание и результаты.

Для расчета коэффициентов увеличения и аберраций, которые определяют ионно-оптические свойства системы, применялся метод матрицантов, изложенный в [12] и реализованный в численном коде PROBFORM [13]. Исходные фазовые координаты частиц из плоскости объекта генерировались на основании экспериментально измеренного эмиттанса пучка АУК ИПФ НАН Украины [10].

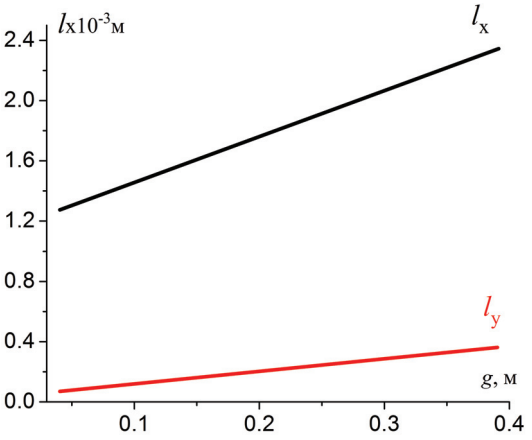


Рис.6. Зависимость размеров ионного пятна на конвертере вдоль взаимно перпендикулярных осей X и Y (l_x, l_y) от рабочего расстояния в случае использования дублета ЭКЛ.

Результаты расчетов показывают, что для уменьшения размеров ионного пятна необходимо, чтобы рабочее расстояние (расстояние от эффективной границы поля последней линзы до конвертера) было как можно меньше (рис.6). При этом нужно принимать во внимание тот факт, что величины напряжений, которые необходимо подать на электроды дублета ЭКЛ, увеличиваются при уменьшении рабочего расстояния.

Из рис.6 видно, что пятно представляет собой сильно вытянутый эллипс. Для получения пятна с одинаковыми размерами вдоль двух взаимно перпендикулярных осей можно использовать коллиматоры. Однако в этом случае большая часть тока ионного пучка будет утеряна. Поэтому более приемлемым может быть использование наклонного падения пучка на поверхность мишени и выведение рентгеновского излучения под малым углом к поверхности конвертера.

Необходимо отметить, что квадруплет ЭКЛ больше подходит в качестве ионно-оптической системы для источника, поскольку осуществляет стигматическую фокусировку ионного пучка вдоль двух взаимно перпендикулярных направлений. Более подробно о результатах моделирования в случае использования квадруплета ЭКЛ можно узнать из нашей предыдущей работы [11].

Выбор рентгенооптической системы для источника

Для источника, в котором рентгеновское излучение генерируется при взаимодействии протонного пучка с конвертером, поток на мишени можно рассчитать следующим образом:

$$I = N\Omega T\,, \tag{2}$$

где Ω – телесный угол захвата оптикой рентгеновского излучения из источника.

Интегральным пропусканием оптики T будем называть отношение потока на мишени I к потоку, который падает на оптику из источника I_0, т.е. $T = I/I_0$.

Исходя из (2), условием получения максимального потока на мишени будет $\Omega \cdot T = \max$. Примем в качестве критерия при выборе рентгенооптической системы для источника получение максимального потока излучения CuKα на мишени при размерах ионного пучка на конвертере ~ 100 мкм и получение изображения источника в масштабе 1:1. Оптика должна фокусировать рентгеновское излучение во всех направлениях. При этом расстояние от области генерации до входной апертуры оптики должно быть больше 2 см.

Рентгеновскую оптику можно разделить на три группы [14]:

- преломляющая оптика;
- дифракционная (кристаллы, зонные пластинки и решетки) и интерференционная (многослойные структуры) оптика;
- отражающая оптика.

Фокусное расстояние (f) преломляющей линзы с параболическим профилем $y^2 = 2Rx$ определяется следующим образом [15]:

$$f = \left(\frac{R}{2}\right) \Big/ (n-1)\,. \tag{3}$$

Так как декремент преломления δ имеет диапазон значений от 10^{-4} до 10^{-6}, действительная часть показателя преломления $n = 1-\delta$ несколько меньше 1. Это означает, что фокусирующая преломляющая рентгеновская линза должна иметь вогнутую форму и что фокусное расстояние линзы является довольно большим (3). Для уменьшения фокусного расстояния входная апертура линзы делается как можно меньше, и используются составные линзы с большим количеством преломляющих поверхностей [16]. Кроме того, необходимо учитывать, что рентгеновское излучение поглощается в материале линзы. Таким образом, эти линзы больше подходят для синхротрона с его узким рентгеновским пучком, нежели для источника рентгеновского излучения с ионным и электронным возбуждением [17].

Оптические элементы, работа которых основана на интерференционном принципе, состоят из слоев материалов с различной диэлектрической проницаемостью. Так как коэффициент отражения рентгеновского излучения от границы раздела слоев представляет собой малую величину, то для увеличения эффективности работы оптики такого типа применяют большое количество слоев, излучение от которых складывается

синфазно. При 2D-фокусировке рентгеновские зеркала имеют $\Omega = 8E\text{-}4$ ср [18], и T ≈ 60%, что дает $\Omega \cdot T \approx 5E\text{-}4$ ср.

Принцип работы зонных пластинок и решеток ничем не отличается от принципа работы оптических элементов видимого диапазона [14]. Если диаметр зонной пластинки *d* значительно меньше фокусного расстояния *f*, то в случае формирования изображения в масштабе 1:1 получим

$$\Omega \approx \pi\left(\frac{d}{2}\right)^2 \Big/ (2f)^2 = \pi\left(\frac{\lambda}{4\Delta r_n}\right)^2 . \quad (4)$$

Для линии Cu Kα и достигнутом $\Delta r_n = 50$ нм можно получить $\Omega \approx 2E\text{-}6$ (4), что при $T_{max} \approx 28$ % дает $\Omega \cdot T \approx 6E\text{-}7$ ср.

Зонные пластинки позволяют создавать микропучки рентгеновского излучения с меньшими размерами, чем в случае применения поликапиллярной оптики.

Полное внешнее отражение рентгеновского излучения от поверхности осуществляется при углах падения, меньших критического угла θ_c:

$$\theta_c = \sqrt{2\delta} . \quad (5)$$

Угол θ_c очень мал, но использование изогнутого капилляра, в котором рентгеновские лучи испытывают многократное отражение от его внутренней поверхности, позволяет повернуть рентгеновские лучи на большой угол. Поликапиллярная оптика представляет собой совокупность большого количества полых изогнутых стеклянных трубок с малым внутренним диаметром, которые используются для эффективного захвата рентгеновских лучей из области заданных размеров. Ранние работы по созданию поликапиллярной оптики проводились Кумаховым М.А. [19], этот тип оптики также называют оптикой Кумахова. Современное состояние работ в поликапиллярной оптике описано в [20]. Для этого типа оптики Ω·T может достигать 2E-3 ср. Все вышесказанное определило выбор поликапиллярной оптики для квазимонохроматического источника рентгеновского излучения на базе электростатического ускорителя.

Камера конвертера

Источник рентгеновского излучения (модель источника представлена на рис.7, внешний вид приведен на рис.8) состоит из камеры (6), соединенной с камерой дублета ЭКЛ и встроенной непосредственно в систему транспортировки пучка. В камеру помещены мишень-конвертер (1) с водяным охлаждением и гильза (7) с окном вывода рентгеновского излучения (2). Наблюдение за положением мишени-конвертера осуществляется через смотровое окно.

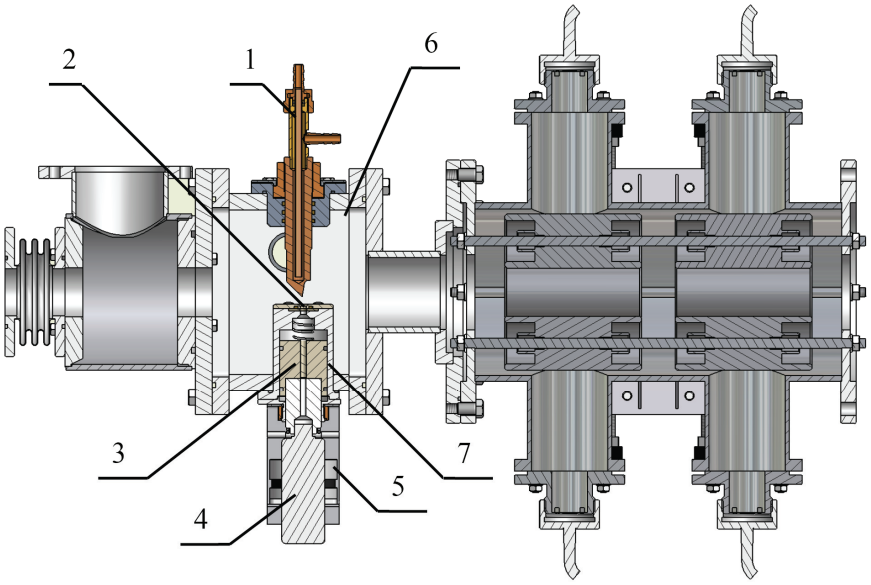


Рис.7. Модель камеры конвертера с дублетом ЭКЛ в разрезе.
1 - конвертер; 2 - окно для вывода рентгеновского излучения в атмосферу; 3 - держатель поликапиллярной линзы; 4 – детектор рентгеновского излучения; 5 – система позиционирования держателя поликапиллярной линзы и детектора рентгеновского излучения; 6 – камера конвертера; 7 – гильза.

Важной особенностью камеры является то, что мишень-конвертер можно без нарушения вакуума перемещать в плоскости, перпендикулярной оси пучка, а также поворачивать вокруг своей оси. Это позволяет подобрать оптимальное размещение конвертера, а также отвести конвертер от ионного пучка без нарушения рабочего вакуума для осуществления транспортировки пучка к другим аналитическим каналам.

В качестве материала мишени использовалась медь. Этот материал имеет подходящие физические свойства и довольно часто используется в качестве мишеней в рентгеновских трубках. Необходимо отметить,

что порог реакции $Cu^{65}(p, n)Zn^{66}$ составляет примерно 2,1 МэВ, а поэтому для предотвращения увеличения уровня фона энергию протонного пучка нужно выбрать ниже этого значения. В случае необходимости мишень легко может быть заменена на мишень из другого материала. Мишень-конвертер имеет две рабочие поверхности, которые можно устанавливать под пучок путем поворота конвертера на 180 градусов. В этих рабочих поверхностях реализовано две геометрии. Первая (с углами $\alpha = 7°$ и $\beta = 83°$) была выбрана исходя из проведенного выше анализа ионно-оптической системы. Другая геометрия – с классическими углами $\alpha = \beta = 45°$.

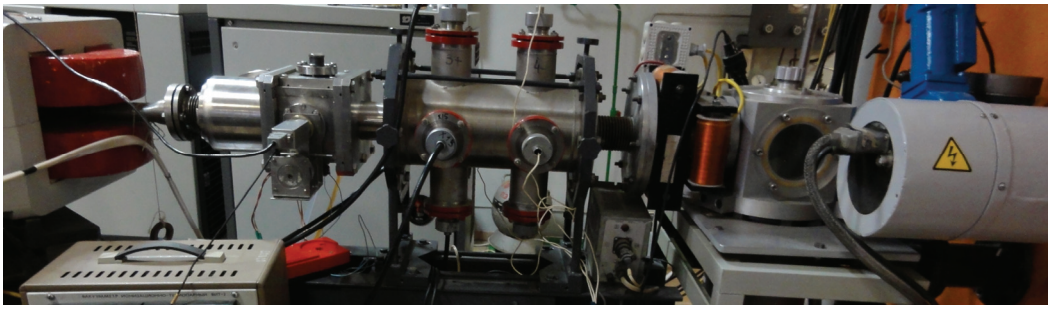


Рис.8. Внешний вид источника квазимонохроматического рентгеновского излучения на основе электростатического ускорителя протонов.

Генерируемое в мишени рентгеновское излучение выводится в атмосферу через окно вывода из алюминиевой фольги толщиной 150 мкм. В гильзе, непосредственно за окном вывода, устанавливается держатель рентгеновской линзы и система ее позиционирования. Использование гильзы дает возможность установить рентгеновскую линзу максимально близко к мишени-конвертеру, позволяя использовать короткофокусную оптику. При исследовании характеристик источника квазимонохроматического рентгеновского излучения к гильзе присоединяется детектор, который также позиционируется с помощью вышеупомянутой системы. Удаленное управление системой позиционирования и управление фокусировкой ионного пучка конвертерного канала осуществляется с помощью персонального компьютера с использованием разработанного нами универсального контроллера. Контроллер позволяет независимо изменять параметры двух высоковольтных блоков питания типа ИВН-100Б, которые используются для запитывания дублета ЭКЛ.

Результаты измерений спектров рентгеновского излучения из источника

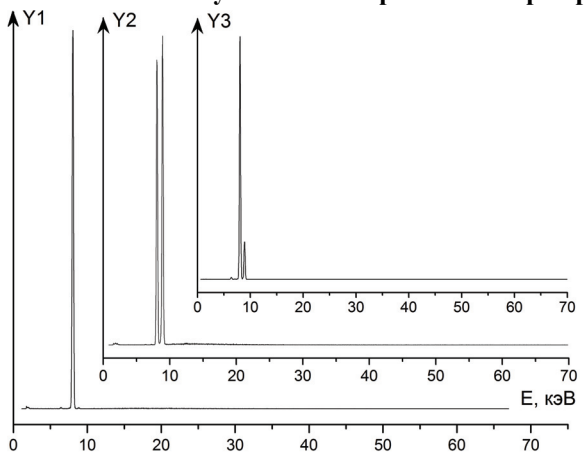


Рис.9. Спектры рентгеновского излучения из медного конвертера. Y1 (с применением Ni фильтра) и Y2 (без Ni фильтра) – измеренные на источнике рентгеновского излучения; Y3 – измеренный на канале резерфордовского обратного рассеяния АУК ИПФ НАН Украины.

Спектр рентгеновского излучения из источника был получен с помощью детектора Amptek XR-100SDD. Измерения проводились при энергии протонов 1 МэВ и токе пучка 30 мкА без применения рентгеновской оптики. Детектор находился в воздухе. Как и ожидалось, эмиссия фотонов была интенсивной и для уменьшения загрузки детектор был экранирован алюминиевой фольгой. Для того, чтобы отфильтровать линию CuKβ, дополнительно был использован Ni фильтр (см. Y1 на рис.9).

Расчет показывает, что соотношение линий CuKβ/CuKα в вакууме 1:9 (см. спектр Y3) изменяется на 1,1:1 из-за различий линейного коэффициента ослабления CuKα (8,05 кэВ) и CuKβ (8,91 кэВ) для Al фольги-поглотителя с толщиной 0.6 мм и воздуха, что экспериментально наблюдается (см. спектр Y2). Из анализа спектра Y1 следует, что степень монохроматичности источника не ниже 93%. Авторы статьи под степенью монохроматичности подразумевают отношение числа фотонов, приходящихся на K-серию, к общему числу зарегистрированных фотонов. Ширина линии обусловлена главным образом величиной энергетической разрешающей способности детектора и составляет 0,2 кэВ. Необходимо отметить, что на самом деле ширина линии намного меньше, и вероятно близка к природной ширине Kα линии меди, которая составляет 2,11 эВ для CuKα1 и 2,17 эВ для CuKα2 [21].

ВЫВОДЫ

В Институте прикладной физики НАН Украины на базе электростатического ускорителя на 2 МэВ разработан и создан источник квазимонохроматического рентгеновского излучения. Фокусировка ионного пучка осуществляется с помощью дублета электростатических квадрупольных линз. Для фокусировки

рентгеновского излучения используется поликапиллярная оптика. Рассчитанный выход рентгеновского излучения К-серии для мишеней из Ti, Cu и Zr для энергий протонного пучка 0,7-1,5 МэВ хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными авторами в этой работе. Источник квазимонохроматического рентгеновского излучения планируется использовать в исследованиях влияния радиационного облучения на биологические образцы, а также для реализации метода рентгено-флуоресцентного анализа с повышенной чувствительностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Otendal M., Tuohimaa T., Vogt U., Hertz H.M. A 9 keV electron-impact liquid-gallium-jet x-ray source. // Review of Scientific Instruments. – 2008. – Vol.79. – P.016102.
2. Avaldi L., Bassi S., Castiglioni M., Milazzo M., Silari M., Weckerinann B. Experimental results from high-intensity sources of monochromatic X-rays generated by 10-38 MeV protons // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 1990. – Vol.299. – P.240-245.
3. Harken A.D., Randers-Pehrson G., Johnson G.W., Brenner D.J. The Columbia University proton-induced soft X-ray microbeam // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2011. – Vol.269. – P.1992-1996.
4. Shabel'nikov L.G., Denisenko V.L., Il'yashenko M.V., Storizhko V.E., Drozdenko A.A., Vershinskiy S.A. Proekt istochnika kvazimonokhromaticheskogo rentgenovskogo izlucheniya na baze uskoritelya protonov, snabzhennogo rentgenoopticheskoy sistemoy // Metallofizika i noveyshie tekhnologii. – 2010. – T.32. – S.1-12.
5. Cohen D.D. and Harrigan M. K- and L-shell ionization cross sections for protons and helium ions calculated in the ECPSSR theory // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1985. – Vol.33. – P.255-343.
6. Pia M.G., Weidenspointner G., Augelli M., Quintieri L., Saracco P., Sudhakar M., Zoglauer A. PIXE Simulation With Geant4 // IEEE transactions on nuclear science. – 2009. –Vol.56. – P.3614-3649.
7. Khan Md.R., Crumpton D., Francois P.E. Proton-induced X-ray production in titanium, nickel, copper, molybdenum and silver // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. – 1976. – Vol.9. – P.455-460.
8. Folkmann F., Gaarde C., Huuns T., Kemp K., Proton induced X-ray emission as a tool for trace element analysis // Nuclear Instruments and Methods. – 1974. – Vol.116. – P.487–499.
9. Storizhko V.E., Ponomarev A.G., Rebrov V.A., Chemeris A.I., Drozdenko A.A., Dudnik A.B., Miroshnichenko V.I., Sayko N.A., Pavlenko P.A., Peleshuk L.P. The Sumy scanning nuclear microprobe: Design features and first tests // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2007. – Vol.260. – P.49-54.
10. Storizhko V.E., Drozdenko A.A., Miroshnichenko V.I., Ponomarev A.G. Mikroanaliticheskiy kompleks na baze kompaktnogo elektrostaticheskogo uskoritelya IPF NAN Ukrainy // Proc. Int. Conf. Current Problems Nucl. Phys. At. Energy NPAE'2006, 29.05-3.06.2006, Kyiv, Ukraine - Kyiv, 2007, p. 745-753.
11. Vershinskiy S.A., Ponomarev A.G., Storizhko V.E., Denisenko V.L., Il'yashenko M.V. Optimizatsiya ionno-opticheskoy sistemy istochnika kvazimonokhromaticheskogo rentgenovskogo izlucheniya na baze elektrostaticheskogo uskoritelya // Yaderna fizika ta energetika. – 2010. – T.11. – S.195-198.
12. Dymnikov A.D., Osetinskiy G.M. Sistema formirovaniya protonnykh puchkov mikronnykh razmerov // Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra. – 1989. – T.20. – S.694-73.
13. Ponomarev A.G., Melnik K.I, Miroshnichenko V.I. Parametric multiplets of magnetic quadrupole lenses: application prospects for probe-forming systems of nuclear microprobe // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2005. – Vol.231. – P.86-93.
14. Dabagov S.B. Kanalirovanie neytral'nykh chastits v mikro- i nanokapillyarakh // Uspekhi fizicheskikh nauk. – 2003. – T.173. – S. 1083-1106.
15. Lengeler B., Schroer C., Tummler J., Benner B., Richwin M., Snigirev A., Snigireva I., Drakopoulos M. Imaging by parabolic refractive lenses in the hard X-ray range // Journal of Synchrotron Radiation. – 1999. – Vol.6. – P.1153-1167.
16. Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Souvorov A., Lengeler B. Focusing high-energy X-rays by compound refractive lenses // Applied optics. – 1998. – Vol.37. – P.653-662.
17. Bass M. Handbook of Optics: Volume III Classical Optics, Vision Optics, X-Ray Optics 2nd Ed., McGraw-Hill Professional Publishing. – 2000.
18. Tsuji K. et al. X-Ray Spectrometry: Recent Technological Advances. - John Wiley & Sons, 2004. - 616 p.
19. Kumakhov M.A., Komarov F.F. Multiple reflection from surface x-ray optics // Physics Reports (Review Section of Physics Letters). – 1990. – Vol.191. – P.289-350.
20. MacDonald C. Focusing Polycapillary Optics and Their Applications // X-Ray Optics and Instrumentation. – 2010. – Vol.2010. – 17p.
21. Grieken R.E., Markowicz A.A. Handbook of X-Ray Spectrometry, Second Edition Revised and Expanded, Marcel Dekker Inc. - 2002, New York, Basel.

УДК 539.17: 621. 039. 73

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В РАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ И ВЫХОДНЫХ ФОЛЬГАХ ЭЛЕКТРОННЫХ УСКОРИТЕЛЕЙ

С.П. Гоков, В.И. Касилов, Л.А. Махненко, А.А. Хомич
ИФВЭЯФ ННЦ ХФТИ
ул. Академическая 1, г. Харьков, 61108, Украина
gokovsp@kipt.kharkov.ua
Received 13 April 2012, accepted 15 May 2012

На основе известных принципов термодинамики построена математическая модель теплопередачи для тонких металлических (титановых) фольг, используемых в ускорительной технике, при прохождении через них электронных пучков с гауссовым распределением плотности тока по сечению. Приведены результаты расчета, с помощью математического пакета Mathcad 15, температурных зависимостей для фольг разных толщин и условий охлаждения.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: пучок электронов, титановая фольга, ионизационные потери, уравнение теплового баланса

STUDY OF THERMAL PROCESSES IN DIVIDING AND OUTPUT FOILS OF THE ELECTRONIC ACCELERATORS

S.P. Gokov, V.I. Kasilov, L.A. Makhnenko, A.A. Khomich
Institute of Higt Energy and Nuclear Physics, National Science Centre of Physics and Technology
Akademicheskaya str.1, Kharkov, Ukraine, 61108
The mathematical model, based on the principles of thermodynamics, was obtained for a thin metal (titanium) foils used in accelerator technology, on passing through these foils of electron beams with a Gaussian distribution of the current density in the section. The results of calculation using the mathematical package Mathcad 15 the temperature dependences for the foils of various thicknesses and cooling terms are presented.
KEYWORDS: electron beam, titanium foil, ionization losses, the heat balance equation.

ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ В РОЗДІЛОВИХ ТА ВИХІДНИХ ФОЛЬГАХ ЕЛЕКТРОННИХ ПРИСКОРЮВАЧІВ

С.П. Гоков, В.Й. Касілов, Л.О. Махненко, О.О. Хоміч
ІФВЕЯФ ННЦ ХФТІ
вул. Академічна 1, м. Харків, 61108, Україна
На основі відомих принципів термодинаміки побудована математична модель теплопередачі для тонких металевих (титанових) фольг, що використовуються в прискорювальної техніці, при проходженні через них електронних пучків з гаусовим розподілом щільності струму по перетину. Наведено результати розрахунку, за допомогою математичного пакета Mathcad 15, температурних залежностей для фольг різних товщин і умов охолодження.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: пучок електронів, титанова фольга, іонізаційні втрати, рівняння теплового балансу.

При создании или модернизации электрофизических комплексов, в которых используются линейные ускорители электронов, одной из важнейших задач является обеспечение вывода электронного пучка в атмосферу, например, на радиационных стендах. Обычно это осуществляется через металлическую фольгу выходного окна ускорителя.

В ряде случаев, может возникнуть также необходимость разделения вакуумных объемов на пути прохождения пучка с помощью фольг. Так, при модернизации комплекса ЛУЭ-300 ННЦ ХФТИ (линейный ускоритель электронов с энергией пучка на выходе до 300 МэВ) с целью обеспечения максимально чистых вакуумных условий при компоновке старого и нового технологического оборудования была рассмотрена возможность применения тонких разделительных титановых фольг. При этом рассматривались варианты, когда фольга может устанавливаться как непосредственно в ускоряющем тракте, так и на выходе ускорителя в трактах соединения с установками, принимающими пучок: накопителем электронов Н-100М и магнитным спектрометром СП-95.

Было показано [1], что наилучшие условия транспортировки пучка, с точки зрения внесения минимальных искажений в оптические характеристики, обеспечиваются при расположении фольги в сечениях, в которых пучок оказывается максимально сфокусированным, так как в этом случае угловое рассеивание электронов на фольге вносит менее заметный вклад в суммарную средне - квадратичную расходимость пучка (среднеквадратичная расходимость пучка до прохождения фольги и дополнительно вносимая фольгой). Вместе с тем, с увеличением плотности потока электронов на фольге, могут возникнуть проблемы ее охлаждения при условии наличия вакуума с обеих сторон фольги при максимальных токах ускорителя.

В предлагаемой работе выполнен теоретический анализ теплового баланса в тонкой фольге, расположенной в вакууме, при наличии только теплопередачи на стенки электронопровода и теплового излучения, а также на выходе ускорителя с учетом свободной конвекции и обдува воздушным потоком с внешней стороны фольги.

Цель работы - построить математическую модель теплопередачи для тонких металлических (титановых)

© Gokov S.P., Kasilov V.I., Makhnenko L.A., Khomich A.A., 2012

фольг, и с ее помощью рассчитать температурные зависимости для фольг разных толщин и условий охлаждения.

УРАВНЕНИЕ ТЕПЛОВОГО БАЛАНСА

Представим круглую фольгу в виде цилиндра с малым отношением высоты h к радиусу $R_ф$, ($h/R_ф \le 10^{-3}$). Будем полагать, что аксиально-симметричный пучок электронов с гауссовым распределением плотности тока по сечению пролетает по центру фольги и осуществляет ее нагрев за счет энергетических потерь в материале. Поскольку абсолютная толщина фольги мала (несколько десятков микрон), можно считать, что изменение температуры по толщине незначительное и им можно пренебречь. Так как задача имеет осевую симметрию, то ее удобно представлять в цилиндрических координатах.

По аналогии с описанием построения математической модели теплопроводности в симметричных объектах цилиндрической формы, изложенным в работе [2], предположим, что вектор плотности потока теплоты j, зависящий как от радиуса r, так и от времени t, направлен вдоль радиуса от центра к периферии фольги. Опишем, как показано на рис.1, вокруг оси симметрии два концентрических цилиндра с радиусами r и $r+dr$, вырезающих в фольге объемное кольцо высотой h. Количество теплоты, поступающее за время dt в этот объем равно $j(r)\cdot 2\pi\cdot r\cdot h\cdot dt$. Количество теплоты, вытекающее за пределы кольца за то же время $j(r+dr)\cdot 2\pi\cdot(r+dr)\cdot h\cdot dt$. Эти же выражения удобнее представлять несколько в ином виде, подчеркивая, что мы имеем дело с одной и той же функцией, но с разными ее аргументами, а именно $2\pi\cdot h\cdot(j\cdot r)_r\cdot dt$ и $2\pi\cdot h\cdot(j\cdot r)_{r+dr}\cdot dt$.

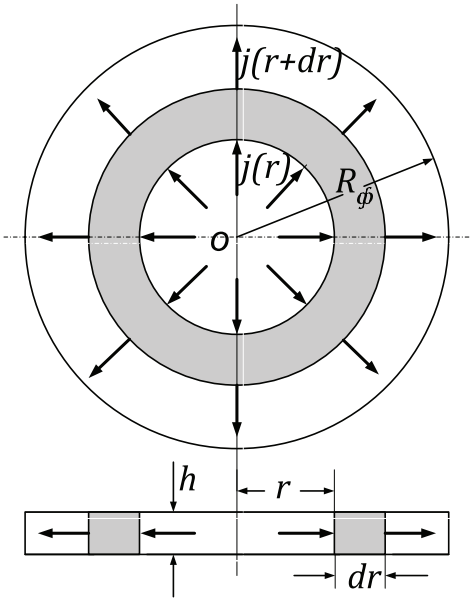


Рис.1. Эскиз фольги для пояснений к написанию уравнения теплового баланса

При этом разность между ними

$$2\pi\cdot h\cdot\left[(j\cdot r)_r-(j\cdot r)_{r+dr}\right]\cdot dt=-2\pi\cdot h\cdot\frac{\partial j(r)}{\partial r}\cdot dr\cdot dt, \qquad (1)$$

будет представлять собой количество теплоты, поступающее за время dt в объем кольца из окружающего пространства.

В нашем случае, при наличии внутреннего источника теплоты, обусловленного в основном ионизационными потерями электронов в фольге (радиационными потерями и ядерными реакциями в силу малой толщины можно пренебречь) [3], зависимость объемной мощности тепловыделения от радиуса фольги для гауссова пучка можно представить выражением:

$$q(r)=\frac{b(h)\cdot g\cdot I_0}{2\pi\cdot r_0^2\cdot h}\cdot\exp\left(\frac{-r^2}{2\cdot r_0^2}\right), \qquad (2)$$

где $b(h)$ – функция, представляющая зависимость поглощенной энергии электрона от толщины фольги (рис.2), g– численный коэффициент для перевода энергетических потерь электронов в материале в тепловую энергию,

I_0 – полный средний ток пучка (для 100% частиц) и r_0 – среднеквадратичный радиус пучка*).

Таким образом, при написании уравнения теплового баланса к выражению (1) следует добавить $2\pi \cdot r \cdot dr \cdot h \cdot q(r) \cdot dt$.

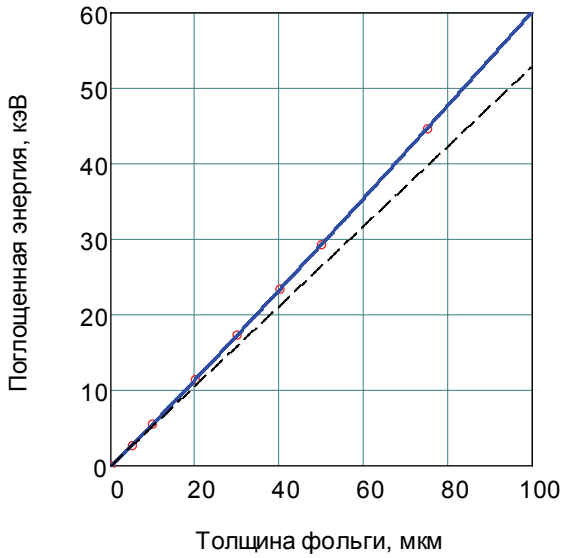


Рис. 2. Зависимость поглощенной в материале фольги энергии электрона с начальной энергией 60 МэВ от ее толщины. Штриховой прямой показана касательная в точке $h = 0$.

Наличие утечки энергии через внешнюю поверхность кольца за счет теплового излучения будем моделировать, исходя из закона Стефана-Больцмана $A = -\varepsilon \cdot \sigma \cdot (T^4 - T_0^4)$ [5], где A- удельная мощность излучения, $\varepsilon = 0 \div 1$ – безразмерный коэффициент степени "черноты" объекта, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$, $Вт/м^2 \cdot K^4$ – постоянная Стефана-Больцмана.

Для учета отвода тепловой энергии, обусловленного процессом конвекции на выходной фольге, воспользуемся законом Ньютона — Рихмана $B = -\alpha \cdot (T - T_0)$, где B-плотность теплового потока. Мы будем использовать эмпирическое соотношение для $\alpha = 5.6 + 4 \cdot v$, полученное на основе экспериментальных данных для воздуха и гладкой поверхности ($[\alpha] = Вт/м^2 \cdot K$; $[v] =$ *м/с* – скорость потока воздуха, обдувающего поверхность) [5].

В итоге, количество выделенной и перераспределенной тепловой энергии, за время dt в объеме элемента фольги (кольце) можно выразить суммой:

$$-2\pi \cdot h \cdot \frac{\partial (j \cdot r)}{\partial r} \cdot dr \cdot dt + 2\pi \cdot r \cdot dr \cdot h \cdot q(r) \cdot dt - 2 \cdot A \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \cdot dt - B \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \cdot dt \,. \qquad (3)$$

С другой стороны, изменение тепловой энергии в кольце можно представить через изменение его температуры, как $\rho \cdot 2\pi \cdot h \cdot r \cdot dr \cdot c \cdot dT$, где ρ – плотность материала фольги и c – удельная теплоемкость. Таким образом, приравнивая эти два выражения и разделив при этом обе части на общий множитель $2\pi \cdot h \cdot r \cdot dr \cdot dt$, представим уравнение теплового баланса для любой точки фольги в следующем виде:

$$-\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial (j \cdot r)}{\partial r} + q(r) - \frac{2\varepsilon \cdot \sigma}{h} \cdot (T^4 - T_0^4) - \frac{\alpha}{h} \cdot (T - T_0) = \rho \cdot c \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \,. \qquad (4)$$

И, наконец, подставив в (4) выражение теплового потока, которое по определению [2] есть $j = -k \cdot \frac{\partial T}{\partial r}$ (где k – удельная теплопроводность), выполнив дифференцирование и поделив все на $\rho \cdot c$, обозначив $\frac{k}{\rho \cdot c} = \chi$ (коэффициент температуропроводности материала), представим уравнение теплового баланса в

*) Ионизационные потери в тонком поглотителе определялись по поглощенной дозе, рассчитанной методом Монте-Карло с помощью пакета программ Penelope 2001 [4].

окончательном виде:

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\chi\cdot\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{\chi}{r}\cdot\frac{\partial T}{\partial r}-\frac{2\cdot\varepsilon\cdot\sigma}{\rho\cdot c\cdot h}\cdot(T^4-T_0^4)-\frac{\alpha}{\rho\cdot c\cdot h}\cdot(T-T_0)+\frac{b(h)\cdot g\cdot I_0}{\rho\cdot c\cdot 2\pi\cdot r_0^2\cdot h}\cdot\exp\left(\frac{-r^2}{2r_0^2}\right), \qquad (5)$$

где T_0 –температура окружающей среды и начальная температура фольги, $T=T(r,t)$.

Строгое аналитическое решение такого уравнения представляет собой достаточно сложную математическую задачу и может иметь самостоятельный интерес. Мы же, в нашем случае, использовали численные методы решения, в частности, наиболее простой и наглядный способ с помощью встроенной функции Mathcad 15 Given/Pdesolve, в основе которой заложен метод приближения Рунге-Кутта 4-го порядка.

Для построения зависимости температуры от времени и от радиуса фольги достаточно воспользоваться двумя условиями, а именно, условием $T(r,0)=T_0$, которое задает начальную температуру на любом радиусе фольги и $T(R_ô,t)=T_0$, определяющим температуру на границе фольги в любой момент времени. При этом, как и следовало ожидать, из физических соображений, при r=0 зависимость температуры от времени и от радиуса фольги будет иметь максимум, в чем можно убедиться, дополнительно используя встроенную функцию Maximize. Порядок проведения расчетов показан в приведенном ниже листинге.

Расчетный листинг Mathcad

Исходные данные:

$\rho := 4.54$ *г/см3* $\quad \varepsilon := 0.14$ $\quad \sigma := 5.6704\cdot10^{-8}$ *Вт/м2.К4* $\quad R_ф := 1.5$ *см*

$c := 0.54$ *Дж/г.К* $\quad \alpha := 5.6$ *Вт/м2.К* $\quad r_0 := 0.25$ *см*

$k := 0.1885$ *Вт/см.К* $\quad h := 20$ *мкм* $\quad b(h) := 11.397$ $\quad g := 1.60207\cdot10^{-16}\cdot6.25\cdot10^{12}$

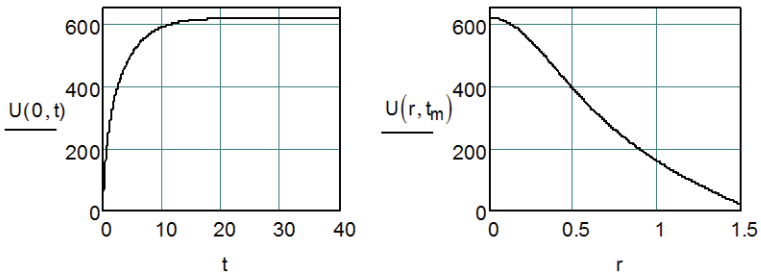
$T_0 := 20 \quad t_m := 40 \quad \chi := \frac{k}{\rho\cdot c}$ $\quad k_1 := \frac{2\varepsilon\cdot\sigma}{h\cdot\rho\cdot c}$ $\quad k_2 := \frac{\alpha}{h\cdot\rho\cdot c}$ $\quad k_2 := 0$ $\quad J := 80$ *мкА*

Given

$$T_t(r,t)=\chi\ T_{rr}(r,t)+\frac{\chi}{r+10^{-6}}\ T_r(r,t)-k_1\left(T(r,t)^4-T_0{}^4\right)-k_2\left(T(r,t)-T_0\right)+\frac{b(h)\cdot g\cdot J}{2\pi\ r_0{}^2\cdot h\cdot\rho\cdot c\cdot10^{-4}}\exp\left(\frac{-r^2}{2r_0{}^2}\right)$$

$T(r,0)=T_0 \qquad T(R_ф,t)=T_0$ граничные условия

$U := \text{Pdesolve}\left[T, r, \begin{pmatrix}0\\R_ф\end{pmatrix}, t, \begin{pmatrix}0\\t_m\end{pmatrix}, 800, 100\right]$ решение уравнения $\quad U(0,t_m)=618.864294$



Ниже приводятся результаты анализа теплового баланса в фольге, установленной в вакуумном канале или на его выходе, при ее различных толщинах и параметрах падающего пучка электронов. Мы предполагаем, что энергия пучка составляла 60 МэВ для фольги, установленной внутри ускорительного тракта (канал вывода пучка с энергией до 160 МэВ ускорителя ЛУЭ-300)и 16 МэВ – для выходного окна ускорителя ЛУЭ-30 (канал вывода пучка с энергией до 30 МэВ ускорителя ЛУЭ-300). Все характеристики материала фольги (плотность, теплоемкость, теплопроводность) приведены для T=20^{0}C.

На рис.3 показана зависимость температуры в центре фольги толщиной 10 мкм и радиусом 1,5 см, находящейся в вакууме, от среднего тока пучка при двух значениях среднеквадратичного радиуса – 0,25 и 0,05 см, которые соответствуют двум возможным режимам работы ускорителя – без дополнительной фокусировки и с фокусировкой. Штриховыми кривыми на этом рисунке показаны те же зависимости без учета теплового излучения, которое, как видно, начинает заметно проявляться после 600 ^{0}C.

На рис.4 показана зависимость температуры от радиуса для той же фольги (h=10 мкм, $R_ф$=1,5 см) при тех же значениях радиуса пучка (r_0=0,25 и r_0=0,05 см) при достаточно большом токе – I_0=80 мкА.

Как следует из обоих рисунков, наличие теплопроводности материала фольги (даже такого плохо теплопроводящего, как титан), ограничивает возможность существенного увеличения температуры с уменьшением радиуса пучка. По крайней мере, полученные данные весьма далеки от обратно пропорциональной зависимости ($1/r_0^2$), связывающей плотность тока и, соответственно, плотность выделяемой тепловой энергии с радиусом.

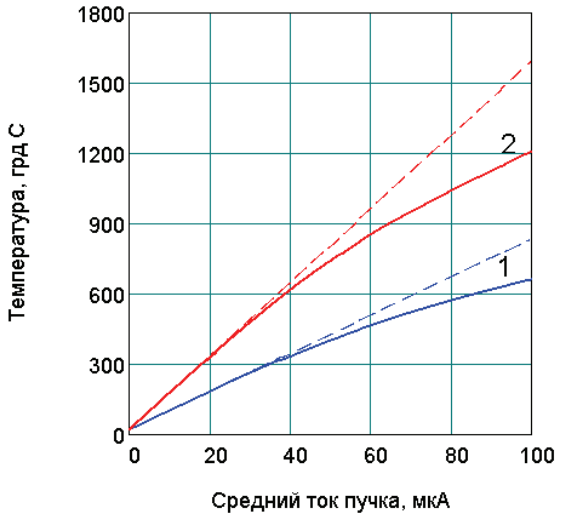


Рис.3. Зависимость температуры в центре фольги (h=10 мкм, $R_ф$=1,5 см) от среднего тока пучка при 2-х значениях среднеквадратичного радиуса: 1 – r_0=0,25 см, 2 – r_0=0,05 см. Штриховые кривые показывают ту же зависимость без учета излучения.

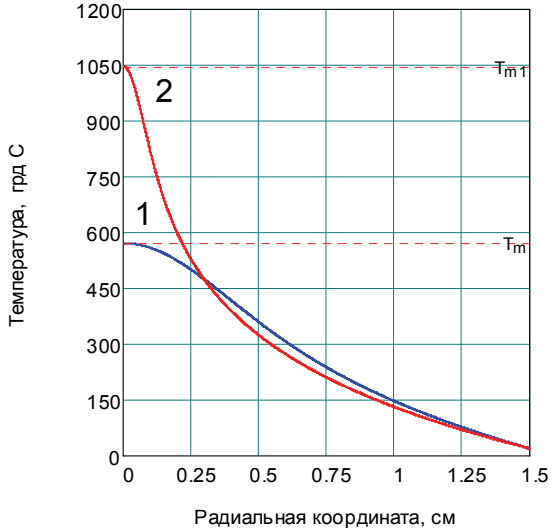


Рис.4. Зависимость температуры от радиальной координаты на фольге с h=10 мкм, $R_ф$=1,5 см и токе I_0=80 мкА при среднеквадратичном радиусе пучка:1– r_0=0,25 см, 2 – r_0=0,05 см и T_0=20^{0}C.

На рис. 5 показана зависимость температуры в центре фольги при токе I_0=20 мкА от среднеквадратичного радиуса пучка. Из рис.5 видно, что, существенным образом, эта зависимость начинает проявляться лишь при значениях r_0 менее 0,05 см.

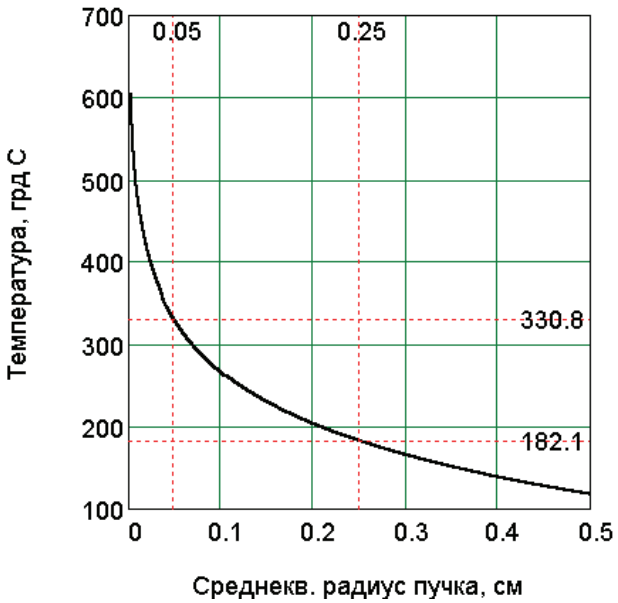


Рис.5. Зависимость температуры в центре фольги (h=10 мкм, $R_ф$=1,5 см) от среднеквадратичного радиуса пучка при токе 20мкА и T_0=20^{0}C.

На рис.6 показана зависимость максимальной температуры фольги с $R_ф$=1.5 см от ее толщины при токе пучка 20 и 100 мкА для трех значений среднеквадратичного радиуса: r_0= 0,5 см, r_0= 0,25 см и r_0= 0,05 см. Как следует из рисунка, при токе 20 мкА эта зависимость довольно слабая (не превышает 8%) и определяется незначительным отклонением от линейности зависимости поглощенной энергии от толщины фольги (рис.2). При этом пары кривых 1, 2, 3 (с учетом теплового излучения и без) для меньшего тока практически совпадают.

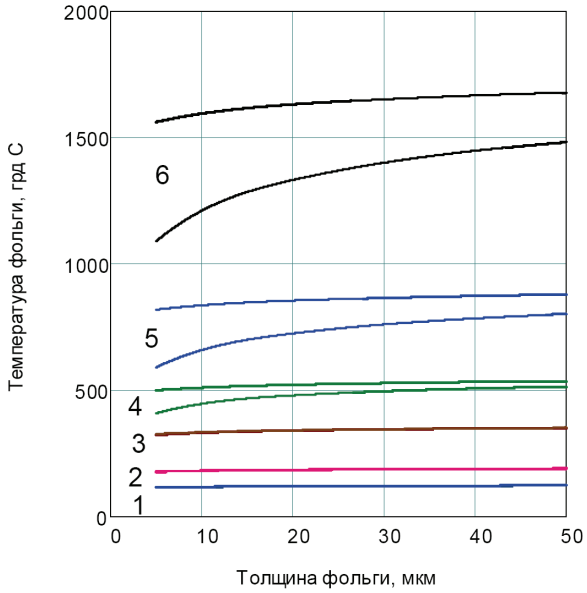


Рис.6. Зависимость температуры в центре фольги $R_б$ = 1,5 см при токе пучка I_0 = 20 мкА (кривые 1, 2, 3) и I_0 = 100 мкА (кривые 4, 5, 6) от толщины фольги для разных значений среднеквадратичного радиуса пучка: r_0 = 0,5 см (кривые 1, 4), r_0 = 0,25 см (кривые 2, 5) и r_0 = 0,05 см (кривые 3, 6). Верхние кривые под каждым номером соответствуют моделированию без учета теплоизлучения, а нижние соответственно с его учетом. Пары кривых 1, 2, 3 для меньшего тока практически совпадают.

С увеличением тока до100 мкА и, следовательно, температуры (примерно до 400 ^{0}C и выше) начинает проявляться тепловое излучение, что приводит к снижению температуры фольги в начале кривой. С увеличением же толщины фольги основной вклад в охлаждение будет вноситься процессом теплопроводности.

Далее мы остановимся на демонстрации результатов исследования тепловых процессов в фольге выходного окна ЛУЭ-30 ($R_ф$=4,0 см, h=50 мкм, E=16 МэВ).

На рис.7 приведена зависимость максимальной температуры фольги выходного окна ЛУЭ-30 при хорошо сфокусированном пучке с r_0=0,25 см от среднего тока. Кривая 1 отражает расчетные данные, в которых учитывается только теплопроводность фольги, кривой 2 представлены результаты расчета с учетом теплоизлучения и кривой 3 – с учетом также свободной (т.е. без принудительного охлаждения воздухом) конвекции.

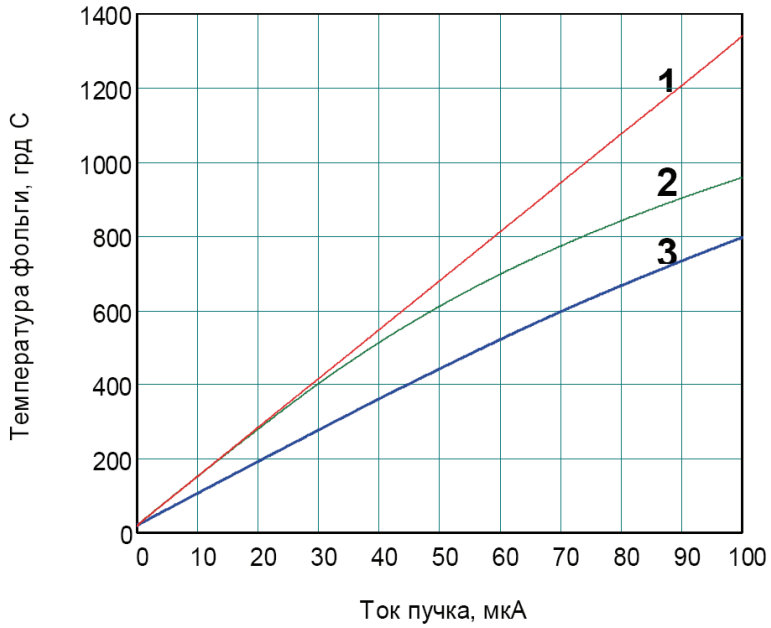


Рис.7. Зависимость максимальной температуры фольги $R_ф$=4,0 см, h=50 мкм от тока пучка с r_0=0,25 см. Расчет выполнен с учетом: 1 – только теплопроводности;2 – теплопроводности и теплоизлучения; 3 – теплопроводности, теплоизлучения и свободной конвекции.

На рис.8 приведены аналогичные зависимости для разных значений радиуса пучка.

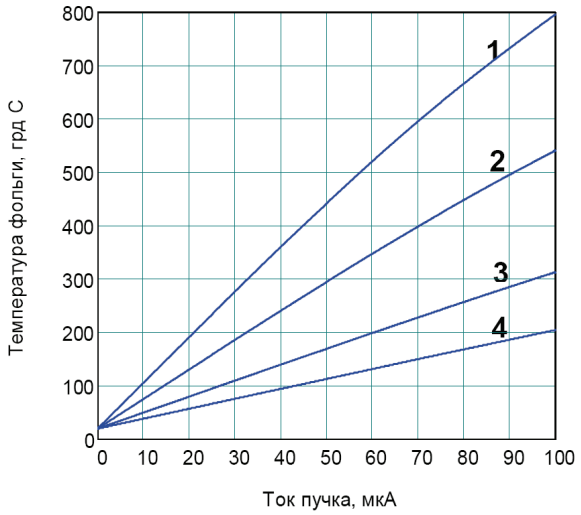


Рис.8. Зависимость температуры фольги в центре пучка Rф=4 см, h=50 мкм от тока пучка с различным радиусом: 1 – r0=0,25 см, 2 – r0=0,5 см, 3 – r0=1,0 см и 4 – r0=1,5 см.

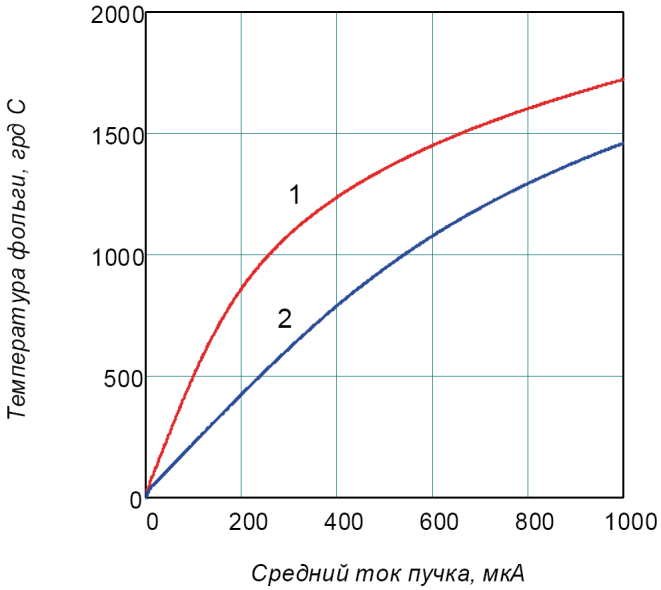


Рис.9. Зависимость температуры выходной фольги $R_ф$=4 см, h=50 мкм в широком диапазоне изменения тока пучка (вплоть до предельно допустимого значения) в режиме свободной конвекции (кривая 1) и с обдувом со скоростью воздушного потока 10 м/сек (кривая 2).

На рис.9 показана зависимость температуры в центре выходной фольги ($R_ф$=4 см, h=50мкм) в широком диапазоне изменения тока пучка, вплоть до предельно допустимого значения, в режиме свободной конвекции (кривая 1) и с принудительным охлаждением воздухом со скоростью потока 10 м/с (кривая 2). Из этого рисунка следует, что при принудительном охлаждении удается существенно облегчить тепловой режим фольги.

На рис.10 показана зависимость температуры в центре выходной фольги $R_ф$=4 см (кривая 1) и в точках на расстоянии от центра 0,5 см (кривая 2), 1.0 см (кривая 3), 2 см (кривая 4) от времени включения пучка с током 80 мкА. Из этого рисунка следует, что с удалением от центра фольги время установления стационарного теплового режима в данной точке фольги увеличивается.

На рис.11 показана зависимость температуры выходной фольги от радиальной координаты, которая демонстрирует ее спад от максимального значения до температуры фланца выходного окна.

Были проведены предварительные оценочные измерения температуры выходной фольги ЛУЭ-30 с помощью термопары, которые показали $T \sim 100^0$C при токе 80 мкА и среднеквадратичном радиусе пучка ~ 1,5 см. Сейчас эти экспериментальные данные можно считать очень приближенными (погрешность ~ 40%) в силу ряда технических причин: собственный нагрев термопары, находящейся в контакте с фольгой под пучком, сложностью экспериментального определения среднеквадратичного радиуса пучка, непосредственно на фольге.

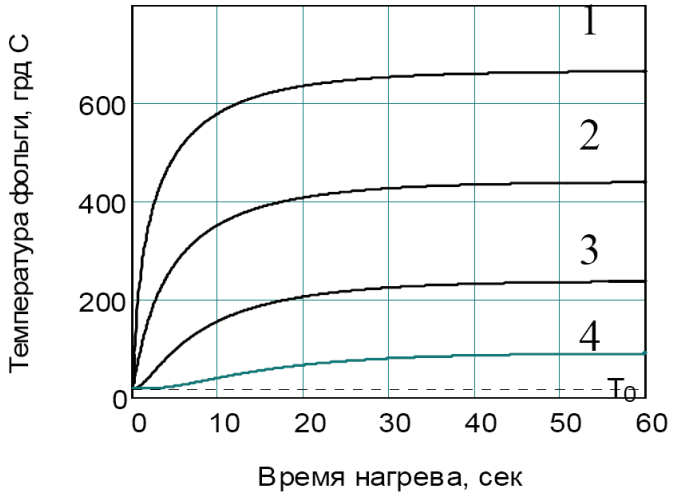


Рис.10. Зависимость температуры выходной фольги h=50 мкм, $R_ф$=4 см, ток 80 мкА без обдува в центре (кривая 1) и в точках удаления от центра на 0.5 см (кривая 2), 1.0 см (кривая 3), 2 см (кривая 4) от времени включения пучка.

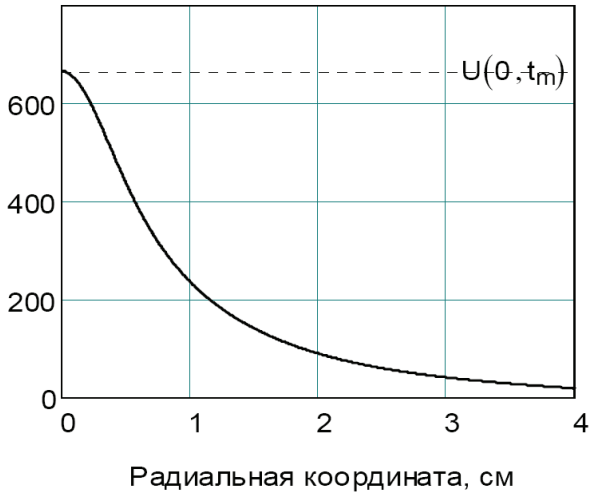


Рис.11. Зависимость температуры фольги от радиальной координаты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе построена математическая модель и проведен анализ тепловых процессов в тонких металлических фольгах, расположенных в вакууме и на выходе каналов ускорителя, при прохождении через них электронных пучков с гауссовым распределением плотности тока по сечению.

Анализ результатов моделирования показал, что наличие реально существующей теплопроводности материала фольги, даже такой невысокой как у титана, а также процесса теплового излучения, не позволяют существенно возрастать температуре в центре фольги при довольно значительном увеличении плотности тока (~ 10 раз). Это дает возможность с одной стороны проводить большие токи в подобных системах, с другой стороны без особых опасений применять дополнительную жесткую фокусировку пучка на фольге с целью дальнейшего улучшения его оптических параметров.

Таким образом, в работе было показано, что для внутренней и внешней установки могут эффективно использоваться титановые фольги 10÷50 мкм, обладающие наряду с относительно малой теплопроводностью, высокой механической прочностью при температурах (до 1000 ^{0}C) и тугоплавкостью (~1700 ^{0}C). При этом каждому конкретному случаю будет соответствовать оптимальная толщина фольги для заданного токового режима ускорителя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gokov S.P., Kasilov V.I., Makhnenko L.A., Khomich A.A. K voprosu ispol'zovaniya vakuumno-razdelitel'nykh fol'g v traktakh uskoreniya i transportirovki puchka v LUE-300. Tezisy dokladov IX konferentsii po fizike vysokikh energiy, yadernoy fizike i uskoritelyam. 21-25 fevralya 2011 g., Khar'kov, s.118-119.
2. Sivukhin D.V. Obshchiy kurs fiziki. – T.2. Termodinamika i molekulyarnaya fizika. - M.:Nauka, 1990. - 591 s.
3. Prays B., Khorton K., Spinni K. Zashchita ot yadernykh izlucheniy. - M.: Izdatel'stvo inostrannoy literatury, 1959. - 492 s.
4. Salvat F., Fernández-Varea J.M., Sempau J. “PENELOPE -A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport” //OECD Nuclear Energy Agency, Workshop Proceedings Issy-les-Moulineaux, France 5-7 November, 2001.
5. Kuz'michev V.E. Zakony i formuly fiziki / Spravochnik. – Kiev: Naukova dumka, 1989. - 861 s.

УДК 538.9

ВЛИЯНИЕ БЕСПОРЯДКА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ МАГНИТНОГО СПЛАВА $Fe_{1-X}Co_X$ НА ПРОЦЕССЫ СПИНОЗАВИСИМОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ

И.Н. Марущенко[1,2], В.Н. Карпан[2], Н.А. Азаренков[1], П.Д. Келли[2]
[1] Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
пр. Курчатова, 31, 61108 Харьков, Украина
[2] Университет Твенте
Дринерлолаан 5, 7500 АЕ Энсхеде, Нидерланды
E-mail: i.marushchenko@gmail.com
Received 15 November 2011, revised 18 May 2012

В статье приводятся результаты численного исследования влияния беспорядка в кристаллической решетке ферромагнитного сплава $Fe_{1-x}Co_x$ на туннелирование в магнитных туннельных переходах $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$. С помощью расчетов из первых принципов, с учетом электронной структуры туннельного перехода, показано, что беспорядок в кристаллической решетке оказывает сильное влияние на спин-поляризованный перенос в случае небольшой концентрации примесных атомов, и практически не влияет в случае, когда содержание кобальта в сплаве становится выше 40%. Полученный результат важен для понимания механизмов, ответственных за эффект большого туннельного магнитосопротивления.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: спин-поляризованный перенос, магнитный туннельный переход, поверхностные состояния, беспорядок

INFLUENCE OF SUBSTITUTIONAL DISORDER IN MAGNETIC ALLOY $Fe_{1-X}Co_X$ ON SPIN-DEPENDENT TUNNELING

I.N. Marushchenko[1,2], V.M. Karpan[2], N.A. Azarenkov[1], P.J. Kelly[2]
[1] V. N. Karazin Kharkiv National University
31 Kurchatov St., Kharkov, 61108, Ukraine
[2] University of Twente
Drienerlolaan 5, 7500 AE Enschede, The Netherlands
A quantitative study of the influence of substitutional disorder on the transport properties of $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ magnetic tunnel junctions is presented. From the first principle calculations with taking into account the parameter-free electronic structure it has been found that the substitutional disorder produces a strong effect on the spin-polarized transport in the limit of low concentration of Co in $Fe_{1-x}Co_x$ alloy, and is negligible when the concentration of cobalt in alloy is larger than 40%. The obtained results are important for understanding the mechanisms responsible for the giant tunneling magnetoresistance.
KEY WORDS: spin-polarized transport, magnetic tunnel junction, surface states, disorder

ВПЛИВ БЕЗЛАДУ У КРИСТАЛЕВІЙ ГРАТЦІ МАГНІТНОГО СПЛАВУ $Fe_{1-X}Co_X$ НА ПРОЦЕСИ СПІНОЗАЛЕЖНОГО ТУНЕЛЮВАННЯ

І.М. Марущенко[1,2], В.М. Карпан[2], М.О. Азарєнков[1], П.Д. Кєллі[2]
[1] Харківськии національниии університет імені В.Н. Каразіна
пр .Курчатова 31, 61108 Харків, Україна
[2] Університет Твенте
Дрінерлолаан 5, 7500 АЕ Енсхеде, Нідерланди
У статті приведено результати числового дослідження впливу безладу у кристалевій гратці феромагнітного сплаву $Fe_{1-x}Co_x$ на тунелювання у магнітних тунельних переходах $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$. За допомогою розрахунків з перших принципів, виходячи з розрахованої електронної структури тунельного переходу, доведено, що безладдя у кристалевій гратці завдає дуже сильну дію на спін-поляризований перенос у випадку, коли концентрація кобальта у сплаві відносно мала, та майже невідчутно у випадку, коли концентрація кобальта у сплаві перевищує 40%. Отриманий результат важливий для розуміння механізмів, що відповідні за ефект гігантського тунельного магнетоопору.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: спін-поляризований перенос, магнітний тунельний перехід, поверхневі стани, безлад

Туннельное магнитосопротивление (ТМС) описывает зависимость сопротивления магнитного туннельного перехода (МТП) ферромагнетик / вакуум / ферромагнетик от относительной ориентации направления магнетизации ферромагнитных электродов при переключении их из параллельной в антипараллельную конфигурацию: $ТМС = (R_{AP}-R_P)/R_P = (G_P-G_{AP})/G_{AP}$. Со времени открытия больших значений ТМС в МТП со сверхтонким слоем аморфного Al_2O_3 в качестве изолятора [1], значительные усилия были приложены к изучению возможности применения этого эффекта в сенсорах и как основы для элементов энергонезависимой памяти. Понимание природы ТМС было существенно затруднено сложностью экспериментальной характеристики границы раздела ферромагнетик / изолятор. Было показано [2], что химическая структура границы раздела имеет сильное влияние на величину и поляризацию ТМС, и правильное ее описание является критически важным для теоретического анализа МТП. Ситуация существенно изменилась с наблюдением

© Marushchenko I.N., Karpan V.M., Azarenkov N.A., Kelly P.J., 2012

больших значений ТМС при комнатных температурах в FeCo/MgO/FeCo МТП, в которых туннельный барьер был моно- [3,4] или поликристаллическим [5]. Эта работа была частично мотивирована теоретическим предсказанием [6,7] огромных значений ТМС для идеальных Fe/MgO/Fe МТП. Это привело к новому направлению исследований в этой области, и одним из существенных вопросов стало объяснение разницы между огромными значениями ТМС, предсказанными теоретически (порядка 10 000 %) [6], и гораздо более скромными значениями 353%, полученными экспериментально [4]. Были попытки объяснить эту разницу как в терминах релаксации атомов на поверхности ферромагнетика [8], так и образованием оксидного слоя FeO на границе раздела [9,10]. В работе [11] исследовано влияние атомного беспорядка в кристаллической решетке на границе раздела металл / вакуум, связанного с неидеальностью поверхностей, полученных методом электронно-лучевой эпитаксии, когда в граничном слое лишь часть узлов решетки занята атомами железа, а оставшиеся узлы остаются пустыми (при этом предполагалось, что сама кристаллическая решетка на границе раздела сохраняет симметрию). Было показано, что огромные значения ТМС в идеальных МТП связаны с резонансным туннелированием, которое очень чувствительно к симметрии границы раздела между электродом и изолятором, так что даже очень малое нарушение симметрии этой границы снижает предсказанные значения ТМС на один-два порядка.

В данной работе рассматривается другой эффект, действующий в том же направлении, что и вышеуказанные. Во многих экспериментах в качестве электродов используется ферромагнитный сплав $Fe_{1-x}Co_x$, который удобен тем, что обладает наибольшим магнитным моментом среди металлов переходной группы. Однако, в случае, когда кристаллическая решетка заполняется атомами разного типа (в данном случае, Fe и Co), имеет место нарушение симметрии кристаллической решетки в том смысле, что, вообще говоря, нарушается трансляционная симметрия элементарной ячейки, и транспорт через такие МТП может существенно зависеть от кластеризации атомов каждого типа в решетке, то есть от конкретной конфигурации беспорядка в каждом конкретном образце. В реальной системе с электродами на основе ферромагнитного сплава имеют место оба эффекта одновременно, но мы исследуем их отдельно один от другого, чтобы иметь возможность сравнить эффективность их влияния на туннелирование (см. рис.1). С этой же целью в качестве изолятора был выбран слой вакуума, позволяющий изучать туннелирование через барьер, но не привносящий никаких новых эффектов, связанных с собственной электронной структурой туннельного барьера. Это также делает результаты данного исследования относительно универсальными, не привязанными к конкретному выбору туннельного барьера. Отметим также, что результаты могут иметь и самостоятельную ценность, так как существуют работы, в которых напрямую измерялась туннельная проводимость через вакуумный слой [12-16].

Таким образом, целью работы является исследование того, насколько сильно влияет беспорядок в кристаллической решетке на туннелирование в МТП с идеально ровной границей раздела.

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В работе исследуется туннельный спиновый транспорт в МТП в режиме линейного отклика в приближении локальной плотности спинов в рамках теории функционалов плотности.

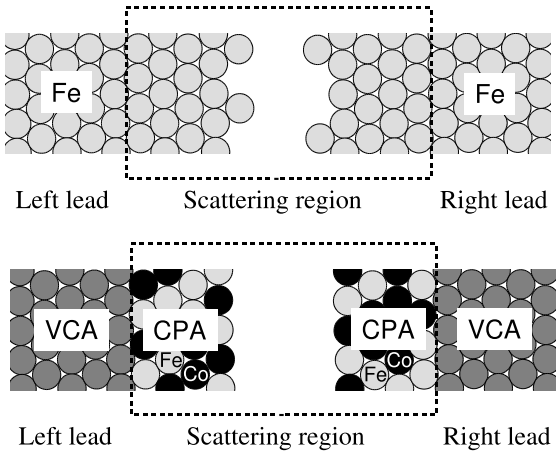


Рис.1. Показан МТП Fe / вакуум / Fe для случая с идеальной кристаллической решеткой и неровностью на границе раздела (вверху), и МТП $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ для случая с беспорядком в атомной решетке, вызванном наличием примесных атомов, но с идеальной границей раздела (внизу). Атомы Fe обозначены серым цветом, а атомы Co черным. Область рассеяния представлена вакуумным барьером и 4 ферромагнитными монослоями с каждой из сторон.

В исследуемой модели МТП типа ФМ / вакуум / ФМ состоит из трех областей: левый и правый подводящие провода, состоящие из ферромагнетика, и область рассеяния (см. рис.1). Провода обладают трехмерной блоховской симметрией, тогда как область рассеяния рассматривается как область, состоящая из атомных слоев с двумерной периодичностью (перпендикулярно к направлению переноса).

Беспорядок в кристаллической решетке изучается в соответствии с моделью, представленной схематически на рис.1 (внизу). Предположим, что беспорядок имеет место только в области рассеяния, тогда как подводящие провода имеют идеальную кристаллическую решетку (это необходимо для того, чтобы размеры рассматриваемой системы были конечными). Размер области рассеяния в представленных вычислениях составляет 16 атомных монослоёв: 4 атомных монослоя $Fe_{1-x}Co_x$ с каждой стороны барьера и 8 монослоёв вакуумного барьера. Ниже будет предложено обоснование такого выбора.

Исследование состоит из двух этапов. На первом этапе расчитывается электронная структура

и магнитные свойства МТП, которые были получены с помощью техники поверхностных функций Грина [17], разработанной в рамках метода «линейных маффин-тин орбиталей» (ЛМТО) с сильной связью в приближении атомных сфер (ПАС) [18]. Потенциалы атомных сфер барьера и нескольких атомных монослоёв ферромагнетика на каждой из сторон барьера были расчитаны самосогласовано, а в качестве потенциалов полубесконечных резервуаров (проводов) были взяты значения для соответствующих блоховских потенциалов. На втором этапе полученные выше самосогласованные потенциалы используются для расчета матриц трансмиссии, используя метод стыковки волновых функций для «маффин-тин орбиталей» в приближении сильной связи, в соответствии с модифицированной схемой Андо [19]. Используя эти матрицы, проводимость рассчитывается в соответствии с транспортным формализмом Ландауэра [20]. Более подробное описание метода можно найти в работах [21, 22].

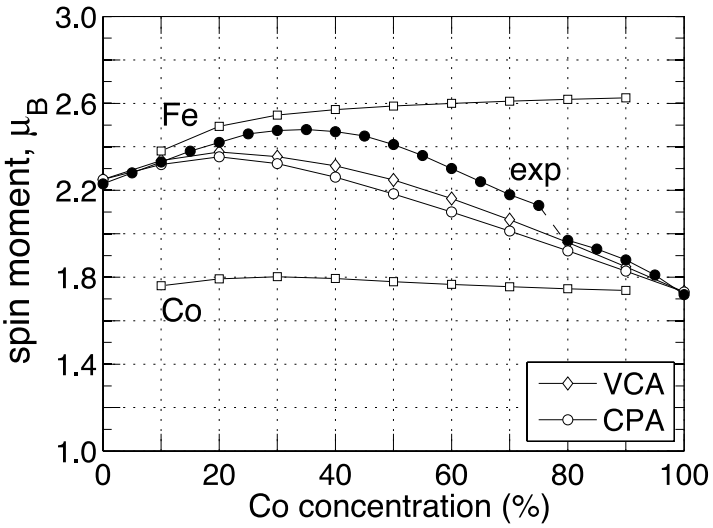


Рис.2. Кривая Слэтэра-Паулинга (зависимость спинового магнитного момента от атомного числа металла). Вычисления проведены для двух случаев: идеальный МТП, описываемый в приближении ПВК (VCA), и МТП, в котором беспорядок в атомной решетке учтен в приближении ПКП (CPA). Квадратными символами показаны значения спинового магнитного момента для атомов Fe и Co, которые определяют магнитный момент $Fe_{1-x}Co_x$ сплава в приближении ПКП. Также приведены экспериментальные результаты, взятые из классической книги Бозорта [26].

Постоянная решетки для *bcc* Fe взята равной a_{Fe}=2,866 А, но Co обычно не встречается в виде *bcc*, поэтому постоянная решетки для *bcc* Co выбрана таким образом, чтобы атомная решетка *bcc* Co имела такой же объем, как и *hcp* Co, и соответсвующее значение равно a_{Co}=2,817 А. Это приближение нам понадобилось для того, чтобы мы смогли моделировать сплав $Fe_{1-x}Co_x$ как функцию x для исследования эффекта влияния беспорядка в атомной решетке сплава на туннельный магнитный резонанс (TMP). Из экспериментов известно, что Fe и Co образуют *bcc* сплав для концентраций в интервале от x = 0,0 до $x \leq 0{,}7$, где происходит фазовый переход в *hcp* [23]. Для простоты предположим, что сплав $Fe_{1-x}Co_x$ имеет кристаллическую *bcc* структуру для всех концентраций Co, причем сплав подчиняется закону Вегарда, в соответствии с которым его постоянная решетки определяется по формуле $(1-x)a_{Fe} + xa_{Co}$, где x – концентрация Co в сплаве. Отметим, что закон Вегарда не является единственно возможным способом определения постоянной решетки для различных сплавов. Можно использовать такую постоянную решетки, для которой полная энергия имеет минимум [24]. Мы проверили этот вариант и получили немного меньшие значения для магнитного момента сплавов $Fe_{1-x}Co_x$ для различных концентраций.

Согласно предлагаемой модели, беспорядок присутствует только в области рассеяния, тогда как в подводящих проводах кристаллическая решетка идеальна. Это необходимо для того, чтобы размеры рассматриваемой системы были конечными. Беспорядок в атомной решетке моделируется с помощью приближения когерентных потенциалов - ПКП (coherent potential approximation - CPA) [25]. Этот же подход использовался для расчетов беспорядка на границе раздела в МТП [11], только теперь вместо пустых сфер атомы Fe смешиваются с атомами Co для моделирования сплава $Fe_{1-x}Co_x$ при заданной концентрации x. При этом, так как каждая конкретная конфигурация беспорядка (распределение атомов Fe и Co по узлам решетки в суперячейке) дает для проводимости значение, которое может отличаться на десятки процентов от значений проводимости, даваемых другими конфигурациями, все результаты для проводимости, приведенные в статье, являются усредненными по множеству случайных конфигураций беспорядка. В качестве референсной системы, как и в предыдущем случае [11], рассмотим идентичную систему, максимально близко повторяющую распределение потенциалов, но имеющую идеальную кристаллическую решетку (т.е. с полной трансляционной инвариантностью в плоскости, перпендикулярной транспорту). Таким образом, в качестве альтернативной модели для моделирования сплава $Fe_{1-x}Co_x$ было выбрано приближение виртуального кристалла – ПВК (virtual crystal approximation - VCA), согласно которому вместо реальных атомов кристаллическая решетка заполняется виртуальными $Fe_{1-x}Co_x$ атомами, физические характеристики которых, такие как атомный номер, заряд и т.д., определяются по формулам, аналогичным закону Вегарда. Для того, чтобы убедиться, что приближение ПВК дает корректные результаты, проведено сравнение результатов расчета кривой Слэтера-Паулинга (зависимости магнитного момента от атомного числа металла) для сплава $Fe_{1-x}Co_x$, полученных в приближении ПКП с результатами, полученными для виртуального кристалла, смоделированому согласно методу ПВК. Полученные

результаты (см. рис.2) хорошо согласуются с экспериментальными [26], особенно если учесть, что в нашей работе не учитывается наличие фазового перехода от *bcc* к *hcp* при концентрации Co выше 70%. Также важно отметить, что в вычислениях магнитного момента пренебрегается вкладом от орбитального момента, и рассматривается только спиновую часть. Полученные результаты хорошо согласуются с аналогичными результатами, полученными теоретически [24]. Но самым важным является то, что ПВК дает почти полное совпадение с ПКП, и ошибка первого относительно второго при расчете магнитного момента не превышает 4-5%. Таким образом, этот метод действительно можно использовать для моделирования ферромагнитного сплава. Используя ПВК, можно также построить *bcc* решетку с идеальной трехмерной трансляционной симметрией, которая будет моделировать подводящие провода (резервуары) МТП как в случае беспорядка, так и в случае идеального МТП (см. рис.1). С одной стороны, наличие идентичных резервуаров означает одинаковый уровень Ферми в системе в обоих случаях (с беспорядком и без), так что можно сравнивать результаты напрямую. С другой стороны, это позволяет хорошо стыковать кристаллические решетки на границе раздела между резервуаром и областью рассеяния, избежав рассеяния, которое могло возникнуть в ином случае. Важно отметить, что везде в этой статье граница раздела металл - вакуум предполагается идеальной, и беспорядок имеет место только в кристаллической структуре ферромагнетика. Постоянные решетки для Fe и Co соответствуют радиусу атомных сфер Вигнера-Зейтца, составляющих 2,677 и 2,621 боровских радиусов соответственно. Тунельный барьер моделируется с помощью так называемых “пустых сфер”. Область барьера заполняется “пустыми” атомными сферами с нулевыми зарядом и атомным числом, но того же размера, что и в ферромагнитных контактах, которые размещаются в узлах *bcc* решетки, идентичной кристаллической решетке ферромагнитного сплава.

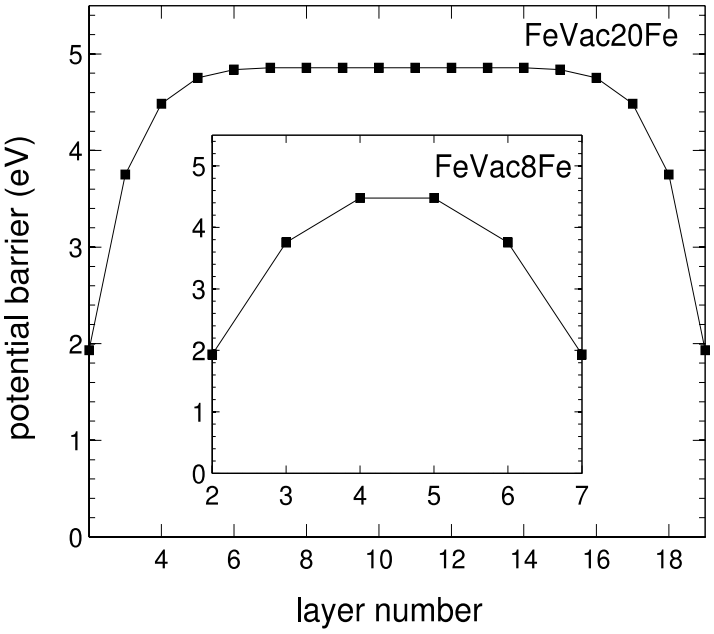


Рис.3. Профиль потенциального барьера с железными электродами, расчитанный для двух случаев: 1) толстый барьер в 20 атомных монослоёв, и 2) относительно тонкий барьер толщиной в 8 монослоёв, используемый нами для расчетов, приведенных ниже в статье.

Прежде чем перейти к непосредственным вычислениям для ферромагнитного сплава, следует убедиться, что туннельный барьер смоделирован правильно, расчитав его потенциальный профиль. Для этого нужно проанализировать самосогласованные потенциалы для соответствующих «пустых сфер» каждого монослоя в области вакуумного барьера и определить потенциал в центре каждой из неидентичных атомных сфер. Отметим, что этот потенциальный профиль расчитывался только для области, в которой потенциалы почти плоские. Результирующий профиль показан на рис.3. Отсюда видно, что для очень толстого вакуумного слоя (порядка 20 монослоёв) форма потенциального барьера близка к прямоугольной. Однако основная часть наших расчетов выполнена для барьеров толщиной в восемь атомных монослоёв (см. рис.3), так как проводимость экспоненциально падает с увеличением толщины барьера, и для более толстых барьеров величина трансмиссии становится сравнима с точностью транспортного кода (10^{-9}). Как видно из рис.3, потенциальный профиль для такого барьера существенно отличается от прямоугольного и по форме скорее близок к параболическому, причем его высота приблизительно равна 4,7 eV, что находится в хорошем согласии с экспериментальным значением для работы выхода Fe, равной 4,5 eV [27].

Следующий вопрос состоит в том, какого размера должна быть область рассеяния, чтобы в достаточной степени учесть беспорядок в кристаллической решетке. Для того, чтобы ответить на этот вопрос, проверим, как изменяется сопротивление МТП при увеличении толщины ферромагнитного сплава от 4 до 12 монослоев. Полученные результаты показывают, что усредненное сопротивление МТП при этом практически не меняется, и разброс значений, связанный с использованием различных конфигураций беспорядка, намного более значительный, чем тот, что связан с уменьшением области рассеяния. Выбранная для расчетов толщина ферромагнитного слоя в 4 монослоя связана также с тем, что именно в четвертом монослое (в направлении, перпендикулярном транспорту) магнитный момент, сильно меняющийся в слоях, непосредственно прилегающих к границе раздела ферромагнетик / вакуум, практически перестает чувствовать влияние границы, и его вариация от слоя к слою становится незначительной, асимптотически приближаясь к магнитному моменту кристалла с полной трансляционной инвариантностью во всех трех кристаллографических направлениях.

В данной работе мы рассматриваем транспорт в направлении (001), оставляя атомы на границах раздела в нерелаксированных позициях, то есть в строго заданных узлах *bcc* решетки. Все самосогласованные расчеты выполнены в *spd*-базисе и обменно-корреляционные потенциалы посчитаны и параметризованы в соответствии со схемой Бардина и Хедина [28]. Интегрирование по двухмерной зоне Бриллюэна выполнено с сеткой $k_{||}$, достаточно плотной для хорошей сходимости результатов. Для расчетов с учетом беспорядка в кристаллической решетке использовались двумерные суперячейки размером 10×10 (то есть 100 атомов).

ВЛИЯНИЕ БЕСПОРЯДКА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ НА ТУННЕЛИРОВАНИЕ

Рассмотрим теперь туннелирование в МТП в случае, когда электроды сделаны из ферромагнитного сплава $Fe_{1-x}Co_x$ с идеально ровной границей раздела металл / вакуум.

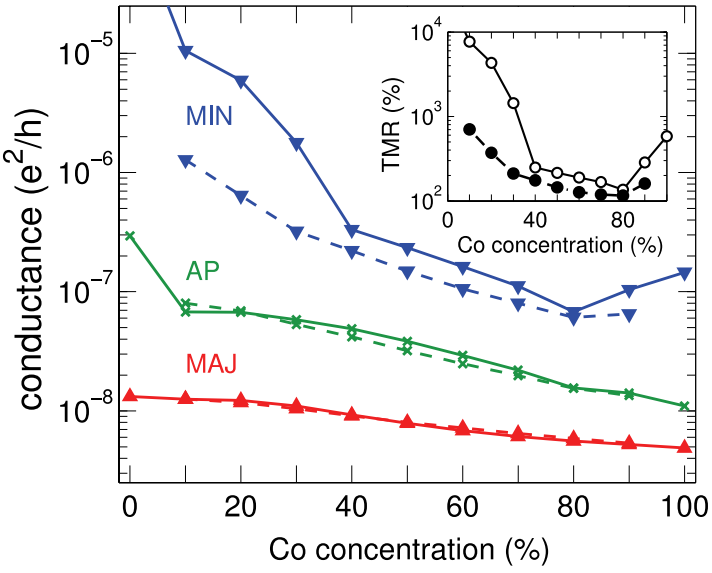


Рис.4. Усредненные по конфигурациям проводимости магнитного туннельного перехода $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ с толщиной барьера 8 монослоев, показаны как функции концентрации примесного элемента Co для каждого из каналов проводимости: спин-вверх (MAJ) и спин-вниз (MIN) в случае параллельной конфигурации спинов, а также для антипараллельной конфигурации спинов (AP) . Во вставке показана зависимость ТМС от концентрации Co. Пустые кружки соответствуют вычислениям для идеального случая (ПВК), а черные кружки соответствуют вычислениям для случая с беспорядком (ПКП).

Целесообразно рассмотреть два случая: один соответствует идеальному случаю (сохраняется трансляционная инвариантность элементарной ячейки в плоскости, перпендикулярной направлению переноса спина), другой соотвествует системе с беспорядком, когда есть два типа атомов, которые распределены по узлам решетки случайным образом в соответствии с заданной концентрацией основного металла Fe и примеси Co. На рис.4 показаны результаты расчетов для проводимости различных концентраций сплава $Fe_{1-x}Co_x$ с шагом в 10%.

С увеличением концентрации x примесных атомов не только усиливается беспорядок в кристаллической решетке, но также меняется и соответствующая электронная структура сплава, поскольку уровень Ферми сдвигается вверх. Чтобы различать эти два эффекта, сначала проведем вычисления, в которых магнитный сплав моделируется в приближении ПВК. В этом случае можно наблюдать эффект, вызванный изменением уровня Ферми, не включающий беспорядок. Затем посчитаем проводимость, учитывая беспорядок с помощью приближения ПКП, и сравнив эти результаты с результатами, полученными в предыдущем случае, можем делать вывод о влиянии беспорядка в атомной решетке на туннелирование в МТП.

На рис.4 представлены результаты вычислений проводимости для отдельных спиновых каналов в параллельной и антипараллельной конфигурации. Видно, что каналы с антипараллельной конфигурацией спинов и канал “спин-вверх” для параллельной конфигурации практически не отличаются друг от друга, однако значительные изменения наблюдаются в канале “спин-вниз”, и прежде всего для малых концентраций примеси. Для того, чтобы объяснить это поведение, следует исследовать поверхностные состояния в рассматриваемой системе. Для идеальных систем существуют состояния, “живущие” на поверхности $Fe_{1-x}Co_x$ сплава в канале “спин-вниз”. Благодаря различному числу валентных электронов для разных концентраций x, положение поверхностного состояния относительно уровня Ферми будет постепенно меняться.

На рис.5 представлены результаты вычисления плотности состояний, полученные для вышеописанного случая. Плотность состояний Δ_1 (состояний со сферической симметрией) в точке $k_{||}$, которая находится близко к центру зоны Бриллюэна, посчитана для фиксированной толщины барьера, но разных концентраций примеси Co. Для того, чтобы можно было увидеть эти пики, было использовано уширение, заданное комплексной энергией η = 0,0025 Ry. Видно, что значительный вклад от резонансного туннелирования стоит ожидать для малых концентраций примеси. По мере дальнейшего увеличения концентрации Co уровень Ферми уходит в сторону от поверхностного резонанса. Это отражено в поведении проводимости в канале “спин-вниз” как функции концентрации примеси, показанной на рис.4. Таким образом, высокие значения проводимости “спин-вниз” могут быть отнесены на счет резонансного туннелирования. С увеличением концентрации Co проводимость в этом канале уменьшается, так как уменьшается вклад от резонансных состояний. Беспорядок кристаллической решетки приводит к разрушению точечной группы симметрии, эффективно увеличивая полуширину резонанса Г, что в свою очередь приводит к снижению туннелирования. При x = 40%

поверхностные резонансы более не дают существенного вклада, и эффект от беспорядка в кристаллической решетке в этом случае довольно мал. Для больших концентраций Co проводимость довольно хорошо описывается в приближении ПВК. Таким образом, наибольший вклад в суммарную проводимость резонансное туннелирование дает для очень малых значений x, когда уровень Ферми и резонансный пик совпадают.

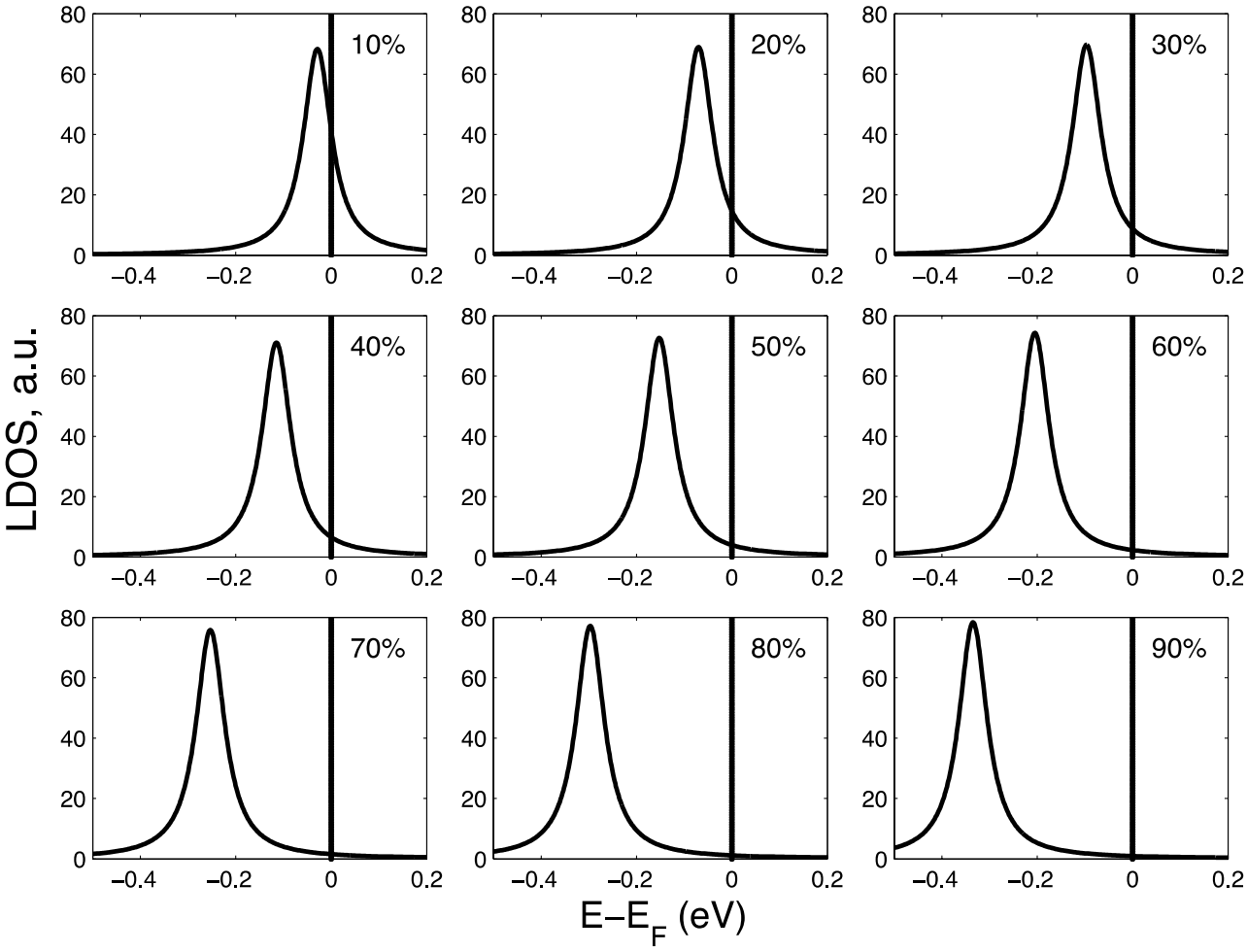


Рис.5. Результаты для локальной плотности состояний (LDOS), посчитанной для разных значений *x* в приближении ПВК. Смещение уровня Ферми системы относительно поверхностного состояния (которое остается неизменным) приводит к уменьшению локальной плотности состояний на уровне Ферми при увеличении концентрации Co.

Таким образом, беспорядок в кристаллической решетке действует так же, как и беспорядок на границе раздела металл / вакуум, а именно, снижая огромные значения туннельного магнитного сопротивления (ТМС), найденные для эквивалентной системы без беспорядка, хотя и значительно менее эффективно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Если сравнить исследуемую здесь систему $Fe_{1-x}Co_x$ / вакуум / $Fe_{1-x}Co_x$ и МТП, основанный на MgO, обнаружится, что разница между ними скорее количественная, чем качественная (опуская подробности вычислений). В обоих случаях резонансное туннелирование очень важно и наблюдается только в канале «спин-вниз», а его причиной является поверхностное состояние на поверхности Fe в кристаллографическом направлении (001). Никакого резонансного туннелирования не было обнаружено в канале «спин-вверх», потому что в этом случае поверхностное состояние лежит намного ниже уровня Ферми. Однако, в случае MgO было обнаружено, что вклад в проводимость от канала «спин-вниз» для некоторых определенных значений толщины барьера значительно меньше, чем те, что наблюдаются здесь. Недооценка резонансного туннелирования приводит к ситуации, когда проводимость «спин-вверх» начинает доминировать в параллельной конфигурации, как было обнаружено для MgO барьеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moodera J.S., Kinder L.R., Wong T.M., Meservey R. Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol.74. – P.3273-3276.
2. De Teresa J.M., Barthelemy A., Fert A., Contour J.P., Montaigne F., Seneor P. Role of Metal-Oxide Interface in Determining the Spin Polarization of Magnetic Tunnel Junctions // Science. – 1999. – Vol.286. – P.507-509.
3. Yuasa S., Nagahama T., Fukushima A., Suzuki Y., Ando K. Giant room-temperature magnetoresistance in single-crystal Fe/MgO/Fe magnetic tunnel junctions // Nature Materials. – 2004. – Vol.3. – P.868-871.
4. Yuasa S., Katayama T., Nagahama T., Fukushima A., Kubota H., Suzuki Y., Ando K. Giant tunneling magnetoresistance in fully epitaxial body-centered-cubic Co/MgO/Fe magnetic tunnel junctions // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol.87. – P.222508-222510.
5. Parkin S.S.P., Kaiser C., Panchula A., Rice P.M., Hughes B., Samant M., Yang S.H. Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers // Nature Materials. – 2004. – Vol.3. – P.862-867.
6. Butler W.H., Zhang X.G., Schulthess T.C., MacLaren J.M. Spin-dependent tunneling conductance of Fe|MgO|Fe sandwiches // Phys. Rev. B. – 2001. – Vol.63. – P.054416-054427.
7. Mathon J., Umerski A. Theory of tunneling magnetoresistance of an epitaxial Fe/MgO/Fe(001) junction // Phys. Rev. B. – 2001. – Vol.63. – P.220403-220406(R).
8. Wortmann D., Bihlmayer G., Bluegel S. Ab initio calculations of interface effects in tunnelling through MgO barriers on Fe(100) // J. Phys.: Condens. Matter. – 2004. – Vol.16. – P.S5819-S5822.
9. Zhang X.G., Butler W.H., Bandyopadhyay A. Effects of the iron-oxide layer in Fe-FeO-MgO-Fe tunneling junctions // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol.68. – P.092402-092405.
10. Tusche C., Meyerheim H.L., Jedrecy N., Renaud G., Ernst A., Henk J., Bruno P., Kirschner J. Oxygen-Induced Symmetrization and Structural Coherency in Fe/MgO/Fe(001) Magnetic Tunnel Junctions // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol.95. – P.176101-176104.
11. Marushchenko I.N., Karpan V.N., Azarenkov N.A., Kelli P.D. Vliyanie besporyadka na granitse razdela na protsessy spinozavisimogo tunnelirovaniya // The Journal of Kharkiv National University, physical series: Nuclei, Particles, Fields. – 2010. – Vol.916. – P.110-116.
12. Stroscio J.A., Pierce D.T., Davies A., Celotta R.J., Weinert M. Tunneling Spectroscopy of bcc (001) Surface States // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol.75. – P.2960.
13. Alvarado S.F. Tunneling Potential Barrier Dependence of Electron Spin Polarization // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol.75. – P.513-516.
14. Okuno S.N., Kishi T., Tanaka K. Spin-polarized tunneling spectroscopy of Co(0001) Surface States // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol.88. – P066803.
15. Ding H.F., Wulfhekel W., Henk J., Bruno P., Kirschner J. Absence of Zero-Bias Anomaly in Spin-Polarized Vacuum Tunneling in Co(0001) // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol.90. – P116603.
16. Bischoff M.M.J., Yamada T.K., Fang C.M., de Groot R.A., van Kempen H. Local electronic structure of Fe(001) surfaces studied by scanning tunneling spectroscopy // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol.68. – P045422.
17. Turek I., Drchal V., Kudrnovsky J., Sob M., Weinberger P. Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces and Interfaces. – Boston-London-Dordrecht, Kluwer, 1997.
18. Andersen O.K., Pawlowska Z., Jepsen O. Illustration of the linear-muffin-tin-orbital tight-binding representation: Compact orbitals and charge density in Si // Phys. Rev. B. – Vol.34. – P.5253-5269.
19. Ando T. Quantum point contacts in magnetic fields // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol.44. – P.8017-8027.
20. Datta S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. - Cambridge, Cambridge University Press, 1997.
21. Xia K., Kelly P.J., Bauer G.E.W., Turek I., Kudrnovsky J., Drchal V. Interface resistance of disordered magnetic multilayers // Phys. Rev. B – Vol.63. – P.064407.
22. Xia K., Zwierzycki M., Talanana M., Kelly P.J., Bauer G.E.W. First-principles scattering matrices for spin transport // Phys. Rev. B – 2006. – Vol.73. – P.064420.
23. Schwarz K., Mohn P., Blaha P., Kubler J. Electronic and magnetic structure of BCC Fe-Co alloys from band theory // J. Phys. F: Met. Phys. – 1984. – Vol.14. – P2659.
24. MacLaren J.M., Schulthess T.C., Butler W.H., Sutton R., McHenry M. Electronic structure, exchange interactions, and Curie temperature of FeCo // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol.85. – P4833.
25. Soven P. Coherent-Potential Model of Substitutional Disordered Alloys // Phys. Rev. – 1967. – Vol.156. – P809-813.
26. Bozort R. Ferromagnetizm – Moskva, Izdatel'stvo inostrannoy literatury, 1956.
27. Skriver L., Rosengaard N.M. Surface energy and work function of elemental metals // Phys. Rev. B – 1992. – Vol.46. – P7157-7168.
28. von Barth U., Hedin L. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. I // J. Phys. C: Sol. State Phys. – 1972. – Vol.5. – P.1629.

УДК 537.533.9:539.51

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВОЇ ДІЇ СИЛЬНОСТРУМОВОГО РЕЛЯТИВІСТСЬКОГО ЕЛЕКТРОННОГО ПУЧКА НА ТИТАНОВИЙ СПЛАВ ВТ1-0

В.В. Литвиненко[1,3], А.Г. Пономарьов[2], О.А. Старцев[3], В.Т. Уваров[2]
[1]Інститут електрофізики та радіаційних технологій НАН України
61002, Харків 2, вул.Чернишевського, 28, а/с 8812
[2]ННЦ Харківський фізико-технічний інститут НАН України
61108, Харків, вул. Академічна,1
[3]Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61108 м. Харків, пл.Свободи, 4
E-mail: startsev-olexandr@rambler.ru
Received 17 February 2012, accepted 14 May 2012

Досліджено модифікуючий вплив трубчастого імпульсного сильнострумового релятивістського електронного пучка на титанову мішень зі сплаву ВТ1-0. Побудовано математичну модель динаміки температурного поля взаємодії пучка з мішенню, відповідно до якої здійснено чисельний аналіз. Встановлено взаємозв'язок між характеристиками мікроструктури і чинниками дії опромінення – абляційних процесів і температурного поля. Розглянуто механізм кратероутворення. Описано внесок продуктів конденсації абляційного викиду на формування структури приповерхневого шару.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: абляційні процеси, електронний пучок, гідродинамічне розпилення, кратероутворення.

SIMULATION OF THERMAL EFFECTS OF HIGH-CURRENT RELATIVISTIC ELECTRON BEAM ON THE TITANIUM ALLOY VT1-0

V.V. Lytvynenko[1,3], A.G. Ponomarev[2], O.A. Startsev[3], V.T. Uvarov[2]
1 Institute of electrophysics and radiation technologies of NAS Ukraine
61002, Kharkiv 2, Chernyshevskogo st., 28, m/b 8812
2 NSC Kharkiv institute of physics and technology
61108, Kharkiv, Akademichna st., 1
3 V.N. Karazin Kharkiv national university
61022, Kharkiv, Svobody Sq., 4
Modifying impact of the cannular pulse high current relativistic electron beam on the titanium VT1-0 alloy lamina target is observed. The mathematical model of temperature field of beam-target interaction is constructed and thereafter numerical analysis are carried out. Linkages between microstructure characteristics and exposure factors (temperature field and ablative processes) are ascertained. The process of crater formation is considered. It is describing the influence of condensed process of ablative release on the surface layers structure.
KEY WORDS: ablative processes, electron beam, hydrodynamic sputtering, crater formation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ СИЛЬНОТОЧНОГО РЕЛЯТИВИСТСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА НА ТИТАНОВЫЙ СПЛАВ ВТ1-0

В.В. Литвиненко[1,3], А.Г. Пономарев[2], А.А. Старцев[3], В.Т. Уваров[2]
[1]Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины
61002, Харьков 2, ул.Чернышевского, 28, а/я 8812
[2]ННЦ Харьковский физико-технический институт НАН Украины
61108, Харьков, ул. Академическая, 1
[3]Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
61108, Харьков, пл. Свободы,4
Изучено модифицирующее влияние трубчатого одноимпульсного сильноточного релятивистского электронного пучка на титановую мишень из сплава ВТ1-0. Построена математическая модель динамики температурного поля взаимодействия пучка с мишенью, соответственно которой проведен численный анализ. Установлена взаимосвязь между характеристиками микроструктуры и факторами действия облучения – абляционных процессов и температурного поля. Рассмотрен механизм кратерообразования. Описан вклад процесса конденсации продуктов абляционного выброса в формирование структуры приповерхностного слоя.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: абляционные процессы, электронный пучок, гидродинамическое распыление, кратерообразование.

Створення нових функціональних матеріалів із заданими властивостями та прогнозування їх поведінки під дією різноманітних експлуатаційних чинників є однією з актуальних задач прикладної фізики. Відомим підходом до її вирішення є застосування концентрованих потоків енергії при обробці матеріалів [1], зокрема сильнострумових релятивістських електронних пучків (СРЕП). Вплив СРЕП складається із наступних чинників: радіаційного, термічного, ударно-хвильового впливів та впливу, зумовленого проходженням електричного струму.

Результатом модифікуючої дії СРЕП є, як правило, зміна мікротвердості, корозійної та ерозійної стійкостей, електрофізичних та механічних властивостей [2], що є наслідком структурно-фазових перетворень.

© Lytvynenko V.V., Ponomarev A.G., Startsev O.A., Uvarov V.T., 2012

Зазначимо, що прикладне застосуванням СРЕП може також полягати в тестових дослідженнях стійкості матеріалів, що використовуються в космічному машинобудуванні, до бомбардування потоками мікрометеоритів, частинками космічного «сміття» та природними джерелами іонізуючого випромінювання[3,4]. Разом з тим одним з основних механізмів, які зумовлюють вказані зміни, є істотний термічний вплив пучка, особливо в режимах опромінення, коли густина потоку енергії є достатньою для переплаву приповерхневих шарів мішені.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Зважаючи на те, що протягом дії імпульсу відбувається низка фазових перетворень: тверде тіло – рідина – газ – конденсація – затвердіння, виникає необхідність побудови адекватної теплофізичної моделі, яка здатна враховувати процеси зумовлені абляцією мішені, твердотільні фазові перетворення, зміну теплоємності по мірі зростання температури тощо. Важливим є розгляд динаміки температурного поля в часовому масштабі меншому за тривалість імпульсу для більш повного розуміння послідовності процесів, що відбуваються в мішені, зокрема, конденсації на поверхню продуктів абляційного викиду. Верифікацію розробленої моделі доцільно проводити на прикладі промислового сплаву, в якому б відбувались також твердотільні фазові перетворення, та який становить інтерес для технологій радіаційної модифікації.

Метою роботи є побудова моделі еволюції теплового поля в опроміненій титановій мішені, виявлення взаємозв'язку між структурою і властивостями зразка та результатами моделювання.

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ

Проведено опромінення пластинки товщиною 2 мм з титанового сплаву ВТ1-0 (таблиця) трубчастим СРЕП прискорювача МІГ-1 (ННЦ ХФТІ) з такими параметрами електронного пучка: енергія електронів ~ 0,35 МеВ, струм пучка ~ 2 кА, тривалість імпульсу ~ 5 мкс. Опромінення мішені одноразовим імпульсом здійснено у вакуумній камері прискорювача при тиску (10^{-4}…10^{-5}) Тор. Внутрішній радіус пучка близько 1,5 см, зовнішній ~ 2,3 см, товщина стінки пучка ~ 0,8 см. Лінійні розміри пластини більші за характерні розміри області взаємодії. Пластина закріплена на колекторі, маса якого значно перевищувала масу мішені. Зроблено аналіз зламів опроміненого та неопроміненого зразків із сплаву ВТ1-0 на растровому електронному мікроскопі JEOL JSM-840. Проведено металографічні дослідження за допомогою оптичного мікроскопу МІМ-8М у світлому та темному полях.

Таблиця

Відсотковий елементний склад сплаву ВТ1-0

Марка сплаву	Хімічні елементи, %						
	Ti	Si	Fe	O	H	N	C
ВТ1-0	99,33	0,10	0,25	0,20	0,010	0,04	0,07

Для повного розуміння взаємодії СРЕП з мішенню, необхідно осягнути цілісну картину взаємозв'язку всіх процесів, які відбуваються. Абляція розпочинається при перевищенні порогової густини енергії, про що свідчить добре досліджена лазерна абляція [5,6], що супроводжується різким збільшенням розпилення металу. Але на відміну від лазерної, при електронній абляції характерна глибина поглинання значно більша і максимум енерговиділення знаходиться на третині лінійної глибини проникнення пучка. Особливості проникної здатності СРЕП зумовлюють суттєві відмінності перебігу фізичних процесів, ніж при лазерному опроміненні [5], а саме більш деструктивний рівень пошкоджень мішені при рівних потужностях [4]. Основними факторами, які визначають структурно-фазовий стан і властивості приповерхневих шарів матеріалу, є розподіл полів температур та термомеханічних напружень [7].

Нами здійснено чисельне моделювання еволюцій профілю енерговиділення та температурного поля. Для розрахунку профілю енерговиділення S у титановій мішені, скористались напівемпіричним методом розрахунку профілів, який висвітлений у роботі [8], при нормальному падінні пучка електронів, врахувавши при цьому багаторазове розсіювання електронів та наявність δ-електронів. Відповідно до моделі, обчислена повна енергія, що виділена пучком у мішені. Щоб знайти температурне поле, потрібно знати не тільки профіль енерговиділення, але врахувати і динаміку абляційних процесів, локалізацію напружень, характеристику плазмової хмарини, імпульс віддачі, а також особливості мікроструктури, шорсткуватість поверхні. Оскільки тривалість імпульсу становить 5 мкс, що значно перевищує час електрон-фононної релаксації τ_r, можна розглянути даний випадок у наближенні звичайної моделі теплопровідності. Розв'язання даної задачі ускладнене. Спрощено, температурне поле можна знайти як поле, що індукується тільки енерговиділенням [4,9] (1). Оскільки основним складником сплаву ВТ1-0 є титан (понад 99%), використовуємо термодинамічні коефіцієнти титану. Зазначаємо, що фононна та променева теплопровідності є малими у порівнянні з електронною в інтервалі температур $10 \div 4000\,^{\circ}C$.

Математична модель еволюції теплового поля побудована за релаксаційною моделлю теплового потоку $\vec{q}$ (1), для якого рівняння енергетичного балансу задаємо (2). Оскільки теплоємність сплаву при цьому

рівномірно зростає, її апроксимуємо лінійною функцією від температури (3).

$$\tau_r \frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \vec{q} + \lambda \nabla T = 0. \quad (1)$$

$$\zeta \int S(r)dt = \int c(T)m(r,T)dT + Q^{Ti}_{\alpha \leftrightarrow \beta}(r, T_{\alpha \leftrightarrow \beta}) + Q^{Ti}_{melt}(r, T_{melt}) + Q^{Ti}_{ev}(r, T_{ev}) + A(r,T), \quad (2)$$

$$\text{c(T)=517,5+0,2524T}, \quad (3)$$

де c(T) – теплоємність; T, $^{\circ}C$; S(r) – енерговиділення; ζ – розмірний коефіцієнт. Враховуємо приховану теплоту фазових переходів $Q^{Ti}_{\alpha \leftrightarrow \beta}$, плавлення Q^{Ti}_{melt}, кипіння Q^{Ti}_{ev} титану, неоднорідність розподілу густини струму. Член $A(r,T)$ вносить корективи у модель, враховуючи сублімацію приповерхневого шару матеріалу, екранування пучка газово-крапельною хмариною, втрати на іонізацію, появи зарядово-струмового відображення, тощо. Розв'язана задача дифузії теплового поля методом скінченних різниць. Слід зазначити, що пластина закріплена міцно на товстому аноді, тоді можна знехтувати однією зовнішньою граничною умовою та розв'язувати задачу для півбезкінченного простору. Диференційно-різницева задача розв'язана використовуванням схеми Кранка-Ніколсона на ортогональній неструктурованій сітці із кроком по часу $\tilde{\tilde{\tau}}$, при цьому промодельовано вплив різних граничних умов на швидкість охолодження. Важливість граничних умов процесу охолодження пластинки пояснюється тим, що вони безпосередньо впливають на вихідну мікроструктуру мішені, яка добре досліджена експериментально. Математична 1D модель процесів теплопровідності має вигляд:

$$\begin{cases} \tau_r \dfrac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \dfrac{\partial T}{\partial t} = a \dfrac{\partial^2 T}{\partial^2 x} + b \dfrac{\partial T}{\partial x} + fT; \\ \alpha \dfrac{\partial T(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} + \beta T(x,t)\big|_{x=0} = \varphi_0(t), \quad t > 0; \\ T(x,t)\big|_{t=0} = \psi(x), \quad 0 \le x \le l; \\ \tau \gg \tilde{\tilde{\tau}} \gg \tau_r \end{cases}. \quad (4)$$

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Взаємодія СРЕП із мішенню призвела до сильної пластичної деформації останньої. Проведений попередній металографічний аналіз поперечного зрізу допоміг визначити максимальну глибину кратеру h=0,4 мм, що становить близько двох характерних глибин поглинання $R^{50\%}_{surf} = 0,2$мм. Це свідчить про стимульовану емісію речовини основи внаслідок абляційних процесів [9]. На границі кратера знаходяться брусфери висотою до 50 мкм, внутрішня основа яких складається з рівноосних зерен розміром l= 20-40 мкм, що подібне до мікроструктури неопроміненої мішені, але із численними внутрішньозеренними розорієнтованими тріщинами. Основа брусферів сформувалась внаслідок викиду оплавлених зерен із епіцентру взаємодії. Більш детальним є аналіз фрактограм поперечного злому, який дозволив виділити три характерні області (рис.1): переплаву (А), перехідну (В) та немодифіковану (С). Товщина шару А у центрі кратера 100 мкм, на периферії до 300 мкм. Товщина шару В становить до 1,1 мм. Для області С характерний ямковий рельєф руйнування рівноосної α-фази за механізмом в'язкого злому. Для області В характерний крихкий механізм руйнування, яскраво простежуються білі шари паралельно поверхні, область є безпоруватою сильно компактованою β-фазою, із незначними міжзеренними крихкими руйнуваннями. Дана область сформована під впливом швидкої теплової фіксації результатів ударно-хвильової дії на розплав. Область А сформована внаслідок швидкісного охолодження розплаву та конденсації газово-крапельної хмари, що призвело до значних термомеханічних напружень, зумовивши накопичення структурних дефектів.

Рельєф зі значними міжзеренними руйнуваннями хаотично орієнтованих зерен β-фази та вкрапленнями α-фази, що є результатом сегрегації термічно активованих доданків, механізм руйнування – крихкий. В області А також наявні сліди ударно-хвильової дії у вигляді поверхонь різної густини.

Модифіковані багатошарові поверхневі покриття, як зазначають [7,10,11], мають унікальний комплекс фізико-технічних властивостей: вищі корозійну та кавітаційну стійкість, більшу твердість, міцність, тощо. Мікротвердість, наприклад, у центральній зоні області плавлення досягає максимуму. Особливі властивості пояснюють [1, 4-7, 9] швидкістю охолодження та нагрівання матеріалу. Швидкісний нагрів зумовлює виникнення плазмової, газово-крапельної хмарини з газів, що десорбовані мішенню [12], оплавлених зерен, сублімованих, випаруваних окремих атомів. Відбувається відрив від основи зерен через швидке теплове

розширення, «струшування» ударними хвилями. Формування кратеру та хмарини розпочалось при температурах поверхні менших температури плавлення основи [11,13]. Розвиваються нерівності на поверхні, у приповерхневому шарі виникає перегріта рідина, яка дедалі нагріваючись, досягає границі своєї термодинамічної стабільності та зазнає "вибухового" фазового переходу до двофазної суміші пару та рідких крапель. Існує яскраво виражений поріг для ежекції капель, а також різке зростання швидкості абляції при досягненні порогової інтенсивності з врахуванням ефекту накопиченої дози, що інтерпретується як свідчення переходу від нормального випаровування до фазового вибуху. Зважаючи на виникнення значних температурних градієнтів та релаксації тиску в мішені, виникає гідродинамічне розпилення, яке супроводжується генерацією великих (у мікрометровому діапазоні) рідких крапель на поверхні. Емісія ще більших капель, зерен викликана термомеханічними ефектами: деформацією та руйнуванням матеріалу мішені внаслідок термопружних напруг, зумовлених електронним нагрівом. При швидкому нагріванні у мікросекундному діапазоні тривалостей імпульсу встановлення механічної рівноваги в об'ємі відбувається у режимі локалізації напруг.

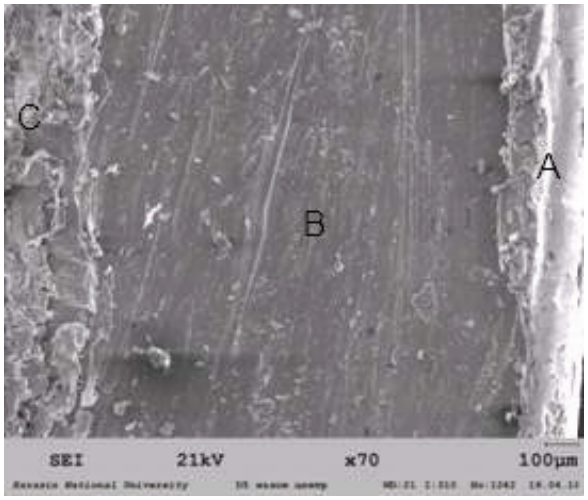


Рис.1. Фрактограма поперечного злому області у центрі кратера опроміненого зразка.

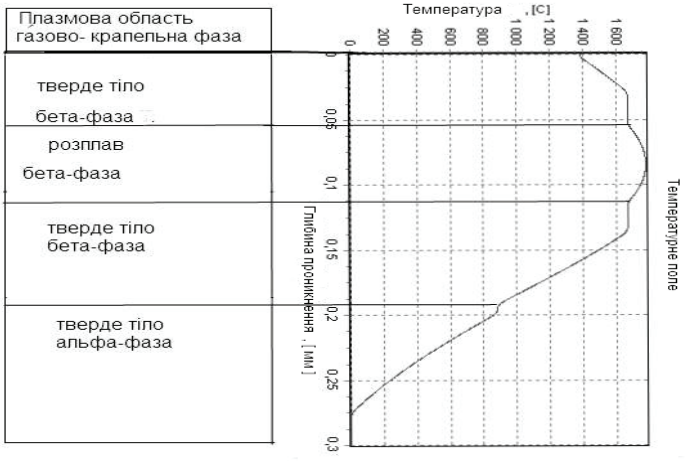


Рис.2. Шарова будова матеріалу після опромінення j=6$MA/м^2$.

Характерна глибина проникнення менша ніж глибина кратеру, згідно металографічних досліджень. Це пояснюється саме термомеханічним механізмом абляції: величина напруг може перевищити границю динамічної міцності на розрив матеріалу мішені, зумовлюючи утворення тріщини, розпилення рідини із області розплаву (рис.2, область розплаву β-фази). Користуючись результатами роботи [14], можна визначити, що область розплаву до виникнення тріщини є областю високого тиску до 3 ГПа. А на саму фокусну пляму діє тиск [10] утвореної плазми (5):

$$P = \omega(\gamma - 1), \tag{5}$$

де γ – відношення питомих теплоємностей твердого тіла та газово-плазмової хмарини, ω – об'ємна густина енергії. При розкритті тріщини відбувається різкий перепад тиску, внаслідок чого виникає кавітація, доспінодальний фазовий вибух (вибухове закипання). Прилегле до тріщини тверде тіло, яке формує її стінки, зазнає механічного руйнування та відколу, при цьому зносяться краї кратеру. Після завершення опромінення та релаксації механічних напружень, відбувається охолодження пластини, визначальним механізмом у формуванні мікроструктури є конденсація продуктів абляції.

Слід зазначити, що перевищення порогу фазового вибуху [14], можливе за швидкості нагрівання $V = 0,5GK/s$ (рис.3), тоді фазовий вибух, із врахуванням неоднорідності пучка та його можливої філаментації, є цілком ймовірним. Максимальна можлива швидкість нагрівання перевищує $V = 3,1GK/s$ (без філаментації пучка). Зі збільшенням тривалості опромінення, швидкість нагрівання має тенденцію до зменшення. Швидкість охолодження знаходимо за певної граничної умови (4). Швидке охолодження [4,6,7,10] поверхневої області пояснюється вибуховим розпадом та викидом із поверхні перегрітого матеріалу, що призводить до миттєвого перетворення кінетичної енергії теплового руху частинок у потенціальну енергію розпаду матеріалу та енергію направленого руху створеної хмаринки продуктів абляції. У найпростішому випадку, можна знехтувати конвекційним членом (b→0) у (4), а за граничну умову прийняти $T\big|_{x=0} = 0$, тоді отримаємо наступний профіль охолодження поверхні мішені (рис.4, А). Дане наближення не враховує того, що абляційні процеси продовжуються деякий час після опромінення, при цьому температура поверхні не знижується суттєво. У даному випадку (рис.4, В), за краєву умову можна прийняти (6):

$$\alpha \frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\bigg|_{x=0} + \beta T(x,t)\big|_{x=0} = \frac{q^{\max} t}{\tau}(t-\tau), \tag{6}$$

де $q^{\max}$ – максимальне значення густини теплового потоку, α – коефіцієнт теплопровідності сплаву, а β – коефіцієнт теплообміну.

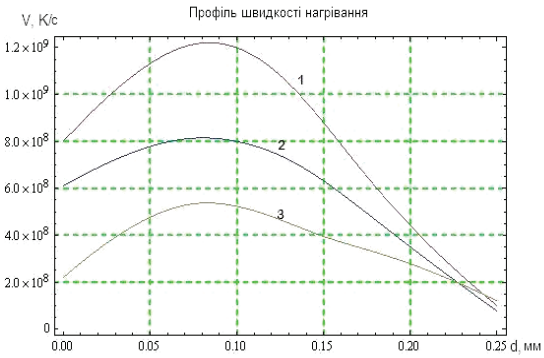


Рис.3. Профіль нагрівання при $j = 8MA/м^2$, де 1 – час опроміненя 100 нс; 2 – 1 мкс; 3 – 2мкс.

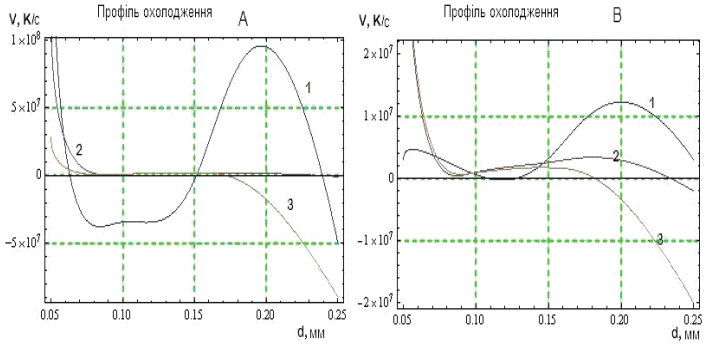


Рис.4. Профіль охолодження при $j = 4MA/м^2$, де 1 – час дифузії температурного поля 6 мкс; 2 – 10 мкс, 3 – 20 мкс. А-профіль без врахування продовження абляційних процесів після опромінення, В- профіль з їх врахуванням.

За такої умови, температура буде ще зростати залежно від густини потоку протягом (30…300) нс після завершення опромінення. Особливим механізмом утворення області переплаву є саме конденсація газово-крапельної фази на поверхню. Але недоліком даної моделі є нездатність визначення швидкості охолодження газової фази. Для виникнення належного покриття з властивостями області А шляхом конденсації газової фази, необхідна швидкість охолодження до 10^{14}К/с [4], що у рамках введеної моделі не є можливим. Зате конденсація рідкої фази зі швидкостями порядку $10^7 \div 10^9$К/с цілком описувана.

ВИСНОВКИ

Запропонована модель еволюції температурного поля в металевій мішені, що опромінюється сильнострумовим пучком релятивістських електронів узгоджується з експериментально встановленими перетвореннями внутрішнього структурно-фазового стану зразка зі сплаву ВТ 1-0. Властивості модифікованого за допомогою СРЕП зразка значною мірою пояснюються еволюцією теплового поля та ударно-хвильової дії. Визначальними у формуванні шарової приповерхневої структури є потужність, форма пучка, швидкості нагрівання та охолодження опроміненого зразку. Суттєвим для створення нових матеріалів за допомогою концентрованих потоків енергії є умова виникнення перегрітої рідини, що є причиною вибухового фазового переходу, та забезпечення охолодження, достатнього для фіксації метастабільних та аморфних фаз для досягнення необхідних механіко-технічних показників.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Vozdeystvie kontsentrirovanykh potokov energii na materialy / Spravochnik pod red. N.N. Rykalina.- M.: Nauka, 1989.-268s.
2. Belozerov V.V., Donets S.E., Klepikov V.F. i dr. Fiziko-mekhanicheskie svoystva staley 12Kh21N5T i 08Ch18N10T, obluchennykh sil'notochnym trubchatym relyativistskim elektronnym puchkom v rezhime ablyatsii // Fizicheskaya inzheneriya poverkhnosti. – 2011. - T.9, №2. - S.170-175.
3. Demidov B.A., Martynov A.I.. Eksperimental'noe issledovanie udarnykh voln, vozbuzhdaemykh s pomoshch'yu sil'notochnogo relyativistskogo elektronnogo puchka v metallakh // ZhETF. – 1981. - T.50, vyp.2. - S.738-744.
4. Akishin A.I. , Novikov L.S., Chernykh V.N.. Vozdeystvie na materialy i elementy oborudovanie kosmicheskikh apparatov vakuuma, chastits ionosfernoy plazmy i solnechnogo ul'trafioletovogo izlucheniya // Novye naukoemkie tekhnologii v tekhnike.- M.: ZAO NII «ENTsITEKh», 2000. - S.100-138.
5. Zhigiley L.V., Levegl' E., Ivanov D.S., Lin Zh., Volkov A.N.. Modelirovanie korotkoimpul'snoy lazernoy ablyatsii metodom molekulyarnoy dinamiki: mekhanizmy ezhektsii materiala i formirovaniya nanochastits // Teoreticheskie podkhody i modelirovanie protsessov. – 2009. - S.147-226.
6. Pathak K.A. Computational modeling of plume dynamics in multiple pulse laser ablation of carbon // University of Akron. - 2005.
7. Chernov I.P., Ivanova S.V., Krening M.Kh. i dr. Svoystva i strukturnoe sostoyanie poverkhnostnogo sloya tsirkonievogo splava, modifitsirovannogo impul'snym elektronnym puchkom i nasyshchennogo vodorodom // ZhTF. – 2012. - T.82, vyp.3. - S.81-87.
8. Gann V.V., den Khartog G.V. i dr. Issledovanie profilya energovydeleniya v NaCl pri elektronnom obluchenii //VANT. – 2005. - №5. - S.32-35.Nahen Kester, Vogel Alfred. Plume dynamics and shielding by the ablation plume during Er:YAG laser ablation // Journal of Biomedical Optics. – 2002. – Vol.7, №2. - P.163-178.
9. Kester N., Vogel A. Plume dynamics and shielding by the ablation plume during Er:YAG laser ablation //Journal of Biomedical

Optics. – 2002. – Vol.7, №2. - P.163-178.
10. Demidov B.A., Ivkin M.V., Obukhov V.V., Tomashchuk Yu.F. Dinamicheskie kharakteristiki vzaimodeystviya moshchnykh REP s tolstymi anodami // ZhTF. – 1980. – T.50, vyp.10. – S.2209-2214.
11. Donets S.E., Kivshik V.F., Klepikov V.F., Litvinenko V.V., Ponomarev A.G., Uvarov V.T. Ablyatsiya mednykh misheney pri obluchenii sil'notochnym trubchatym puchkom relyativistskikh elektronov //Fizika i khimiya obrabotki materialov. – 2011. - №2. - S.8-12.
12. Volkov N.B., Mayer A.E., Yalovets A.P. O mekhanizme krateroobrazovaniya na poverkhnosti tverdykh tel pri vozdeystvii intensivnykh puchkov zaryazhennykh chastits // ZhTF. – 2002. – T.72, vyp.8. - S.34-43.
13. Kovalevski S.D., Gilgenbach R.M., Ang L.K., Lau Y.Y. Dynamics of electron beam ablation of silicon dioxide measured by laser resonance absorption photography // Applied physics letters. – 1998. - Vol.73, №18. - P.2576-2578.
14. Martynyuk M. M., Tamanga P.A., Kravchenko N.Yu.. Diagramma sostoyaniy titana v oblasti fazovogo perekhoda zhidkost'-par // Vestnik RUDN, seriya fizika. – 2002. - №10, vyp.1. - S.121-125.

УДК 539.1.074.8

РАСЧЁТ ПРОСТОГО ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ЗАМЕДЛИТЕЛЯ ДЛЯ ДЕТЕКТОРА НЕЙТРОНОВ

А.Ю. Буки, С.А. Каленик
ННЦ "Харьковский физико-технический институт"
ул. Академическая 1, г. Харьков, Украина, 61108
E-mail: abuki@ukr.net
Received 6 April 2012, revised 26 April 2012

Проведено математическое моделирование прохождения нейтронов через полиэтиленовый цилиндрический замедлитель детектора нейтронов. Рассчитывалось количество тепловых нейтронов, попавших в расположенную по оси замедлителя газоразрядную трубку счётчика тепловых нейтронов. Для разных диаметров замедлителя получены зависимости эффективности регистрации от энергии налетающих нейтронов. Найден диаметр замедлителя, при котором эффективность регистрации довольно высока (около 10%) и практически постоянна для нейтронов с энергией от тепловых до 1 МэВ. Отмечается, что детектор с такими характеристиками является оптимальным для регистрации запаздывающих нейтронов деления и может быть использован в установках активационного анализа на содержание делящихся материалов.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: детектор нейтронов, счётчик нейтронов, нейтроны, нейтронные поля, математическое моделирование

CALCULATION OF A SIMPLE CYLINDRICAL MODERATOR FOR NEUTRON DETECTOR

A.Yu. Buki, S.A. Kalenik
NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"
1, Akademicheskaya st., Kharkov, Ukraine, 61108

Mathematical modeling of the passage of neutrons through cylindrical polyethylene moderator of neutron detector had been performed. Had been calculated amount of thermal neutrons that fall in located on the axis of the moderator gas discharge tube counters of thermal neutrons. For different diameters of the moderator the energy depending of the detection efficiency of incident neutrons had been obtained. Found the diameter of the moderator, in which the detection efficiency is quite high (10%) and nearly constant for neutrons with energies from thermal to 1 MeV. It is noted that a detector with these characteristics is optimal for the registration of delayed fission neutrons and can be used in installations of activation analysis for the content of fissionable materials.
KEY WORDS: neutron detector, neutron counter, neutrons, neutron fields, simulation

РОЗРАХУНОК ПРОСТОГО ЦИЛІНДРИЧНОГО СПОВІЛЬНЮВАЧА ДЛЯ ДЕТЕКТОРА НЕЙТРОНІВ

О.Ю. Буки, С.О. Каленик
ННЦ "Харківський фізико-технічний інститут"
вул. Академічна 1, м. Харків, Україна, 61108

Проведено математичне моделювання проходження нейтронів через поліетиленовий циліндричного сповільнювач детектора нейтронів. Розраховувалася кількість теплових нейтронів, що потрапили в розташовану по осі сповільнювача газорозрядну трубку лічильника теплових нейтронів. Для різних діаметрів сповільнювача отримані залежності ефективності реєстрації від енергії налітаючих нейтронів. Знайдено діаметр сповільнювача, при якому ефективність реєстрації досить висока (близько 10%) і практично постійна для нейтронів з енергією від теплових до 1 МеВ. Відзначається, що детектор з такими характеристиками є оптимальним для реєстрації запізнілих нейтронів ділення і може бути використаний в установках активаційного аналізу на вміст матеріалів, що діляться.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: детектор нейтронів, лічильник нейтронів, нейтрони, нейтронні поля, математичне моделювання

В экспериментальной и прикладной нейтронной физике наиболее часто используются детекторы нейтронов, состоящие из полиэтиленового замедлителя и расположенного внутри счётчика тепловых нейтронов (СТН). Обычно замедлитель имеет форму цилиндра, по оси которого расположена газоразрядная трубка СТН (рис.1), в которой ионизация газа происходит в результате реакции $n+^{10}B \rightarrow ^{4}He+^{7}Li+2{,}8$ МеВ или $n+^{3}He \rightarrow p+^{3}H+0{,}76$ МеВ. Для того, что бы эффективность регистрации нейтронов в некотором диапазоне энергий была постоянной, и этот диапазон был как можно более широким, в объёме полиэтиленового цилиндра делают различные полости и в конструкцию вводят элементы из нейтронопоглощающего вещества (кадмия). Замедлитель такого детектора должен обеспечить замедление быстрых нейтронов до тепловых и в то же время малое поглощение медленных нейтронов таким образом, чтобы количество дошедших до СТН отеплённых быстрых и медленных нейтронов почти не зависело от их начальной энергии и в результате все они были зарегистрированы счётчиком. Классическим примером такой конструкции является всеволновой детектор Хансона-Маккибена [1].

Целью настоящей работы является исследование зависимости от величины внешнего радиуса замедлителя, характеристик простейшего детектора нейтронов, состоящего из полиэтиленового цилиндрического замедлителя и расположенной внутри него трубки газоразрядного счётчика нейтронов.

© Buki A.Yu., Kalenik S.A., 2012

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НЕЙТРОНОВ С ВЕЩЕСТВОМ ЗАМЕДЛИТЕЛЯ

Взаимодействие быстрых нейтронов с веществом почти полностью определяется процессом упругого рассеяния на атомных ядрах, в результате которого нейтроны замедляются. Многократное упругое рассеяние нейтронов понижает их энергии до тепловых (отепление нейтронов). В случае же медленных нейтронов существенным является взаимодействие, при котором нейтроны поглощаются ядрами. Поэтому с увеличением размеров замедлителя в результате упругого рассеяния на ядрах растёт количество отеплённых нейтронов, бывших вначале быстрыми, но в результате реакций поглощения уменьшается количество изначально медленных нейтронов. Кроме этих двух процессов происходит утечка нейтронов через внешнюю поверхность замедлителя. Вклад этой утечки в динамику нейтронов внутри замедлителя определяется величиной отношения площади внешней поверхности замедлителя к его массе, т.е. его формой и размерами, а так же длиной свободного пробега нейтрона у поверхности замедлителя, которая зависит от состава его вещества и энергии нейтронов.

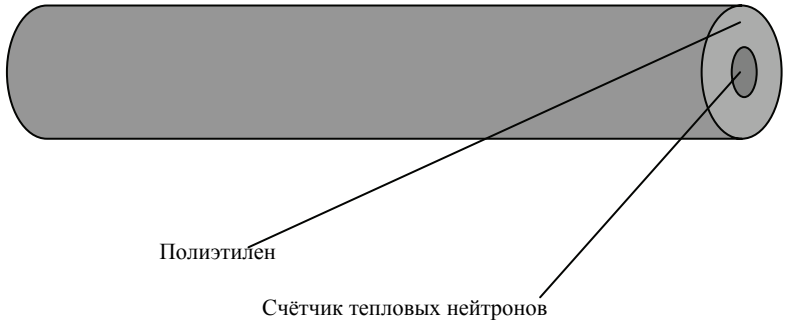


Рис.1. Цилиндрический детектор нейтронов.

РАСЧЁТЫ ТРАНСПОРТА НЕЙТРОНОВ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ ЗАМЕДЛИТЕЛЕ

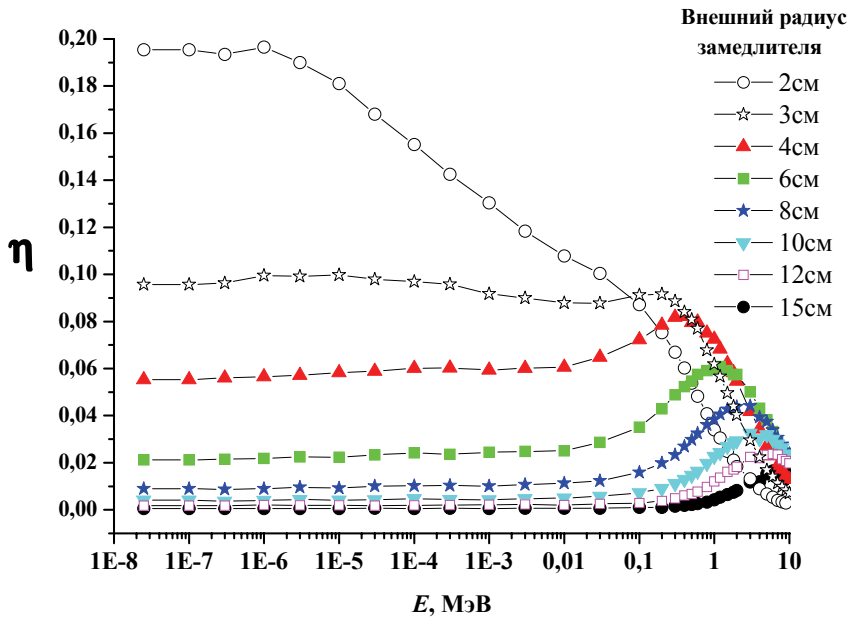


Рис.2. Зависимость эффективности регистрации нейтронов от их энергии для различных внешних радиусов замедлителя R.

Подобные задачи решаются методами численного моделирования, в которых с помощью розыгрыша по Монте Карло рассчитывается прохождение каждого нейтрона через вещество. В результате проведения таких расчётов для большого количества нейтронов можно получить статистически достоверные характеристики потока нейтронов в интересующей нас области пространства. Вычислительные программы такого типа были разработаны и протестированы нами для нейтронов с энергией до 10 МеВ [2,3]. Используемые в этих программах нейтронные сечения взяты из базы данных ENDF [4], которую использует для своих расчетов и популярный пакет GEANT. С помощью вышеуказанных программ проводились расчёты количества попавших на трубку СТН тепловых нейтронов[1]. Отношение количества этих нейтронов к количеству нейтронов попавших на замедлитель (η') является эффективностью замедлителя. Современные СТН регистрируют около (80 ÷ 100)% попавших на них тепловых нейтронов и поэтому примем эффективность детектора $\eta = 0{,}8\eta'$. На рис.2 показаны зависимости величины η от энергии первичных нейтронов для цилиндрических полиэтиленовых замедлителей с внешними радиусами R от 2 до 15 см. Видно, что в рассматриваемом диапазоне энергий эффективность регистрации нейтронов

1/ Применение этих программ, связано с тем, что с их помощью вычисления настоящей работы требовали значительно меньше времени, чем при использовании пакета GEANT4.

изменяется в широких пределах. Однако, в более узком диапазоне энергий эта зависимость довольно слаба для случаев R = 3 см и 4 см. Расчёты η(E) для значений R от 3 см до 4 см показали, что при R = 3,4 см в диапазоне энергий нейтронов от 10^{-8} МэВ до 1 МэВ имеют место наименьшие вариации эффективности – δη = ±10%, при этом среднее значение эффективности η около 0,08 (рис.3).

Все вышеприведенные расчёты выполнены для нейтронов, падающих на детектор перпендикулярно к его оси (угол падения θ = 0°). Для практических задач интересен случай прихода на детектор нейтронов под разными углами и, в частности, от источника, излучающего на детектор нейтроны в некотором диапазоне углов. Расчёт для усреднённого в диапазоне θ = ± 45° изотропного излучения приходящего на детектор, показан на рис.3. В этом случае, по сравнению с θ = 0°, величина δη почти не изменилась, а η уменьшилась на 6%.

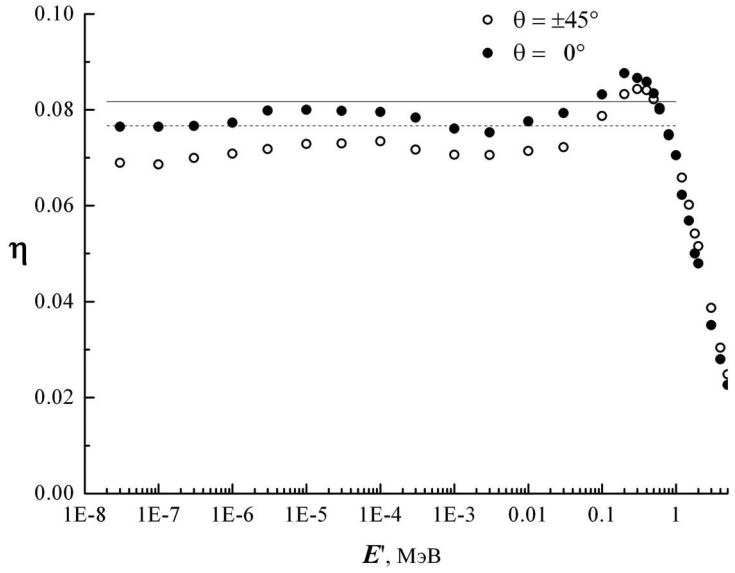


Рис.3. То же, что на рис.2, для R = 3,4 см.. Сплошная прямая соответствует среднему между минимумом и максимумом значений **η** при E < 1 МэВ и угле падения нейтронов на детектор θ = 0°, штриховая – такие же значения **η**, но для изотропного излучения усреднённого по θ от -45°до +45°.

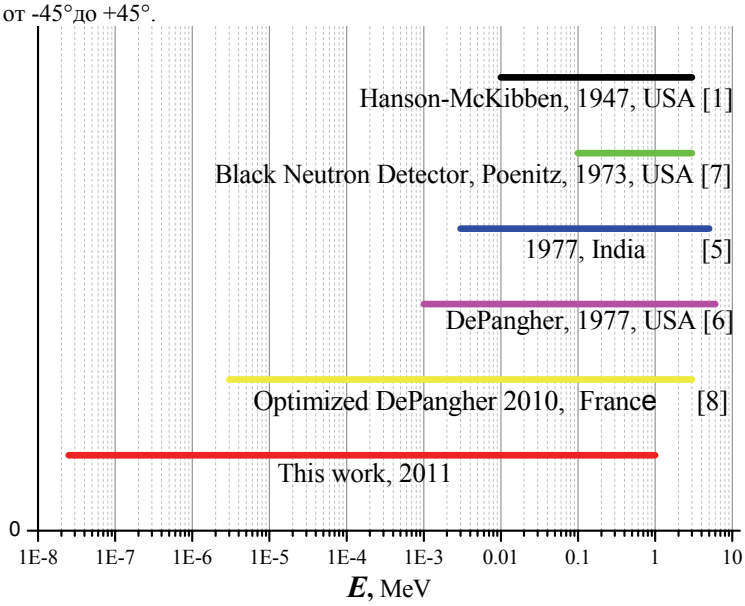


Рис.4. Рабочий диапазон энергий различных детекторов нейтронов.

ОБСУЖДЕНИЕ

Сравним результаты нашего расчёта с характеристиками других существующих детекторов нейтронов представленных в работах [1,5,6,7,8]. В рабочем диапазоне энергий у всех этих детекторов вариации эффективности около 10%, то есть, как и в нашем случае, а значения самой эффективности 0,1 и меньше. Что же касается их рабочих диапазонов энергий, то они различны – рис.4. Как видно из этого рисунка наш расчёт уступает другим, конструктивно более сложным, детекторам только по значению максимальной энергии рабочего диапазона. Из рис.2 видно, что в случае R = 3÷4 см. именно ограничение рабочего диапазона max(E) ≈ 1 МэВ приводит к хорошим значениям величины δη вплоть до E = 10^{-8} МэВ. В связи с этим отметим, что, как показывает рис.3, при ограничении max(E) = $0{,}8\cdot10^{-1}$ МэВ достигается величина разброса δη = ±3%.

Вероятно существует не одна задача, где возможно применение рассматриваемого детектора нейтронов. Однако одна весьма важная задача для такого детектора очевидна. Это регистрация запаздывающих нейтронов деления в гамма- и нейтрон-активационном анализе на содержание в объекте делящихся материалов. Дело в том, что средняя энергия запаздывающих нейтронов деления E_n < 0,5 МэВ, а когда эти нейтроны по пути к детектору проходят через вещество матрицы, то, если она велика, их энергия уменьшается и иногда на несколько порядков. Кроме этого, в случае объёмных объектов (в промышленной установке) чувствительность и точность анализа зависит от количества нейтронных детекторов расположенных вокруг объекта. Отсюда видно, что и по рабочему диапазону энергий, и по простоте конструкции и дешевизне рассматриваемый детектор наилучшим образом подходит для задачи активационного анализа.

ВЫВОДЫ

1. Расчёты полиэтиленового цилиндрического замедлителя детектора нейтронов показали

а) получено оптимальное значение внешнего радиуса замедлителя;

б) этому радиусу соответствует рабочий диапазон энергий детектора нейтронов от 10^{-8} МэВ до 1 МэВ со средней эффективностью $\eta \geq 0{,}08$ и вариациями эффективности до $\delta\eta = \pm 10\%$.

2. Детектор нейтронов с вышеуказанными параметрами наилучшим образом подходит для решения задач активационного анализа на содержание в объекте делящихся материалов.

3. Ввиду практической ценности результатов расчёта планируется экспериментальная проверка полученных данных и калибровка счётчика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hanson A.O., McKibben J.L. Neutron Detector Having Uniform Sensitivity from 10 Kev to 3 Mev // Phys. Rev. – 1947. - Vol.72. - P.673–677.
2. Buki A.Yu., Kalenik S.A., Shapoval I.M. Simplified transportation model of thermal neutrons through the matter // VANT. – 2011. - №3(55). - P.50-53.
3. Buki A.Yu., Kalenik S.A. A simple model of neutron transport and its application for the calculation of the response functions for the ball neutron spectrometer // The Journal of Kharkiv National University physical series: Nuclei, Particles, Fields. – 2012. - №991. – Iss. 1(53). P.23-27.
4. http://www.nndc.bnl.gov
5. Kamboj B.K., Shahani M.G., Phadnis U.V. Establishment of a precision long counter as a secondary standard for fast neutron flux density measurement // Bhabha Atomic Research Centre, Bombay (India), Report, 1977, 5p.
6. Slaughter D.R., Rueppel D.W. Calibration of a dePangher long counter from 2 keV to 19 MeV // Nuclear Instruments and Methods. – 1977. - Vol.145(2). - P.315-320.
7. Poenitz W.P. The black neutron detector // Nuclear Instruments and Methods. – 1977. - Vol.109. - P.413-420.
8. Lacoste V. Design of a new long counter for the determination of the neutron fluence reference values at the IRSN AMANDE facility // Radiation Measurements. – 2010. - Vol.45(10). - P.1250-1253.

УДК 548.1:533.9

ДИФФУЗИЯ В ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ ОКСИДНЫХ ВКЛЮЧЕНИЙ В ДИСПЕРСНОУПРОЧНЕННОМ α-Fe

В.Г. Кириченко[1], О.В. Коваленко[1], М.Г. Компанеец[2], В.Н. Леонов[1]
[1]*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина*
61108, г. Харьков, пр. Курчатова, 31
[2]*Goethe-Universität Frankfurt*
Senckenberganlage 31, 60325, Frankfurt am Main
E-mail: val_kir48@mail.ru
Received 20 March 2012, accepted 14 May 2012

Представлены результаты анализа концентрационных зависимостей элементного состава включений и матрицы для определения сравнительных значений коэффициентов диффузии в дисперсноупрочненных сплавах на основе железа. Численным моделированием по двумерным данным получена трехмерная форма оксидных включений. Определены значения для D_{Al}, D_Y в железе с привлечением литературных данных по диффузии железа в различных температурных диапазонах. По полученным данным, коэффициенты диффузии элементов включения (Y, Al, Ti) в случае модельной системы выше, чем коэффициент самодиффузии железа.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: железо, наночастицы, оксиды, иттрий, структура, фазовый состав, диффузия.

DIFFUSION IN THE SURFACE LAYERS OF OXIDE INCLUSIONS IN DISPERSE STRENGTHENING α-Fe

V.G. Kirichenko[1], O.V. Kovalenko[1], M.G. Kompaniiets[2], V.N. Leonov[1]
[1]*Kharkov Karazin National University*
31 Kurchatov St., Kharkov, 61108
[2]*Goethe-Universität Frankfurt*
Senckenberganlage 31, 60325, Frankfurt am Main
The results of the concentration dependence analyzing of the inclusions elemental composition and the matrix to determine the comparative values of diffusion coefficients in disperse strengthening α-iron. Numerical simulation of two-dimensional data is allowed to obtain the three-dimensional forms of oxide inclusions. The values for D_{Al}, D_Y in the iron, involving published data on the diffusion of iron in different temperature ranges. According to our data, the diffusion coefficients of the elements included (Y, Al, Ti) in the case of the model system is higher than the self-diffusion coefficient of iron.
KEY WORDS: iron, nanoparticles, oxide, yttrium, structure, phase composition, diffusion.

ДИФУЗІЯ В ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРАХ ОКСИДНИХ ВКЛЮЧЕНЬ У ДИСПЕРСНОЗМІЦНЕНОМУ α -Fe

В.Г. Кіріченко[1], О.В. Коваленко[1], М.Г. Компанієц[2], В.М. Леонов[1]
[1]*Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна*
61108, м. Харків, пр. Курчатова, 31
[2] *Goethe-Universität Frankfurt*
Senckenberganlage 31, 60325, Frankfurt am Main
Представлені результати аналізу концентраційних залежностей елементного складу включень і матриці для визначення порівняльних значень коефіцієнтів дифузії в дісперснозміцненому α- залізі. Чисельним моделюванням за двовимірними даними отримана тривимірна форма оксидних включень. Визначено значення для D_{Al}, D_Y в залізі із залученням літературних даних по дифузії заліза в різних температурних діапазонах. За отриманими даними, коефіцієнти дифузії елементів включення (Y, Al, Ti) у випадку модельної системи вище, ніж коефіцієнт самодифузії заліза.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: залізо, наночастинки, оксиди, ітрій, структура, фазовий склад, дифузія.

В современной атомной промышленности на основе многолетних исследований дисперсионно - упрочненных систем, в частности сплавов на основе железа, разнообразных материалов с добавками дисперсных микроструктур, широко применяются нанотехнологии и наноматериалы[1, 2].

Важной проблемой является повышение радиационной стойкости оболочек ТВЭЛов. Для решения этой проблемы создан новый класс конструкционных материалов для элементов активной зоны ядерных реакторов – феррито - мартенситные радиационно - стойкие стали, упрочненные высокодисперсными нанометрическими частицами оксидов ДУО стали (дисперсно упрочненные оксидами стали). Технологии производства ДУО сталей разнообразны и включают в себя различные стадии их получения для создания в матрице стали выделений нанометрических оксидов [3-7]. В этих работах показано, что процессы формирования наноструктурированных ДУО сталей позволяют достигать высокого остаточного удлинения, увеличения жаропрочности по сравнению с применяемой сталью. Важным вопросом является структура переходного слоя на границе «включение-матрица».

Целью работы являлся анализ взаимодействия неметаллических включений (оксидов) и процессов диффузии элементов в приповерхностном слое при формировании включений модельных систем дисперсных оксидных частиц в матрице альфа-железа.

© Kirichenko V.G., Kovalenko O.V., Kompaniiets M.G., Leonov V.N., 2012

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Системы готовили методами механического смешивания, прессования и вакуумной плавки, использовали высокочистое мелкодисперсное порошковое карбонильное железо и наночастицы (размером 50-100 нм) оксидов иттрия и алюминия. Металлографический анализ проводили с помощью микроскопа FEI Nova NanoLab 600. Анализ поверхности образцов производили с помощью электронно-ионного сканирующего микроскопа Quanta 3D. На рис. 1 представлены микрофотографии, демонстрирующие значительное увеличение размеров оксидных включений при увеличении содержания оксида иттрия.

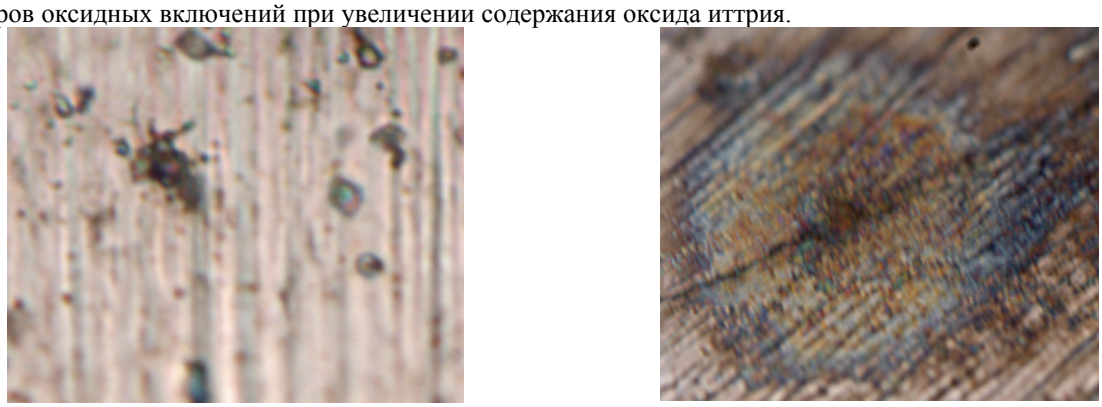


Рис. 1. Микрофотографии образцов с содержанием оксида иттрия 0,1 вес% (слева) и 1 вес.% (справа). x100

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведены микроструктура включения и его элементный состав по сечению включения - система представлена набором оксидов в ферритной матрице размером до 10 мкм. Данные по элементному составу включений дают следующую формулу оксида иттрия: $Y_2O_{2,73}$, что свидетельствует об уходе атомов кислорода в пограничный слой «включение – матрица». Для получения трехмерной формы включения (рис. 3) использовали исходный массив экспериментальных данных по распределению элементов по поперечному сечению микронной частицы оксида и программу построения 3D объектов по двумерному изображению (рис. 2) включения с помощью программы «Harvard Chart XL».

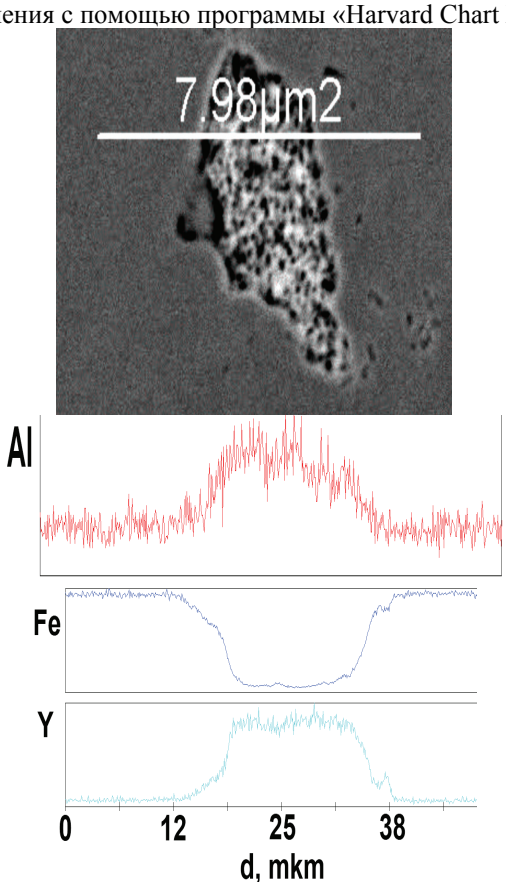


Рис. 2. Распределение элементов по поперечному сечению оксидного включения

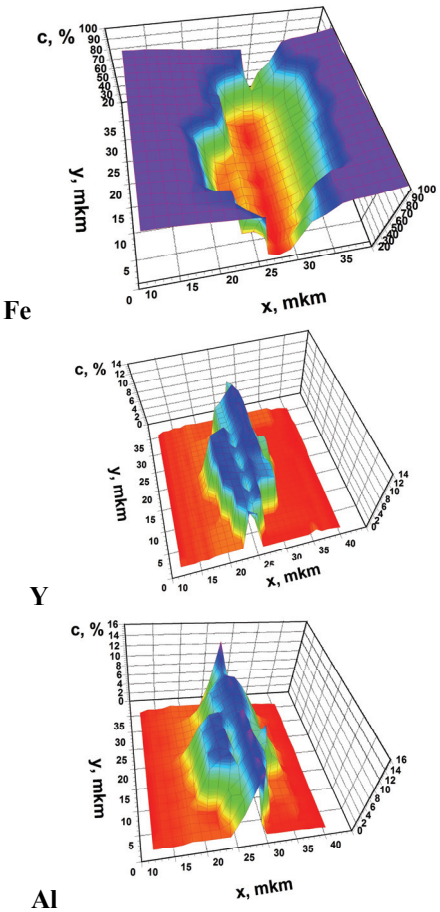
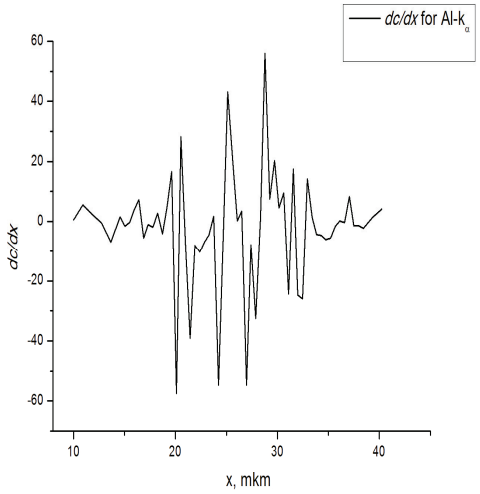
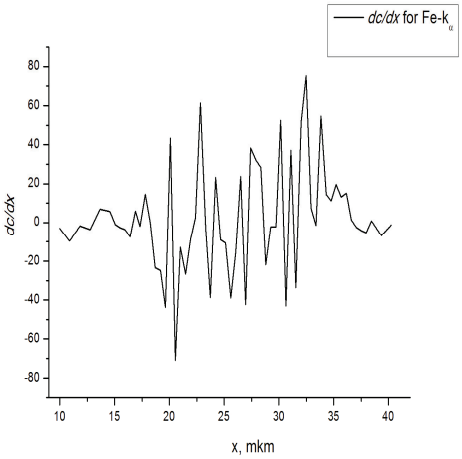


Рис. 3. Трехмерная форма включения в виде 3D - распределений концентрации железа, иттрия и алюминия в оксидном включении

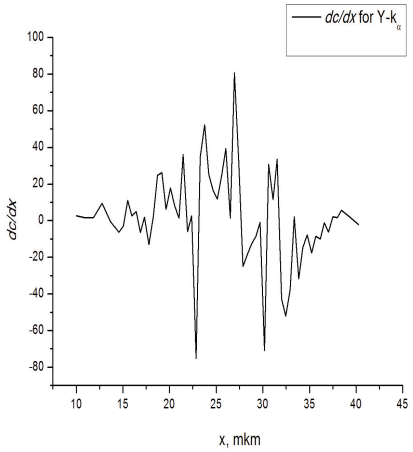
Как видно в частице уменьшается концентрация железа и увеличивается концентрация алюминия и иттрия. Изменение концентрации элементов, является неоднородным. Наблюдаемые значения распределения железа по полости включения имеют ступенчатую структуру, что связано с наличием границ во включении. Характер изменения концентрации элементов по поперечному сечению включения уточнили путем нахождения градиентов концентрации по сечению включения оксида (рис. 4).



Al



Fe



Y

Рис. 4. Градиенты концентрации железа, иттрия и алюминия по сечению включения

В качестве градиента концентрации используем простое соотношение: $\frac{dc}{dx} = \frac{c_i - c_j}{x_i - x_j}$ для пар ближайших точек в распределениях рис. 1. Полученные значения градиента концентрации (рис. 4) имеют резкие пики и разрывы подтверждающие наличие значительного числа мелких частиц в крупном комплексном включении. Значения градиентов распределения элементов по сечению включения свидетельствуют о симбатном поведении концентраций основного металла матрицы – железа и компонент оксида по сечению включения, что может говорить об участии атомов железа в процессе массопереноса и позволяет определить диффузионные параметры компонент в процессе формирования нанооксидных частиц, коагуляции частиц.

Как известно, иттрий, скандий, и другие элементы – нерастворимые или малорастворимые в кристаллическом железе, обнаруживают непрерывные или весьма широкие области жидких растворов с железом [8]. Гильдебрандт предложил следующий критерий несмешиваемости жидких регулярных растворов. Если теплота смешения $\frac{1}{2}(V_A+V_B)(\delta_A-\delta_B)^2 > 2RT$ (V_A, V_B – молярные объемы компонентов А и В, а δ_A, δ_B – их параметры растворимости, $\delta = \sqrt{\Delta H_{ИСП}/V}$, то должно существовать расслоение. Критерий Гильдебрандта указывает на то, что при большой разнице теплот испарения компонентов А и В более низкая свободная энергия отвечает связям А – А и В – В, а не связям А – В, что приводит к расслоению. Критерий справедлив для металлов, нерастворяющихся в железе, но часто предсказывает несмешиваемость там, где существует растворимость.

Растворимость в жидком железе легких элементов, таких как кислород, обусловлена, как и в твердом состоянии, образованием жидких растворов внедрения. Критериями растворимости в этом случае являются: 1) повышенная способность жидкого железа по сравнению с твердым ионизировать атомы легких элементов и 2) достаточно малый размер образующихся катионов, обеспечивающий их размещение в октаэдрических пустотах микрообластей ближнего порядка жидкого железа.

Судя по потенциалам ионизации и ионным радиусам кислорода [8], кислород в железе мало растворим, поэтому атомы кислорода не уходят в железо из включения.

Известно, что в первую очередь процессы растворения и диффузии определяются взаимодействием атомов диффундирующих видов с дефектами кристаллической решетки твердого тела и подвижностью этих дефектов (вакансий, междоузельных атомов, дислокаций и т.п.).

Кратко опишем методику анализа концентрационных зависимостей элементного состава включений и матрицы (рис. 2,3,4) для определения сравнительных значений коэффициентов диффузии в приповерхностном слое включений. Диффузионные процессы характеризуются дуализмом кинетических и термодинамических свойств, связаных с реальным строением вещества и, зависят от структуры металлов и сплавов, находящихся в неравновесном состоянии, особенно в приповерхностных слоях [9]. В ДУО-сталях наиболее важны приповерхностные слои неметаллических нанометрических включений в металлической матрице на границе «включение–матрица».

Как и в случае [10] для распределения атомов элементов участвующих в формировании приповерхностного пограничного слоя в системе «включение–матрица» можно записать для концентрации C и коэффициента диффузии D:

$$C(x,t) = \frac{C_o}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{\pi^2}{4Dt}\right).$$

Так как в нашем случае формирования и коагуляции нанометрических оксидных включений временные (*t*) и пространственные (*x)* интервалы достаточно малы, то при использовании уравнения Фика **J = -∇C** и выполнении условия, что диффузия обусловлена только вызывающим массоперенос градиентом концентрации диффундирующих атомов [11]. В нашем случае при формировании пограничного слоя в системе «включение – матрица» (рис. 2) выполняется баланс массопереноса атомов железа и атомов элементов входящих в состав включения.в пренебрежении другими факторами (градиенты механических напряжений или электрического поля). Коэффициент диффузии связан с энергией активации по формуле Аррениуса только в простейшем случае. Тем не менее, представляется возможным определение значений коэффициентов диффузии D_{Al}, D_Y в железе, а также D_{Ti}, D_{Cr}, D_Y с привлечением литературных данных о самодиффузии железа в различных температурных диапазонах.

Коэффициенты диффузии определялись путем решения системы линейных уравнений, определяющих равенство диффузионных потоков в теле включения:

$$D_{Fe}^{i}\left(\frac{dc}{dx}\right)_{Fe}^{i} = x_i D_{Al}^{i}\left(\frac{dc}{dx}\right)_{Al}^{i} + y_i D_Y^i \left(\frac{dc}{dx}\right)_Y^i, \qquad (1)$$

где x_i, y_i – парциальные коэффициенты, определяющие суммарный поток частиц в направлении, противоположном движению частиц железа.

Модельная система была получена при температурах 1500-1550 °C. Система на основе нанодисперсных частиц была приготовлена механическим перемешиванием при 1150 °C. Коэффициент диффузии железа при 1500-1550 °C составляют величину – 10^{-4} см^3/с [12] (рис. 5), а при 1150 °C – $5{,}7\cdot10^{-9}$ см^3/с [12].

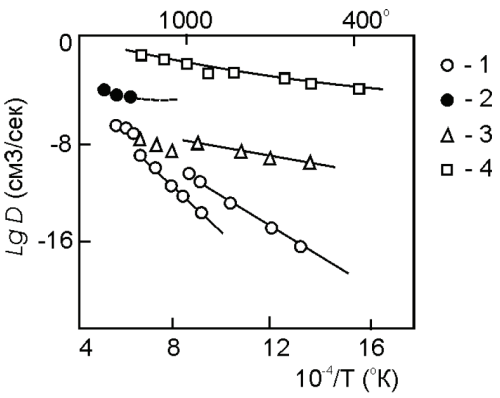


Рис. 5. Температурная зависимость коэффициентов самодиффузии в железе: 1 – стационарный изотермический отжиг, 2 – жидкое состояние, 3 – механическое нагружение, 4 – импульсное нагружение [13]

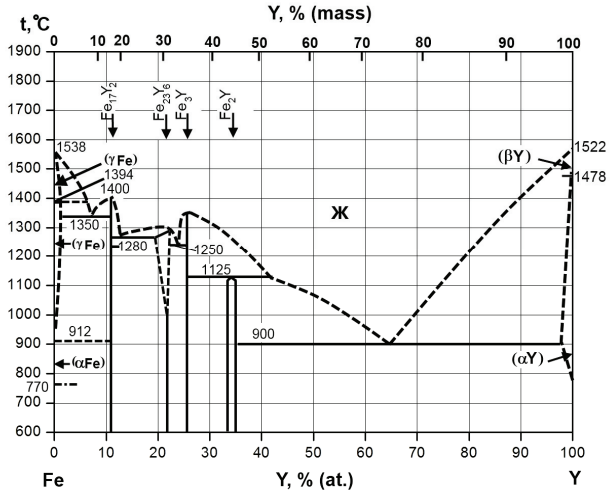


Рис. 6. Диаграмма состояния Fe-Y

Эти результаты качественно подтверждает вид и структура диаграмм состояния систем железо-иттрий и железо-алюминий (рис. 6). На основе этих данных и уравнения (1) были рассчитаны эффективные коэффициенты диффузии элементов, входящих в состав оксидов при температурах 1500-1550 °C (рис. 7, 8) и формирующих нанодисперсные оксиды при температуре 1150 °C (рис. 9, 10).

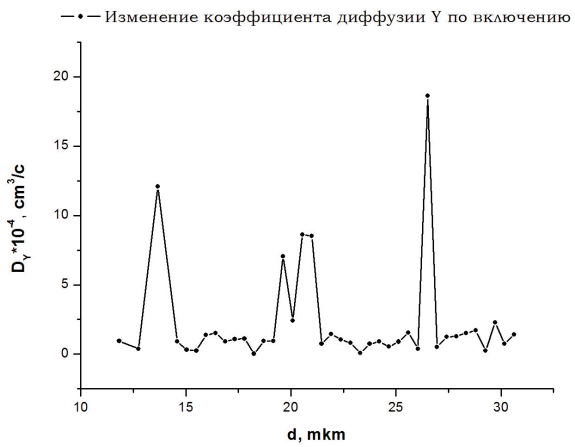


Рис. 7. Распределение эффективных коэффициентов диффузии иттрия по сечению включения для системы, полученной при T =1500-1550 °C

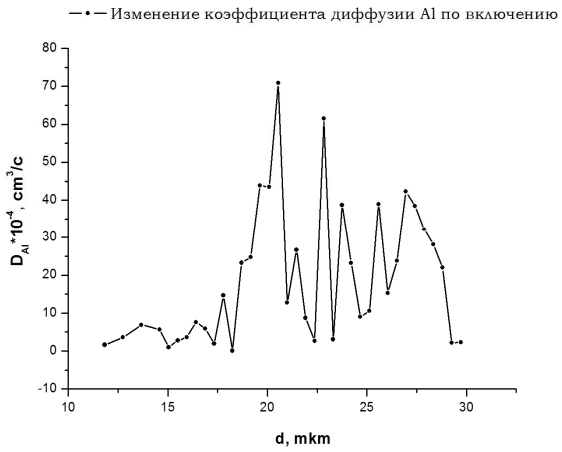


Рис. 8. Распределение эффективных коэффициентов диффузии алюминия по сечению включения для системы, полученной при T =1500-1550 °C

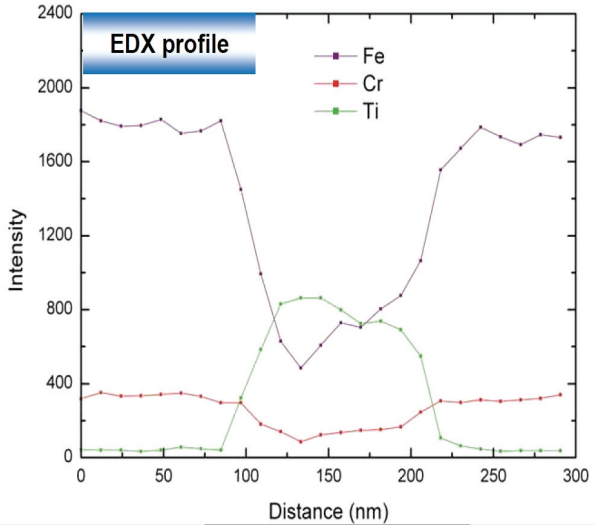


Рис.9. Распределение элементов по сечению включения для системы, полученной при T = 1150 °C [13]

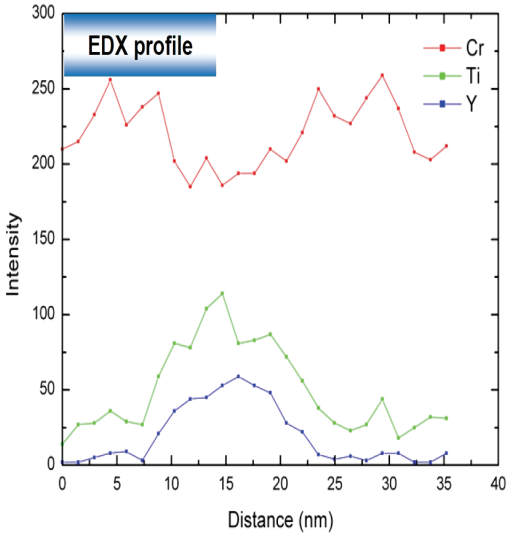


Рис. 10. Распределение элементов по сечению включения для системы, полученной при T = 1150 °C [13]

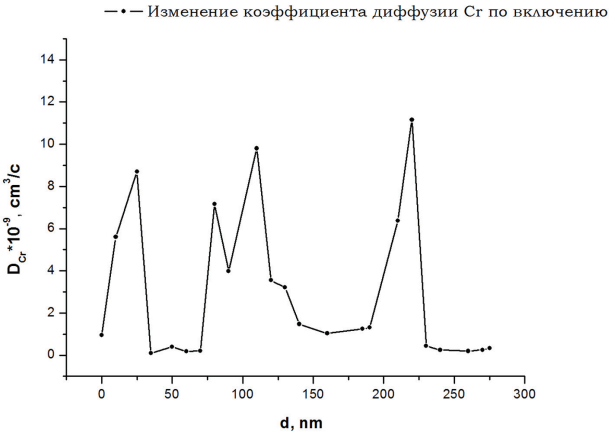


Рис. 11. Распределение эффективных коэффициентов диффузии хрома по сечению включения для системы, полученной при T = 1150 °C.

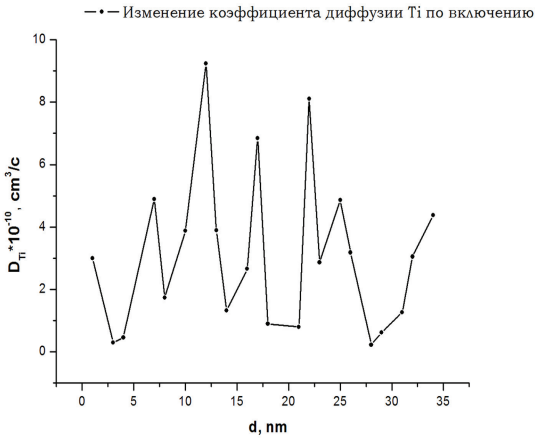


Рис. 12. Распределение эффективных коэффициентов диффузии титана по сечению включения для системы, полученной при T = 1150 °C.

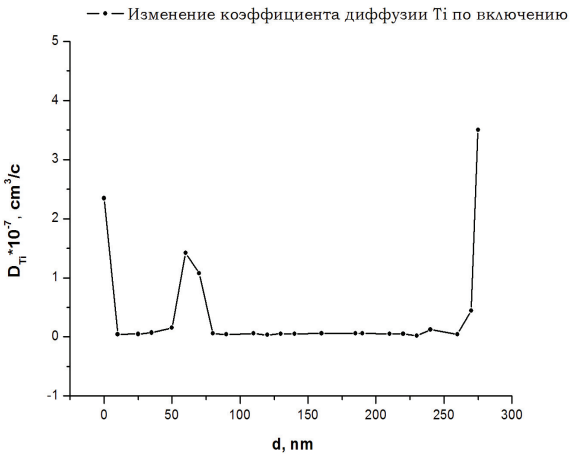


Рис. 13. Распределение эффективных коэффициентов диффузии титана по сечению включения для системы, полученной при T = 1150 °C.

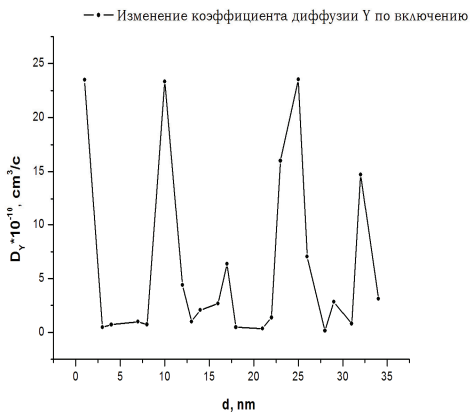


Рис. 14. Распределение эффективных коэффициентов диффузии иттрия по сечению включения для системы, полученной при T = 1150 °C.

Полученные средние значения эффективных коэффициентов диффузии указанных элементов (рис. 11-14, таблица) составляют: для модельной системы – $D_Y = 2{,}26\cdot10^{-4}$ $см^3/с$, $D_{Al} = 20{,}5\cdot10^{-4}$ $см^3/с$; для системы наночастиц – $D_{Cr} = 2{,}95\cdot10^{-9}$ $см^3/с$, $D_{Ti} = 4{,}29\cdot10^{-8}$ $см^3/с$, $D_Y = 6.21\cdot10^{-10}$ $см^3/с$. Как видно из этих данных, коэффициенты диффузии элементов включения в случае модельной системы выше, чем у железа, а в случае нанометрических частиц отличаются по величине на порядок.

Таблица

Значения эффективных коэффициентов диффузии

Способ получения	T получения, °C	D_{Fe}, $см^3/с$	D_Y, $см^3/с$	D_{Al}, $см^3/с$	D_{Cr}, $см^3/с$	D_{Ti}, $см^3/с$
Плавка	1540	10^{-4}	$2{,}26\cdot10^{-4}$	$20{,}51\cdot10^{-4}$		
Твердофазная обработка	1150	$5{,}7\cdot10^{-9}$	$6{,}21\cdot10^{-10}$		$2{,}95\cdot10^{-9}$	$4{,}29\cdot10^{-8}$

ВЫВОДЫ

Полученные експериментально концентрационные зависимости элементного состава включений и матрицы использованы для определения сравнительных значений коэффициентов диффузии. Численным моделированием по двумерным данным получена трехмерная форма оксидных включений. Определены значения для D_{Al}, D_Y в железе с привлечением литературных данных по диффузии железа в различных температурных диапазонах. Как видно из этих данных, коэффициенты диффузии элементов включения в случае модельной системы выше, чем у железа, а в случае нанометрических частиц отличаются по величине на порядок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Azarenkov N.A., Voevodin V.N., Kirichenko V.G., Kovtun G.P. Perspektivy primeneniya nanostrukturnykh materialov v atomnoy energetike // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. -2010- №887–Iss.1(45). - S.4-24.
2. Hsiung L., Fluss M., Tumey S., Marian J., Kimura A., Willaime F., Serruys Y. Materials Modeling in Nuclear Energy Environment: State of Art and Beyond // SMoRE CRP, PARIS. May 31 to June 4, 2010.
3. 3. Putilov A.V. Razrabotki FGUP VNIINM v oblasti nanotekhnologiy i nanomaterialov dlya atomnoy otrasli // Rossiyskie nanotekhnologii. - 2007. - T.2, № 9-10. - S. 6-11.
4. Ivanova I.I., Demidik A.N. Ferritnye dispersno-uprochnennye stali dlya goryachey zony reaktorov na bystrykh neytronakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnoe materialovedenie. - 2001. - №4(80). - S. 65-68.
5. Ageev V.S., Nikitina A.A., Sagaradze V.V., Safronov B.V., Chukanov A.P., Tsvelev V.V. Ispol'zovanie metodov metallurgii raspylennykh i bystrozakalennykh poroshkov dlya izgotovleniya obolochek TVELov iz dispersno-uprochnennykh oksidami (DUO) zharoprochnykh ferritno-martensitnykh staley // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnoe materialovedenie. - 2007. - №. 2(90). - S. 134-141.

6. Okuda T., Fujiwara M. Dispersion behaviour of oxide particles in mechanically alloyed ODS steel // Journal of Materials Science Letters. – 1995. – Vol.14. - P. 1600-1603.
7. Mukhopadhyay D.K.H. Roes F.F., Gelles D.S. Development of oxide dispersion strengthened ferritic steel for fusion // J. Nucl. Mater. - 1998. - Vol. 258-263. - P. 1209-1215.
8. Grigorovich V.K. Elektronnoe stroenie i termodinamika splavov zheleza. – M.: Nauka, 1970.
9. Bokshteyn S.Z. Diffuziya i struktura metallov. - M.: Metallurgiya, 1973. –206 s.
10. Dekhtyar I.Ya., Mikhalenkov V.S., Pilipenko V.V., Silant'ev V.I. Izuchenie diffuzii ksenona v serebre // Sb. «Diffuzionnye protsessy v metallakh». – Kiev: Naukova Dumka. –1968. –S. 54–60.
11. Kaur I., Gust V. Diffuziya po granitsam zeren i faz. - M.: Mashinostroenie, 1991. – 446 s.
12. Larikov L.N., Mazanko V.F., Nosar' A.I., Fal'chenko V.M. Diffuziya v tverdom tele s uchetom izmeneniya ego razmerov // Ukrainskiy fizicheskiy zhurnal. - 1977. – T. 22, №9. - S. 1518-1522.
13. 1st International Workshop on Dispersion Strengthened Steels for Advanced Nuclear Applications. DIANA I. Centre CNRS Paul Langevin, Aussois, France, April 4-8, 2011.-403 p.

УДК 548.1:533.9

THE STRUCTURE OF NANOMETRIC FERRITE'S FILMS AFTER ION IMPLANTATION

V.G. Kirichenko, O.V. Kovalenko
Kharkov National University, High Technology Institute
31 Kurchatov St., Kharkov, 61108, Ukraine
E-mail: val_kir48@mail.ru
Received 20 March 2012, accepted 12 May 2012

The results of study of hexaferrite Ba and Bi-Gd garnet films on gadolinium gallium garnet substrates are presented. In the result of ion-beam induced deposition the amorphous paramagnetic films of Ba-hexaferrite and Bismuth gadolinium garnet film are formed on substrate surface and then under the thermal annealing they transform their state into magnetically ordered one. For the easy magnetization axis to turn into the film plane the most efficient makes is ion beam implantation of He^+ ions.
KEY WORDS: thin films, element and phase composition, hexaferrite Ba, Bi-Gd garnet, spectroscopy.

СТРУКТУРА НАНОМЕТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ФЕРРИТОВ ПОСЛЕ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

В.Г. Кириченко, О.В. Коваленко
Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, Институт высоких технологий
61108, г. Харьков, пр. Курчатова, 31

Представлены результаты исследования процессов формирования пленок гексаферрита Ba и Bi-Gd граната на подложках галлий - гадолиниевого граната. В результате ионно-лучевого осаждения на поверхности подложек образуются аморфные парамагнитные пленки гексаферрита Ba и висмут - гадолиниевого граната с последующей кристаллизацией магнитоупорядоченных пленок при термическом отжиге и ионной имплантации. Для поворота оси легкого намагничивания в плоскость пленки наиболее эффективна ионная имплантация ионов He^+.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: тонкие пленки, элементный и фазовый состав, гексаферрит Ba, Bi-Gd гранат, спектроскопия.

СТРУКТУРА НАНОМЕТРІЧНИХ ПЛІВОК ФЕРРИТІВ ПІСЛЯ ІОННОЙ ІМПЛАНТАЦІЇ

В.Г. Кіріченко, О.В. Коваленко
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Інститут високих технологій
61108, м. Харків, пр. Курчатова, 31

Представлені результати дослідження процесів формування плівок гексаферриту Ba і Bi-Gd гранату на підкладках галлій-гадолінієвого граната. В результаті іонно-променевого осадження на поверхні підкладок утворюються аморфні парамагнітні плівки гексаферриту Ba та плівки вісмут- гадолиниевого граната з формуванням магнітовпорядкованих плівок при термічному відпалі й іонної імплантації. Для повороту осі легкого намагнічування у площину плівки найбільш ефективна іонна імплантація іонів He+.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: тонкі плівки, елементний і фазовий склад, гексаферрит Ba, Bi-Gd гранат, спектроскопія.

YIG (yttrium iron garnet) is actually a synthetic form of garnet. It has interesting magnetic properties which allow it to perform as a tunable microwave filter for example [1]. Also, because of their uniaxial crystalline magnetic anisotropy, high value of magnetic anisotropy constant and chemical inertness strontium and barium-M hard-magnetic hexaferrites are prospective materials for creation of constant magnets and magnetic carriers with high data density [2, 3]. Replacement of iron and strontium atoms by other cations in hexaferrites also allows wide range variation of the substance magnetic properties. To obtain hexaferrites and other types of garnet ferrites (e.g. bismuth gadolinium garnets) with the required performance attributes it's necessary to search for the efficient combination of film deposition techniques and to obtain the information about their elemental composition, structural-phase and magnetic states at different stages of magnetic structure formation. Ion beam technique allows creating new approach to the problem of condensation of composite garnet ferrites films on substrates with noncoincident lattice parameters. By means of Mössbauer spectroscopy there were studied both Ba and Sr hexaferrites, iron oxides and Ba hexaferrite thin films (as well as Sr ones) [4, 5]. It's rather promising to use garnets for immobilization of radioactive wastes with high specific activity [6]. At that, garnets and garnet ferrites elemental composition in particular and structural-phase state are rather important parameters.

The aim of this work was to study structural-phase state, elemental and phase composition of thin film structures by means of nuclear physics methods of analysis and control. In particular, there were studied Ba-hexaferrite thin films and bismuth-gadolinium garnet after they were synthesized using ion beam deposition with the following thermal annealing and ion beam implantation.

THE EXPERIMENTAL STUDY TECHNIQUE

Ba-hexaferrite and bismuth-gadolinium ferrite films $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ were deposited on gadolinium gallium garnet (GGG) substrate with (111) orientation using vacuum deposition approach during ion-beam sputtering (IBS) of

© Kirichenko V.G., Kovalenko O.V., 2012

the corresponding target enriched with ^{57}Fe isotope up to 25%. IBS approach was performed through formation of argon ions beam with current density up to 10 mA/cm^2 and energy about 1–3 keV in vacuum chamber and the beam was directed on the target made of material being sputtered. Before film deposition on GGG plates the substrates were exposed to ion-beam and thermal processing that consisted of substrate irradiation with oxygen ions.

Phase composition of thin films surface layers was defined by means of Mössbauer spectroscopy on ^{57}Fe nuclei in backscattering geometry with the registration of conversion electrons. Depth of layer analyzed with CEMS was about 0.3 μm. Structural perfection of GGG substrate surface layer was defined both by using double-crystal spectrometer according to Berg-Barrett method and by X-ray up to 3 μm. Elemental analysis of ferrite films surface layers was performed using Rutherford backscattering spectrometry (RBS) up to depth selectivity 3 μm. He^+ ions implantation was performed with energy 26 keV and fluence up to $\Phi=2\cdot10^{14}$ cm^{-2}.

RESULTS AND DISCUSSION

On the first stage the simulation of He^+ ion irradiation of YIG by SRIM-2011 was performed (Fig. 1 – 9).

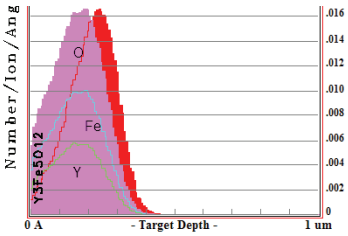


Fig. 1. Atom distributions

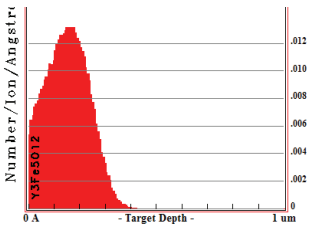


Fig. 2. Collision events. Vacancies produced

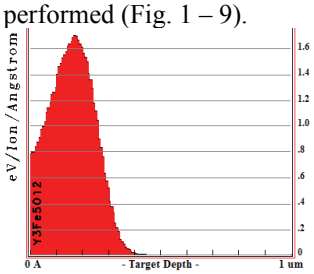


Fig. 3. Energy to recoils

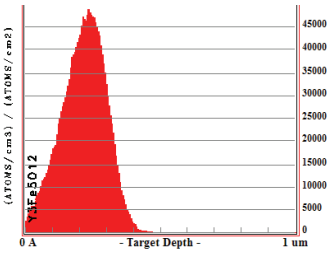


Fig. 4. Ion ranges.
Ion Range = 2154 Å, Straggle = 798 Å,
Skewness = 0.2463 Å, Kurtosis = 2.6832 Å

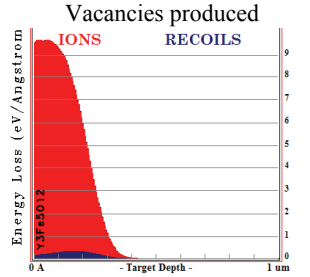


Fig. 5. Ionization of ions and recoils

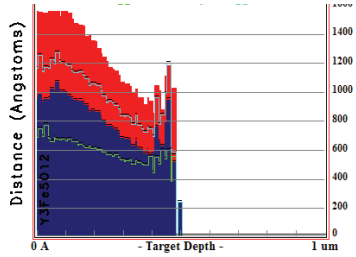


Fig. 6. Lateral distribution

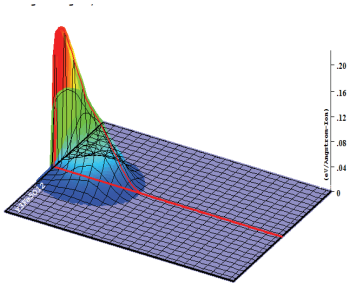


Fig. 7. Target phonons.
Total ionization = 21.7 keV/Ion/,
tonal phonons =4.1 keV/Ion,
total target damage =0.22 keV/Ion

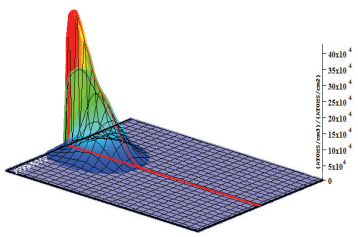


Fig. 8. Recoil distribution.
Ion Range = 2141 Å, Straggle = 799 Å,
Skewness = 0.281 Å, Kurtosis = 2.629 Å

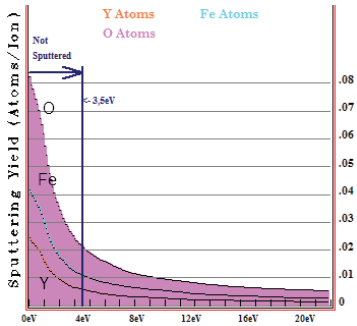


Fig. 9. Atoms reaching surface with energy normal to surface

The results of simulation demonstrate character features of two peaks atom distributions on target depth which connect with various parameters of He^+ implantation into multi element YIG target.

In these calculations do not take into account the penetration of the gadolinium from the GGG substrate into the YIG film (Fig. 10). To determine the thickness of transition layer between the film and substrate RBS method was used. Transition layer thickness didn't exceed 0.1 μm. This parameter is important when forming structures of submicron sizes by means of solution-melt deposition of films which thickness is commensurable with transition layer thickness.

There were given the CEMS spectra of $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ films after sputtering (Fig. 11). Films $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ after processing using IBS approach are presented by widened doublet scattering spectra which indicates the amorphous state of the films. Comparison of quadruple splitting ΔE of garnets allows supposing that there's some contribution of sputtering in form of clusters. These are several Angstrom size clusters and they can be formed when recombination of sputtered ions (Fig. 9). There by at different ways of garnet ferrite thin films deposition

the common thing is the formation of amorphous layers at the first stage of films deposition.

This is also proved by the experimental data as for hexaferrite films formation. The shape of doublet scattering spectra shows that first the amorphous film appears in paramagnetic state. Parameters of doublet scattering spectra on (isomeric annealing δ=0.35 mm/s relative to α-Fe and quadrupole splitting Δ=1.05 mm/s) correspond to Fe^{+3} ion state. Half-width values of doublet lines $\Gamma_1=\Gamma_2=0.7$ mm/s indicate that Fe^{+3} ions in Ba-hexaferrite are characterized by wide set of inequivalent positions.

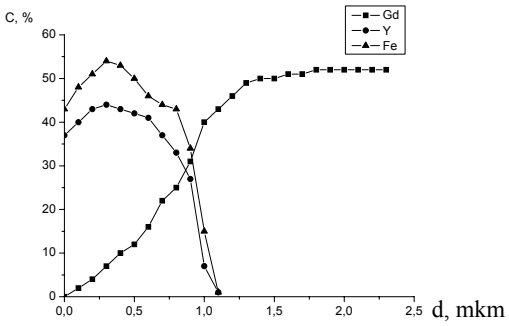


Fig. 10. Distribution of elements on film depth

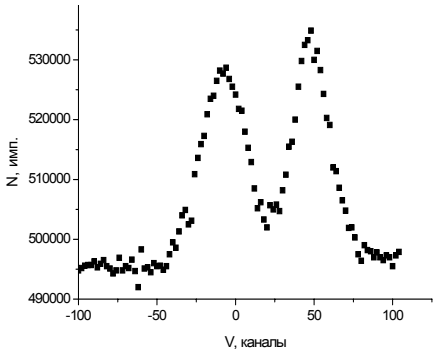


Fig. 11. CEMS spectra of $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ films after sputtering

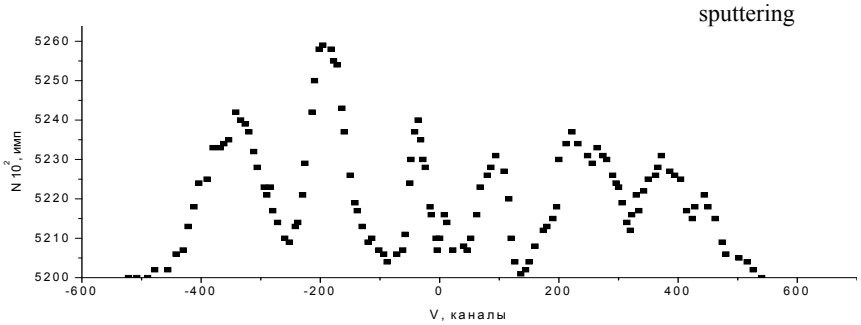


Fig. 12. CEMS spectra of $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ films after and annealing at 1070 K; 2.5 h

Annealing of bismuth containing films was performed at 1070 K in time range from 10 min to 10 hours. In 10 minutes after the annealing was started the doublet in scattering spectra was replaced with magnetically ordered phase spectrum (Fig. 12). This spectrum corresponds to the presence of at least two nonequivalent ^{57}Fe atoms in the lattice, which are characterized by average values of nuclei magnetic fields H_1=(460+10) kOe and H_2=(460+10) kOe. These fields can be considered as those in tetra- and octahedron positions correspondingly. Increase of annealing time up to 10 hours leads to the appearance of three nonequivalent Fe atoms positions in the film lattice.

From the ratio of spectral line intensities ***I*** for magnetically ordered phase there were estimated the average values of the angle θ between normal to the film surface and iron ions magnetic moment direction matching with easy axis direction. Using CEMS spectra lines ratio for magnetically ordered film there can be estimated the average value of angle $\overline{\theta}$ between the normal to the film surface and iron ions magnetic moment direction matching with easy axis direction.

The angle $\overline{\theta}$ is defined using known formulae (1):

$$\overline{\theta} = \arccos\sqrt{(4-3\beta)/(4+3\beta)},$$

where $\beta = \dfrac{I_2 + I_5}{I_1 + I_6}$, I_1,I_2,I_5,I_6 – 1-st, 2-nd, 5-th and 6-th spectral lines intensities correspondingly.

So, for the sample obtained in mode 1 and annealed at 1060 K during 0.5 hours the $\overline{\theta}$ angle value was about 60°. Angle $\overline{\theta}$ has tendency to decrease when increasing the annealing time. It's known that according to CEMS data for garnet ferrites Fe magnetic moment deflection from the normal to the surface decreases along near-surface layer depth and it's a natural sequence of surface imperfection.

In Table the θ angle values are given for different magnetically ordered films of garnet ferrites on GGG substrate.

Implantation with H+, He+, Ne+ ions of single-crystal films of magnetooptical structures leads to the whole bunch of sequences. Single-crystal films after annealing are characterized by the slope angle between easy axis (EA) and normal to film plane, which is equal to ≈ 0º. The main task of implantation is to turn EA into the film plane in near-surface layer for suppression of rough magnetic bubble domains (MBD). At that θ angle value varies from 0º to 90º.

Table

Calculated using experimental data $\overline{\theta}$ angle values for different garnet ferrites

№	Sample	$\overline{\theta}$, degrees
1	Initial sample $Y_3Fe_5O_{12}$	69
2	YIG, irradiation He^+, E=26 кеV, Φ=$1.5\cdot10^{14}$cm^{-2}	78
3	Hexaferrite annealing 1070 K, t=1 h	56
4	$Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$. annealed substrate, annealing 1070 K, 2.5 h non-annealed substrate, annealing 1070 K, irradiation He^+, E= 0.6 MeV, Φ=$3\cdot10^{13}$ cm^{-2}	42 48
5	$Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$., annealing 1070 K, 10 m + He^+, E=26 кеV, Φ=$1.5\cdot10^{14}$ cm^{-2} annealing 1070K, 10 m + He^+, E=26 кеV, Φ=$2.25\cdot10^{14}$ cm^{-2}	90 90

In our case films are amorphous after processing and the annealing leads to their crystallization into polycrystalline fine-dispersed structures with high number of imperfections. Substrates preliminary annealing almost doesn't affect $\overline{\theta}$ value for $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ films. But this value is essentially lower then the one obtained for YIG after proton irradiation and annealing. Angle θ value has a tendency to decrease with increase of annealing time for Bi-Gd-Fe-Ga-O films.

According to RBS data the implantation with He^+ ions with E=0.6 MeV leads to BS spectra blur and as a result to the problem of elemental composition distribution along the film thickness. According to CEMS data the irradiation with He^+ ions with E_1=0.6 MeV leads to small increase of $\overline{\theta}$ value, but at that spectra blur isn't observed. Irradiation with He^+ ions with E_2=26 кеV leads to CEMS spectra blur for $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ films and to the turn of EA into the film plane ($\overline{\theta}$=90º). In addition, the weak lines of amorphous phase are observed for dose Φ=$2.25\cdot10^{14}$ cm^{-2}. Irradiation of YIG with He^+ ions with E=26 кеV (previous proton irradiation E =1 MeV, Φ=10^{17}cm^{-2}, annealing 1060 K, 1 h) leads to angle $\overline{\theta}$ increase up to 78°, but the EA vector doesn't fit into the plane. Thereby $Bi_{2,2}Gd_{0,8}Fe_{4,4}Ga_{0,6}O_{12}$ irradiation with He ions leads to abrupt change of EA orientation (angle value $\overline{\theta}$=90º*)* (Table).

Surface amorphization occurs again when irradiation of $BaFe_{12}O_{19}$ hexaferrite with high-energy heavy ions of Ar and Cr [7,8]. This is what happens when heavy ions, e.g. Ne^+, are implanted into garnet ferrites. Near-surface layer amorphization increases with the dose. According to CEMS data implantation of H_2^+ ions to garnet ferrites doesn't lead to amorphization. However implanted hydrogen forms chemical connections with some elements present in garnet composition. That's why it again proves the expedience of He^+ ions choice as ions being implanted.

CONCLUSIONS

Ion beam deposition of Ba-hexaferrite films leads to the formation of amorphous paramagnetic films which are transferred into magnetically ordered state under thermal annealing. The results of simulation demonstrate character features of two peaks atom distributions on target depth which connect with various parameters of He^+ implantation into multi element target. Films layer-by-layer analysis according to the RBS data lets us come to the conclusion about variable elemental composition of ferrite films. Phase composition is inhomogeneous along the film thickness. Gadolinium diffuses from the substrate to the films surface when they are formed. Deposition of bismuth-gadolinium garnet is also connected with amorphous paramagnetic films formation and with further crystallization of magnetically ordered films under thermal annealing and ion implantation. Implantation of He^+ ions is the most efficient procedure, which leads to easy axis turn into the film plane.

REFERENCES

1. http://www.vhfcomm.co.uk/pdf/A%20Simple%20Approach%20tyo%20YIG%20Oscil.pdf
2. Koutzarova T., Kolev S., Ghelev C., Grigorov K., Nedkov I. Structural and Magnetic Properties and Preparation Techniques of Man-sized M-type Hexaferrite Powders in Advances in Nanoscale Magnetism, ed. Aktas B. - Berlin, Heidelberg: Springer, 2008. - P.183-203.
3. Müller R., Hergt R., Dutz S., Zeisberger M., Gawalek W. Nanocrystalline Iron Oxide and Ba Ferrite Particles in the Superparamagnetism-Ferromagnetism Transition Range with Ferrofluid Applications // Journal of Physics: Condenced Matter. – 2006. -. Vol.18. - P.S2527–S2542.
4. Fu L., Liu X., Zhang Y., Dravid V.P., Mirkin C.A. Nanopatterning of "Hard" Magnetic Nanostructures via Dip-Pen Nanolithography and a Sol-Based Ink // Nano Letters. - 2003. - Vol.3. - P.757-760.
5. Yudintsev S.V., Yudintseva T.S., Mokhov A.V., Konovalov E.E., Perevalov S.A., Stefanovsky S. V., Ptashkin A.G. et al. Study of pyrochlore and garnet-based matrices for actinide wastes produced by a self-propagating high-temperature synthesis // Sci. Basis for Nucl. Waste Managem. - XXVII. - MRS Proc. - Vol.807. 2004 - P. 273-278.
6. Hibiya T., Honda H., Makino H. Orthorhombic magnetic anisotropy of {110} Bi-substituted gadolinium iron garnet films // Journ. Of Magnetism and Magnetic Materias.-1985.-Vol. 53. -P. 98-102.
7. Krumme P., Doorman V., Eckart R. Bismuth substituted iron garnet films prepared by RF-diode sputtering // IEEE Trans. – 1984. - Vol. MAG-30, №5. - Pt 1. - P. 983 – 985.
8. Studer F., Nguyen N., Fuchs G.,. Toulenonde M. Ferrimagnetic – paramagnetic transitions induced by heavy ion irradiation: a Mossbauer investigation // Hyperfine interactions. – 1986. – Vol. 29. – P.1287–1291.

УДК 53.092; 538.93; 542.61

ВЛИЯНИЕ ВОДЫ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ CO_2 ЭКСТРАКЦИИ УРАНА ИЗ ПРИРОДНЫХ МИНЕРАЛОВ

Б.В. Борц[1)], Ю.Г. Казаринов[1, 2)], С.А. Сиренко[1)], С.Ф. Скоромная[1)], В.И. Ткаченко[1, 2)]
[1)] *ННЦ "Харьковский физико-технический институт"*
г. Харьков, ул. Академическая, 1, Украина
[2)] *Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина*
г. Харьков, пл. Свободы, 4, Украина
E-mail: tkachenko@kipt.kharkov.ua
Received 16 April 2012, accepted 15 May 2012

Приведены экспериментальные данные по исследованию влияния воды на эффективность сверхкритической флюидной экстракции углекислым газом (СФЭ-CO_2) комплексов урана из природных минералов при давлениях углекислого газа до 20,0 МПа и температурах до 45°С. Экспериментально показано, что зависимость эффективности экстракции от количества воды имеет пиковый характер, т.е. при определенных давлении и температуре эффективность экстракции максимальна. Определены условия, при которых достигается максимальная эффективность СФЭ-CO_2 комплексов урана. Предложена двухуровневая модель для описания СФЭ - CO_2 экстракции воды. Модель имеет хорошее качественное и количественное соответствие с экспериментальными данными. Предложена двойная двухуровневая модель для описания СФЭ - CO_2 экстракции комплекса урана в присутствии воды. С использованием двойной модели аналитически описано наблюдаемое в эксперименте уменьшение эффективности экстракции комплекса урана с увеличением количества свободной воды. В рамках двойной модели подтверждено, что максимальная эффективность экстракции достигается для количества воды, полностью связанной комплексом урана, и соответствующего ее пределу растворимости в сверхкритическом CO_2. Предложенные модели позволили оценить величины вероятностей индуцированных переходов в двухуровневых системах.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: сверхкритический углекислый газ, сверхкритическая экстракция, уран, вода, трибутилфосфат, двухуровневая система.

AN EFFECT OF WATER ON THE URANIUM SUPERCRITICAL CO_2 EXTRACTION EFFECTIVENESS FROM NATURAL MINERALS

B.V. Borts[1)], Y.G.Kazarinov[1, 2)], S.A. Sirenko[1)], S.F. Skoromnaya[1)], V.I. Tkachenko[1, 2)]
[1)] *National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"*
1, Akademicheskaya St., Kharkov, Ukraine
[2)] *V.N. Karazin Kharkiv National University*
4, Svobody Sq., Kharkov, Ukraine

Experimental data on investigation of water effect on efficiency of supercritical fluid extraction by carbon dioxide (SFE-CO_2) of uranium complexes from nature minerals at carbon dioxide pressure to 20,0 MPa and temperature to 45°C are presented. It is shown that dependence of extraction efficiency on water quantity has the peak pattern, that is, under specific pressure and temperature the efficiency of extraction is maximal. Conditions under which the maximal efficiency of SFE-CO_2 complexes of uranium is attained are determined. Two level model for description of SFE-CO_2 extraction of water is proposed. The proposed model corresponds well with experimental data. Double two level model for description of SFE-CO_2 extraction of uranium complex in the presence of water is proposed. The experimentally observed decrease of uranium complex extraction efficiency with the increase of free water quantity is described analytically by the use of double model. It is confirmed in the frame of double model that the maximum efficiency of extraction is attained for water quantity completely bounded by uranium complex and corresponding to its limit of solubility in supercritical CO_2. The proposed models allowed evaluate the values of probability of induced transitions in two-level systems.

ВПЛИВ ВОДИ НА ЕФЕКТИВНІСТЬ НАДКРИТИЧНОЇ CO_2 ЕКСТРАКЦІЇ УРАНУ ІЗ ПРИРОДНИХ МІНЕРАЛІВ

Б.В. Борц[1)], Ю.Г. Казарінов[1, 2)], С.А. Сіренко[1)], С.Ф. Скоромна[1)], В.І. Ткаченко[1, 2)]
[1)] *ННЦ "Харківський фізико-технічний інститут"*
м. Харків, вул. Академічна, 1, Україна
[2)] *Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна*
м. Харків, м. Свободи, 4, Україна

Наведено експериментальні дані щодо дослідження впливу води на ефективність надкритичної флюїдної екстракції вуглекислим газом (НФЕ-CO_2) комплексів урану із природних мінералів при тисках вуглекислого газу до 20,0 МПа й температурах до 45°С. Експериментально показано, що залежність ефективності екстракції від кількості води має піковий характер, тобто при певних тиску й температурі ефективність екстракції максимальна. Визначено умови, при яких досягається максимальна ефективність НФЕ-CO_2 комплексів урану. Запропоновано дворівневу модель для опису НФЕ-CO_2 екстракції води. Модель має гарну якісну й кількісну відповідність із експериментальними даними. Запропоновано подвійну дворівневу модель для опису НФЕ-CO_2 екстракції комплексу урану в присутності води. З використанням подвійної моделі аналітично описано спостережуване в експерименті зменшення ефективності екстракції комплексу урану зі збільшенням кількості вільної води. У рамках подвійної моделі підтверджено, що максимальна ефективність екстракції досягається для кількості води, повністю зв'язаної комплексом урану, яка відповідає її межі розчинності в надкритичному CO_2. Запропоновані моделі дозволили оцінити величини ймовірностей індукованих переходів у дворівневих системах.

© Borts B.V., Kazarinov Y.G., Sirenko S.A., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I., 2012

КЛЮЧОВІ СЛОВА: надкритичний вуглекислий газ, надкритична екстракція, уран, вода, трибутілфосфат, дворівнева система.

В настоящее время правительство РФ реализует план ускоренного развития атомной энергетики в России в рамках Программы "Развитие атомного энергопромышленного комплекса России на 2007-2010 годы и на перспективу до 2015 года".

В результате выполнения этого плана должны быть решены, например, такие инновационные проекты, как разработка малоотходных технологий для отработанного ядерного топлива (ОЯТ), переработка и безопасное обращения с радиоактивными отходами, которые формируются и накапливаются в ходе реализации оборонных программ, а также современных технологий вывода из эксплуатации, демонтажа и дезактивации ядерных установок и других объектов.

Существующие химические технологии жидкостной экстракции (например, PUREX или редокс процессы) [1], несмотря на их высокую эффективность, создают серьезную проблему, которая связана с образованием большого количества вторичных жидких (водных или органических) отходов.

Решение этой проблемы является чрезвычайно важной задачей для успешного развития атомной отрасли и улучшения радиоэкологической безопасности ядерного топливного цикла. Поэтому значительно возрос интерес к поиску нетрадиционных процессов, в которых отсутствует или сведена к минимуму стадия образования вторичных жидких отходов.

Одним из таких процессов является сверхкритическая флюидная экстракция в среде двуокиси углерода (СФЭ-CO_2) [2]. С помощью такой технологии возможно выделение актинидов и других радионуклидов, в том числе из их оксидов, из разнообразных матриц, а также производить дезактивацию различных объектов окружающей среды. При этом минимизируется объем вторичных радиоактивных водных и токсичных органических растворов-отходов традиционных технологий, которые создают долгосрочные экологические проблемы.

Разработка таких технологий особенно актуальна для Украины. Эта актуальность обусловлена тем, что за прошедшие годы в процессе добычи урана в Украине образованы техногенные отвалы (Приднепровского химического завода в г. Днепродзержинске и объекты по переработке урана в г. Желтые Воды) с высоким содержанием токсичных элементов, которые, ввиду их экологической опасности, необходимо утилизировать в кратчайшие сроки. В Днепродзержинске, например, расположено 7 хвостохранилищ с общим весом отходов около 42 млн. т., которые содержат радиоактивные и химически опасные вещества – уран, продукты его распада, мышьяк, селен, торий, радий и т. п. Их площадь составляет около 2,5 млн. кв.м. [3,4].

Необходимо также отметить, что СФЭ-CO_2 технологии [см., например, 2] разрабатываются для матриц, содержащих один или несколько (модельное отработанное ядерное топливо) целевых элементов. При этом, в последнем случае, показатель экстракции, т.е. показатель перехода урана в СК CO_2 максимален (более 99 %). Остальные экстрагируемые элементы имеют следующие показатели экстракции: ^{95}Zr, ^{95}Nb (до 90 %); ^{131}I и частично ^{103}Ru ($\sim$ 30 %); ^{99}Tc ($\sim$ 20 %); редкоземельные элементы (до 10 %). В водной, неэкстрагированной фазе, остаются полностью ^{137}Cs, ^{85}Sr, ^{140}Ba и основные количества ^{140}La, $^{141–144}Ce$, ^{147}Nd, а также ^{99}Tc (80-90 %) [5]

Определенный интерес представляет исследование извлечения U не из изготовленных в лабораторных условиях матриц, а из природных минералов, таких, как, например, граниты или урановые руды.

В природных минералах, кроме U, присутствует большое количество сопутствующих химических элементов, не являющихся продуктами деления. На наш взгляд эти элементы, аналогично [2], не должны существенно изменить показатели СФЭ-CO_2 экстракции урана [6, 7]. Однако, полученные в [6,7] показатели экстракции U оказались меньше указанных в [2], что объясняется преднамеренным использованием легкодоступного и недорогого β - дикетона (ацетилацетона), а также обогащением комплекса урана комплексами других металлов, которые присутствуют в исходном образце и взаимодействуют с комплексообразующими реагентами.

Особое значение в СФЭ-CO_2 технологии придается такому модификатору, как вода [8]. Присутствие воды является необходимым условием экстракции металлов в СК CO_2. Экспериментально установлено, что без воды процесс экстракции металлов не наблюдаются вообще.

На наш взгляд, именно «сухая» технология экстрагирования [6,7], когда в исходный материал не добавлялась вода, явилась причиной меньших по сравнению с [2] показателей экстракции.

Как утверждают авторы [8], увеличение количества воды до определенного предела ведет к росту показателя экстракции металлов в СК CO_2. Дальнейший рост количества добавленной воды практически не сказывается на эффективности экстракции.

Поэтому, для разработки технологии СФЭ-CO_2 урана важным является исследование влияния микроколичеств воды на эффективность экстракции.

Целью настоящей работы являются экспериментальные и теоретические исследования влияния микроколичества воды на эффективность СФЭ-CO_2 комплексов урана.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА И МАТЕРИАЛЫ

Экспериментальная установка

Экстракция проводилась на установке СФЭ-U. Общий вид установки приведен на рис. 1. Основные параметры установки приведены в таблице.

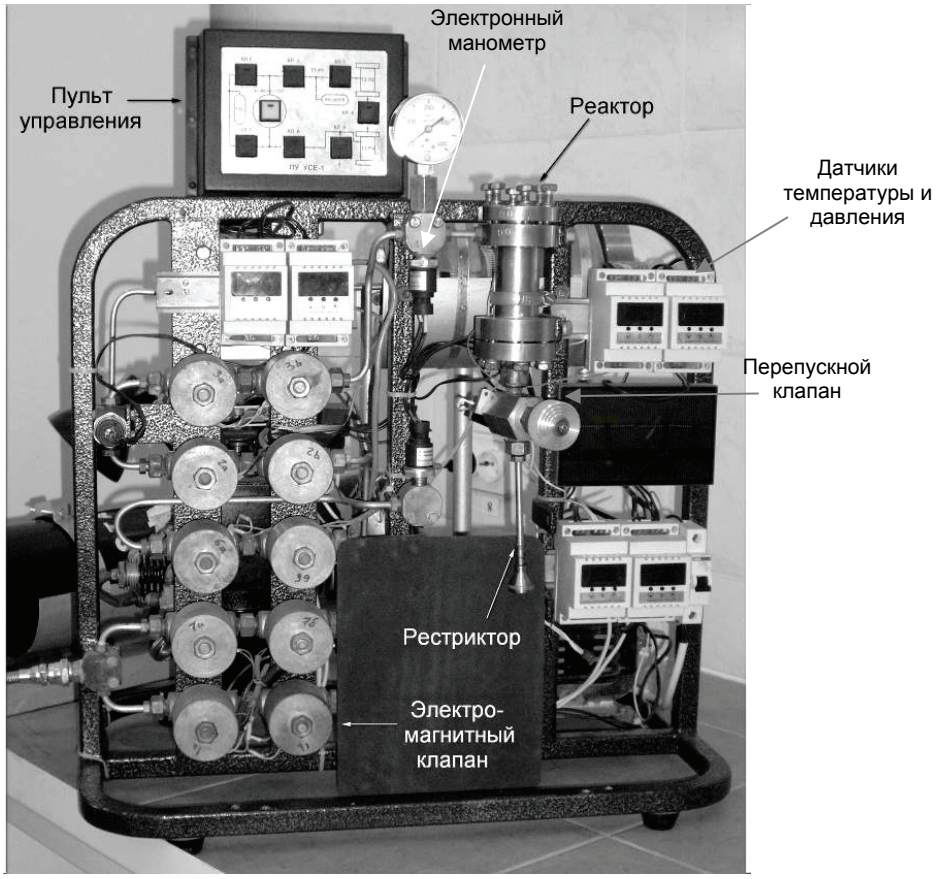


Рис. 1. Общий вид установки сверхкритической флюидной экстракции СФЭ-U

Таблица

Основные параметры установки

Параметр	Значение
Рабочее давление (компрессор КПВ-1А)	0,1 - 20 МПа (1 - 200 атм)
Максимальное рабочее давление	22 МПа
Коммутация газовых потоков	Электромагнитные клапаны
Объем реактора	10÷100 мл
Температура реактора	20÷60 °С
Температура рестриктора	20÷100 °С
Максимальная подача CO_2	500 моль/мин
Температура ресивера	20÷90 °С

Материалы

Содержание урана в исходных материалах определялось с помощью гамма спектрометра СЭГ-50(П) с детектором ДГДК-60В. Точность определения концентраций излучающих изотопов составила 15%. Для определения содержания урана на этапе пробоподготовки и определение эффективности экстракции применялись рентгеновский флуоресцентный анализатор КРАБ-3УМ и спектрофотометр СФ-2000 с использованием реагента Арсеназо-III. Суммарная погрешность определения количества урана в образцах для каждого метода составила 10%.

Для калибровки были приготовлены урансодержащие растворы путем растворения металлического урана в концентрированной азотной кислоте. Концентрация урана в исходном растворе составила 100 мг/мл. Путем нанесения на фильтровальную бумагу по 0,1 мл исходного раствора и растворов, разбавленных водой, были получены калибровочные образцы для рентгеновского анализатора. Для калибровки спектрофотометра использовались как бумажные фильтры, так и урансодержащие растворы.

В работе были использованы образцы с содержанием урана по данным гамма спектрометрии 650 мкг/г.

Исходный образец минерала дробился и размалывался в порошок с размером зерна менее 50 мкм. 10 г порошка заливались 20 мл 40% азотной кислотой и выдерживались в течение суток. Полученный раствор отфильтровывался, осадок промывался дистиллированной водой (20 мл) и снова фильтровался. Оба раствора

смешивались с 6 мл 30% раствора трибутилфосфата (ТБФ) в керосине и взбалтывались. После расслоения органическая фаза отфильтровывалась через бумажный фильтр. Таким образом, в предположении о 100% эффективности всех процедур пробоподготовки в 1 мл органического экстракта должно содержаться не менее 1,3 мг урана.

Для оценки состава полученного экстракта было проведено сравнение спектров поглощения красителя Арсеназо-III с раствором чистого уранилнитрата и полученного экстракта (см. рис. 2).

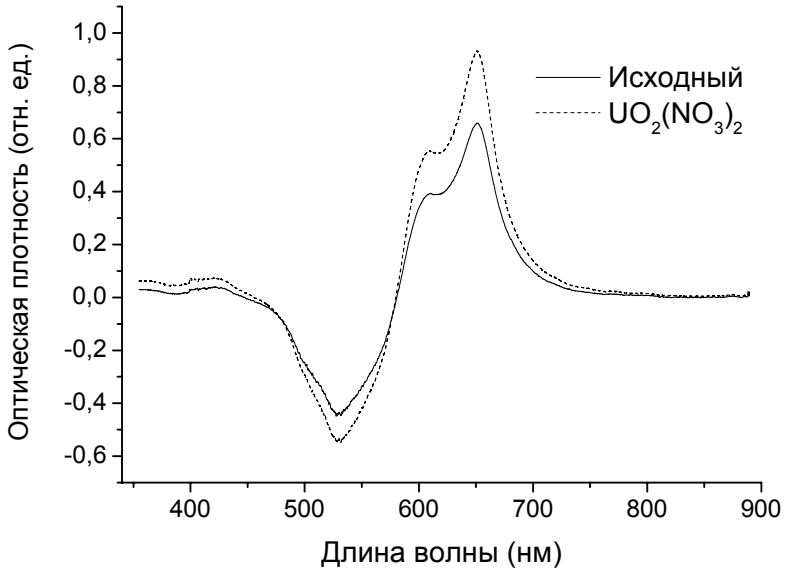


Рис. 2. Спектры оптического поглощения комплексов урана с Арсеназо-III.

Как видно из рисунка, поведение кривых поглощения одинаково, что свидетельствует о наличии в ТБФ практически чистого уранилнитрата, без заметного количества других элементов. Спектр поглощения, соответствует концентрации 6 мкг урана в 1 мл Арсеназо-III. Оценивая концентрацию урана, из максимума поглощения для исходного вещества получаем 1,6 мг урана в 1 мл органической фазы. Это значение несколько больше, чем полученное по данным гамма-спектрометрии, однако находится в пределах погрешности.

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Эксперименты по СФЭ-CO_2 экстракции урана проводились методом однократного нанесения экстрагируемого материала на фильтровальную бумагу и однократного сброса полученного элюента через рестриктор на твердый сорбент, в нашем случае – фильтровальную бумагу.

Последовательность операций при выполнения эксперимента была следующей:

Органическая фаза (0,2 мл) наносилась на лист фильтровальной бумаги диаметром 150 мм, высушивалась для удаления растворителя и помещалась в экстракционную ячейку. Непосредственно перед экстракцией на фильтр наливались дополнительные реагенты: 0,1 мл ацетилацетона и вода в количестве от 15 до 100 мкл.

Экстракция проводилась при давлении 180 атм при 38ºС в течение 30 минут.

После проведения экстракции содержимое ячейки сбрасывалось на стопку из 5 пронумерованных бумажных фильтров. Содержимое каждого фильтра анализировалось на рентгеновском анализаторе.

Для получения спектров поглощения на спектрофотометре СФ-2000, содержимое фильтров проходило дополнительную стадию очистки от металлов, попавших в экстракт в результате растворения материалов камеры, трубопроводов, уплотнений и запорной арматуры в СК CO_2. В нашем случае такими металлами были железо и медь. Они характеризуются цветовыми реакциями с Арсеназо-III. Поэтому для отделения экстрагированного урана от этих примесей, фильтры с экстрактом заливались 20 мл 2% HNO_3 и после выдержки, полученный раствор экстрагировался в 1 мл 30% раствора ТБФ в керосине. После отделения органической фазы она смешивалась с 2 мл $5 \cdot 10^{-4}$ % раствора Арсеназо-III в 1% HNO_3. После формирования устойчивой окраски отбиралось 1,5 мл полученного раствора и измерялся спектр поглощения относительно исходного раствора Арсеназо-III.

В результате выполнения описанных выше мер по очистке экстракта от «паразитных» материалов были получены спектры оптического поглощения экстрагированных комплексов урана с Арсеназо-III, приведенные на рис. 3. Для установления идентичности спектров исходного (кривая 1) и экстрагированного материалов (кривая 2) на рис. 3. показан последний, после домножения на константу, равную 4,7. Сравнение кривых 1 и 3 показывает полное соответствие исходного и экстрагируемого материалов.

Следует отметить, что спектры оптического поглощения на рис. 3. показывают только наличие соединений урана в экстракте, и имеют качественный характер.

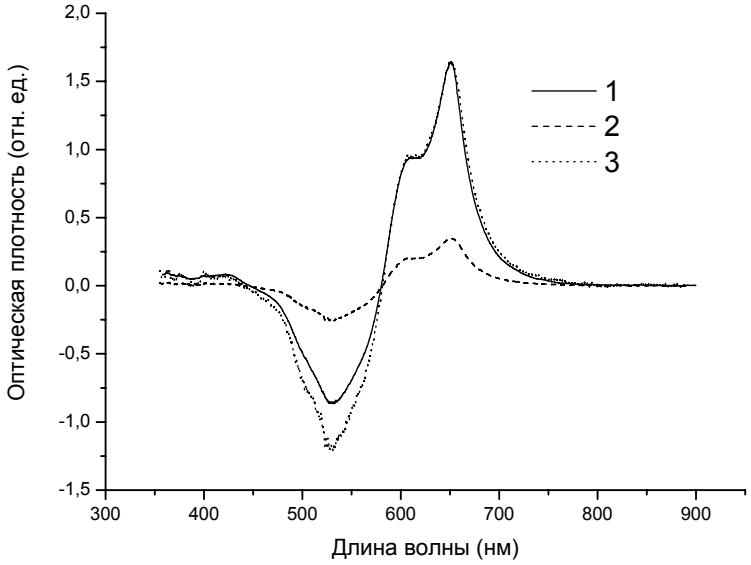


Рис. 3. Спектры оптического поглощения экстрагированных комплексов урана с Арсеназо-III.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

При исследовании влияния микроколичеств воды на эффективность СФЭ-CO_2 комплекса урана необходимо знать зависимость растворимости воды в СК CO_2 от давления (температуру считаем заданной).

Несмотря на наличие в научной литературе экспериментальных данных по растворимости воды в СК CO_2 [9,10], на установке СФЭ-U была проведена серия экспериментов по исследованию этого явления. Для этого фильтровальная бумага размером 16×16 см^2 пропитывалась 0,5 мл дистиллированной воды, помещалась в реактор, и при температуре 40 ºС подвергалась воздействию СК CO_2 при давлениях от 7 до 17 МПа. Контроль давления осуществлялся по механическому манометру с классом точности 2,5 и электронному датчику давления “Honeywell” с точностью порядка 1 - 2 %. Мольная доля растворенной в СК CO_2 воды определялось весовым методом по убыли воды на фильтровальной бумаге после экстракции (рис. 4).

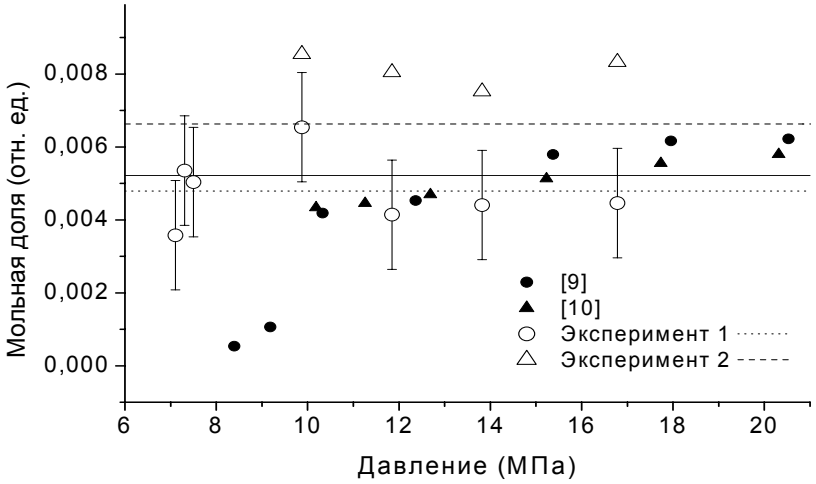


Рис. 4. Мольная доля растворенной в СК CO_2 воды (Эксперимент 1,2) в сравнении с результатами других авторов.

Время экстракции во всех экспериментах задавалось равным 5 мин. Поскольку процесс растворения воды в СК CO_2 превышает 5 мин, определение уровня ее насыщения проводилось с помощью экспериментально установленной градуировочной кривой (рис. 5). Эта кривая характеризует временную динамику растворения воды в СК CO_2 при давлении 10 МПа и температуре 40°С.

На рис. 4. сплошная горизонтальная линия отвечает усредненному по экспериментальным точкам значению мольной доли растворенной воды в СК CO_2.

Анализ приведенных на рис. 4. экспериментальных результатов показывает, что в исследуемом интервале давлений при температуре 40°С мольная доля растворенной в СК CO_2 воды практически постоянна и составляет величину порядка 0,0054.

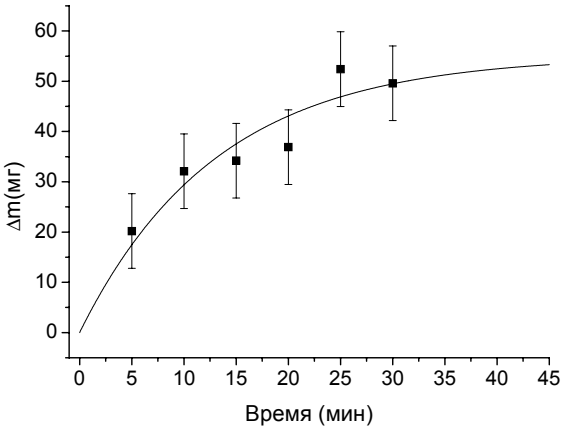


Рис. 5. Градуировочная кривая временной динамики растворения воды в СК CO_2.

Таким образом, из полученных экспериментальных данных следует, что при заданной температуре сверхкритический флюид может растворить только определенное количество воды, т.е. сверхкритический флюид характеризуется пределом растворимости воды. Излишек воды остается на фильтровальной бумаге, и, следовательно, не может принимать участие в процессе СФЭ-CO_2.

Отмеченный выше факт наличия предела растворимости воды в СК CO_2 играет важную роль при исследовании влияния микроколичеств воды на эффективность экстракции. На рис. 6. приведены экспериментальные данные нескольких экстракций комплекса урана (черные квадраты на рис. 6.). В результате статистической обработки этих данных была построена кривая зависимости эффективности экстракции комплекса урана от количества добавленной воды. Эта кривая представляет собой параболу, усы которой направлены вниз:

$$y(x) = 98,9 - 0,0139 \cdot (x - 52,9)^2, \qquad (2)$$

где y - ось ординат отвечает выходу экстракции (в %), x - ось абсцисс отвечает количеству добавленной воды (в мкл). Максимум параболы (2) соответствует значению 98,9% при количестве добавленной воды 52,9 мкл.

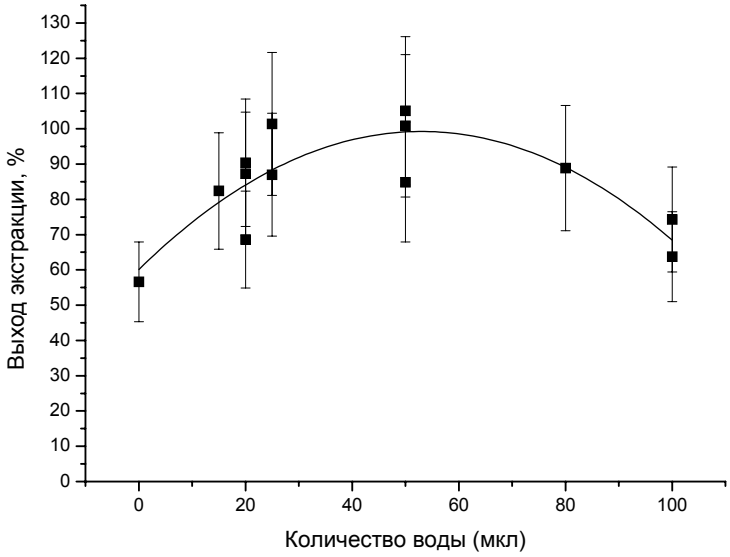


Рис. 6. Зависимость эффективности экстракции комплекса урана от количества добавленной воды.

Как следует из вида кривой (2), эффективность экстракции увеличивается с ростом количества добавленной воды, достигает максимума, а затем спадает. Максимум параболы дает величину наибольшего показателя экстракции, а количество добавленной воды соответствует пределу растворимости воды в СК CO_2.

Анализ полученной зависимости указывает на следующие особенности влияния воды на эффективность экстракции.

Вода является основным носителем экстрагируемого материала, в нашем случае – комплекс урана, состоящий из уранилнитрата и ТБФ. Поскольку вода имеет предел растворимости в СК CO_2, то количество экстрагируемого в СК CO_2 материала также имеет предел растворимости. Поэтому в эксперименте для количеств добавленной воды, ниже предела ее растворимости в СК CO_2, наблюдается увеличение эффективности экстракции с увеличением количества воды. Когда количество добавленной воды оказывается больше предела ее растворимости, излишек воды в результате поступления во флюид понижает количество растворенного комплекса в СК CO_2.

ДВУХУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ СФЭ - CO_2 ЭКСТРАКЦИИ ВОДЫ

Из [8] известно, что вода в сверхкритическом флюиде образует микромицеллы, т.е. существует в виде микрокапель. Таким образом, процессы экстракции в СК CO_2 можно моделировать на примере двухуровневой системы, описывающей переходы микрокапель воды между уровнями 1 и 2. Схематический вид двухуровневой системы приведен на рис. 7. Здесь уровень 1 соответствует микрокаплям воды, растворенным в углекислом газе с температурой T и давлением P. Уровень 2 соответствует микрокаплям воды, удерживаемым фильтровальной бумагой. В стабильной среде разность свободной энергии микрокапли воды в СК CO_2 и свободной энергии микрокапли в фильтровальной бумаге $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ положительна [11]. Поэтому в дальнейшем будем считать, что энергия уровня 1 больше энергии уровня 2 ($\varepsilon_1 > \varepsilon_2$).

Спонтанные переходы уменьшают свободную энергию микрокапли воды в СК CO_2. Поэтому микрокапля

воды (сокращенно МК) спонтанно переходит с уровня 1 на уровень 2. Спонтанность перехода будем характеризовать величиной μ_{12}, которая отвечает вероятности спонтанного перехода МК в 1 сек. Спонтанным переходам $\varepsilon_1 \to \varepsilon_2$ соответствуют уравнения:

$$n_2' = \mu_{12} n_1 = -n_1' \tag{2}$$

где штрих обозначает полную производную по времени.

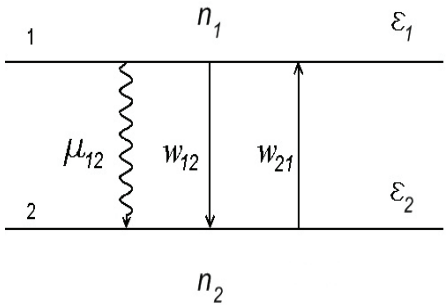


Рис. 7. Схема двухуровневой системы с населенностями n_1 и n_2. Стрелками показаны переходы с верхнего уровня на нижний: спонтанный - μ_{12} и индуцированный - w_{12}, а также индуцированный переход с нижнего уровня на верхний - w_{21}.

Если при постоянной температуре двухуровневой системы, превышающей критическую ($T > T_к = 37\ °C$), увеличить давление в системе и перевести газ в сверхкритическое состояние ($P > P_к$=7,3 МПа), то проявятся индуцированные переходы. В результате таких переходов может увеличиваться населенность уровня 1. Ясно, что вероятность индуцированного перехода зависит от внешнего давления P. Обозначим вероятность индуцированного перехода с уровня i на уровень m выражением w_{im}, где индексы i, m принимают значения 1,2. Тогда вероятность индуцированных переходов можно представить в виде:

$$w_{im} = \hat{w}_{im} N\,, \tag{3}$$

где $N = P(kT)^{-1}$ - число квантов (частиц) сверхкритического флюида в единичном объеме, $\hat{w}_{im}$ - коэффициенты пропорциональности, k - постоянная Больцмана.

Учет индуцированных процессов изменяет вид уравнений (2):

$$n_1' = -\left(\mu_{12} + \hat{w}_{12} N\right) n_1 + \hat{w}_{21} N n_2 = -n_2'\,. \tag{4}$$

Уравнения (4) должны быть дополнены уравнением изменения числа квантов флюида, обеспечивающих индуцированные процессы в двухуровневой системе:

$$N' = -\left(\mu_{12} + \hat{w}_{12} N\right) n_1 + \hat{w}_{21} N n_2\,. \tag{5}$$

Наличие статистического равновесного состояния в двухуровневой системе неизбежно ведет к условию Эйнштейна - $\mu_{12} = \hat{w}_{12} = \hat{w}_{21}$ [12], которое, для случая доминирования индуцированных процессов над спонтанными ($N >> 1$), существенно упрощает исходную систему уравнений (4), (5).

$$\begin{aligned} n_1' &= \left(n_2 - n_1\right)\mu_{12} N \\ n_2' &= -\left(n_2 - n_1\right)\mu_{12} N \\ N' &= -\left(n_2 - n_1\right)\mu_{12} N\,. \end{aligned} \tag{6}$$

В частном случае $n_1(0) = 0$ и $N(0) >> n_2(0)$ величина населенности уровня 1 определяется выражением:

$$n_1(t) = 0{,}5 \cdot n_2(0)\left(1 - exp(-\gamma t)\right), \tag{7}$$

где $\gamma \simeq 2\mu_{12} N(0)$.

Полученная из двухуровневой модели функциональная зависимость (7) качественно подтверждается экспериментальными данными. Из этих данных (см. рис. 5) следует, что зависимость количества растворенной

в сверхкритическом флюиде воды от времени экстракции описывается экспоненциальной функцией вида:

$$\Delta m = 55{,}1 \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{787} \right) \right], \qquad (8)$$

где время измеряется в секундах, а масса растворенной в сверхкритическом флюиде воды Δm - в мг.

Оценим параметры, характеризующие индуцированные переходы в двухуровневой системе СК CO_2 + вода. Из сравнения (7) и (8) следует, что для массы МК, участвующей в индуцированных переходах, $m_{\text{МК}} \simeq 0{,}037$ г населенность нижнего уровня определяется величиной $n_2(0) = 3$. Полагая начальное число квантов сверхкритического флюида равным $N(0) = 5 > n_2(0)$ найдем значение вероятности индуцированных переходов двухуровневой системы: $\mu_{12} \simeq 1{,}3 \cdot 10^{-4}$ с$^{-1}$.

Следует отметить, что полученное значение вероятности индуцированных переходов в СК CO_2 значительно меньше реализуемых, например, в лазерах $\mu_{12}^{лазер} \simeq 10^7$ с$^{-1}$ [13]. Такое отличие объясняет достаточно большую длительность наблюдаемых в экспериментах процессов СФЭ-CO_2.

Таким образом, предложенная двухуровневая модель СК CO_2 экстракции воды имеет хорошее качественное и количественное соответствие с экспериментальными данными. Полученные аналитические выражения отражают физическую картину процесса экстракции, и объясняют как наличие предела растворимости, так и малую скорость растворения воды в СК CO_2.

ДВОЙНАЯ ДВУХУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ СФЭ - CO_2 ЭКСТРАКЦИИ КОМПЛЕКСА УРАНА В ПРИСУТСТВИИ ВОДЫ

Исходя из результатов предыдущего раздела, для описания СФЭ - CO_2 экстракции комплекса урана в присутствии воды применима двойная двухуровневая система, схема которой приведена на рис. 8. При этом считаем, что сформулированные в предыдущем разделе выводы и предположения относительно свойств двухуровневых систем остаются в силе.

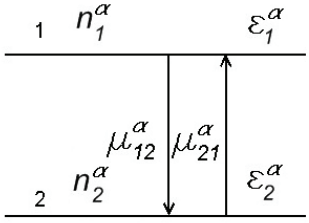


Рис. 8. Схема двухуровневых систем с населенностями n_1^α, n_2^α. Стрелками показаны индуцированные переходы между уровнями.

Как и ранее, полагаем, что на уровене 1 накапливаются растворенные СК CO_2 микрокапли чистой воды и микрокапли воды, содержащие комплекс уранилнитрат+ТБФ (сокращенно микрокапля УТВ). На уровне 2 сосредоточены микрокапли воды и микрокапли УТВ, удерживаемые фильтровальной бумагой. Полагаем справедливым следующее соотношение между свободными энергиями уровней: $\varepsilon_1^к \simeq \varepsilon_1^в > \varepsilon_2^\alpha$, где индекс α принимает значения $в$ или $к$, что обозначает воду или комплекс УТВ соответственно.

Исходя из экспериментальных данных [8], микрокапли воды прежде всего связываются комплексом уранилнитрат+ТБФ и располагаются на уровне 2. Микрокапли чистой воды, если таковые есть, располагаются также на уровне 2. Под термином «связанная комплексом уранилнитрат+ТБФ вода» следует понимать не химическую связь воды с комплексом урана, а связь посредством микромицелл: вода образует в СК CO_2 устойчивые мицеллы (коллоидный раствор), и комплекс уранилнитрат+ТБФ экстрагируется в СК CO_2 именно в виде мицелл [8].

Индуцированные переходы микрокапель воды и микрокапель УТВ с уровня 2 на уровень 1 являются конкурирующими процессами. Конкуренция обусловлена тем фактом, что емкость уровня 1 ограничена величиной $0{,}5 \cdot n_2^к(0)$ (см. выражение (7)). Этот уровень преимущественно будут заполнять те частицы, вероятность переходов у которых больше. Поскольку микрокапля УТВ в своем составе, наряду с водой, содержит также хорошо растворимое в СК CO_2 соединение $UO_2(NO_3)_2 \cdot 2ТБФ$ [8], то вероятность индуцированных переходов у нее выше ($\mu_{21}^к \equiv \mu_{12}^к > \mu_{12}^в \equiv \mu_{21}^в$). Однако, свободная вода также будет заполнять уровень 1, ограничивая при этом объем, возможного расположения микрокапель УТВ.

С учетом вышеизложенного, исходные уравнения для описания индуцированных процессов в

двухуровневых системах, представленных на рис. 8., имеют вид:

$$\left(n_1^{\alpha}\right)' = \left(n_2^{\alpha} - n_1^{\alpha}\right)\mu_{12}^{\alpha} N^{\alpha} = -\left(n_2^{\alpha}\right)',$$
$$\left(N^{\alpha}\right)' = -\left(n_2^{\alpha} - n_1^{\alpha}\right)\mu_{12}^{\alpha} N^{\alpha}. \qquad (9)$$

Решение системы уравнений (9) дает следующее выражение для населенности уровня 1 микрокаплями воды и УТВ:

$$n_1^{\alpha}(t) = 0{,}5 n_2^{\alpha}(0)\left(1 - exp\left(-\gamma^{\alpha} t\right)\right)\left(1 - \frac{\varepsilon^{\alpha}}{2} exp\left(-\gamma^{\alpha} t\right)\right)^{-1}, \qquad (10)$$

где $\gamma^{\alpha} = 2N_0^{\alpha}\mu_{12}^{\alpha}$, $N_0^{\alpha} = N^{\alpha}(0) - \frac{n_2^{\alpha}(0)}{2}$.

Условие конкуренции при заполнении верхнего уровня определяется неравенством:

$$n_1^{в}(t) + n_1^{к}(t) \le 0{,}5 \cdot n_2^{к}(0). \qquad (11)$$

Отсюда можно сделать вывод, что количество микрокапель УТВ на уровне 1 уменьшается с ростом начального количества микрокапель воды:

$$n_1^{к}(t)\Big|_{t\to\infty} \le 0{,}5\left(n_2^{к}(0) - 2\, n_1^{в}(t)\Big|_{t\to\infty}\right). \qquad (12)$$

В пределе, когда $2\, n_1^{в}(t)\Big|_{t\to\infty} \to n_2^{к}(0)$ экстракция микрокапель УТВ отсутствует.

Угнетающее действие свободной воды на эффективность экстракции можно описать другим способом. Если положить $N^{к} \approx N^{в} >> 1$, то из (9) нетрудно показать, что справедливо уравнение:

$$\frac{dy}{dx} = \delta \frac{y}{x}, \qquad (13)$$

где $y(t) = n_2^{к}(t) - n_1^{к}(t)$, $x(t) = n_2^{в}(t) - n_1^{в}(t)$, $\delta = \mu_{12}^{к}\left(\mu_{12}^{в}\right)^{-1} > 1$.

Решение уравнения (13) имеет вид:

$$n_1^{\hat{e}}(t) = n_2^{\hat{e}}(t) - \tilde{N} \cdot \left|n_2^{\hat{a}}(t) - n_1^{\hat{a}}(t)\right|^{\delta}, \qquad (14)$$

где $C = n_2^{к}(0)\left(n_2^{в}(0)\right)^{-\delta} > 0$ - константа интегрирования.

Из уравнений (11), (14) следует, что эффективности экстракции микрокапель УТВ в СК CO_2 уменьшается с ростом количества микрокапель свободной воды .

Вывод об уменьшении эффективности экстракции микрокапель УТВ в присутствии воды (11), (14) качественно подтверждается экспериментальными данными, приведенными на рис. 6. Здесь, кривая зависимости эффективности экстракции комплекса урана от количества добавленной воды (2), после нарастания и достижения максимума, плавно убывает. Такое убывание свидетельствует об уменьшении количества экстрагируемого материала.

Функциональная зависимость (2) получена исходя из аппроксимации экспериментальных данных наиболее простой функцией – квадратным трехчленом. Однако, исходя из вида решения (14), можно утверждать, что степень многочлена не равна 2. Поэтому выражение (2) должно быть уточнено относительно показателя степени аппроксимирующего многочлена.

В результате такого уточнения кривая зависимости эффективности экстракции комплекса урана от количества добавленной воды определяется выражением:

$$y(x) = y_0 - C \cdot \left|x - x_0\right|^{\mu}, \qquad (15)$$

где $y(x)$ - выход экстракта (в %), x - количество добавленной воды (в мкл), x_0 - предел растворимости воды в СК CO_2.

Оптимальные, т.е. дающие минимальное отклонение от экспериментальных данных, параметры уточненной функции (15) имеют следующие значения: $y_0 = 95{,}7$; $x_0 = 53{,}6$; $C = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$; $\mu = 2{,}46$. Величина наибольшей эффективности экстракции при этом оказывается меньше определенной ранее (см. выражение (2)) и составляет величину порядка 96 %.

Показатель степени в выражении (15) позволяет определить отношение вероятностей индуцированных

переходов микрокапель УТВ и микрокапель воды в среде СК CO_2. Используя результаты предыдущего раздела, из соотношения $\mu = 2{,}46$, оценим величину вероятности индуцированных переходов микрокапель УТВ: $\mu_{12}^{\delta} \simeq 3{,}2 \cdot 10^{-4}$ c^{-1}.

Таким образом, из анализа двойной двухуровневой модели СФЭ - CO_2 экстракции комплекса урана в присутствии воды следует, что эффективность экстракции комплекса урана растет с увеличением количества свободной воды. Максимальная эффективность экстракции достигается для количества воды полностью связанной комплексом урана и соответствующего ее пределу растворимости в СК CO_2. Дальнейшее увеличение количества добавленной воды уменьшает эффективность экстракции.

ВЫВОДЫ

В работе представлены результаты экспериментального исследования влияния воды на эффективность СФЭ-CO_2 экстракции комплексов урана из природных минералов при давлениях углекислоты до 20,0 МПа и температурах до 45°С. Показано, что мольная доля растворенной в СК CO_2 воды в указанном диапазоне давлений и температур практически постоянна. Определено, что зависимость эффективности экстракции от количества воды имеет пиковый характер, т.е. при определенных давлении и температуре эффективность экстракции максимальна. Максимальная эффективность экстракции достигается для количества воды, которое соответствует ее пределу растворимости в СК CO_2. Излишнее количество воды уменьшает эффективность экстракции. Определены условия, при которых достигается максимальная эффективность СФЭ-CO_2 экстракции комплексов урана из природных минералов, а также из низкообогащенных отвалов урановых руд или техногенных месторождений. Предложена двухуровневая модель для описания СФЭ - CO_2 экстракции воды. Модель имеет хорошее качественное и количественное соответствие с экспериментальными данными. Полученные аналитические выражения отражают физическую картину процесса, и объясняют как наличие предела растворимости воды, так и малую скорость ее растворения в СК CO_2. Предложена двойная двухуровневая модель СФЭ - CO_2 экстракции комплекса урана в присутствии воды. Двойная модель имеет хорошее качественное и количественное соответствие с экспериментальными данными. С использованием двойной модели аналитически описано наблюдаемое в эксперименте уменьшение эффективности экстракции комплекса урана с увеличением количества свободной воды. В рамках двойной модели подтверждено, что максимальная эффективность экстракции достигается для количества воды, полностью связанной комплексом урана, и соответствующего ее пределу растворимости в СК CO_2. Предложенные модели позволили оценить величины вероятностей индуцированных переходов в двухуровневых системах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ran F., Adamantiades A., Kenton Dj., Braun Ch. Spravochnik po yadernoy energotehnologii. – M.: Energoatomizdat, 1989, 752 s.
2. Samsonov M.D., Shadrin A.Yu., Shafikov D.N., Kulyako Yu.M., Myasoedov B.F. Sverhkriticheskaya flyuidnaya ekstrakciya v sovremennoi radiohimii // Radiohomiya. – 2011. - T. 53. - Vyp. 2. - S.97-107.
3. Kovalenko G.D., Voloshin V.S. Osnovi radiacionnoy ecologii. – Mariupol: Izd. Renta, 2009. - 298 s.
4. Tyutyunnikov A. Uranovie othodi ugrojayut vostoku Ukraini // Gazeta 2000, 14 iyulya 2006, s.V5.
5. Myasoedov B.F., Kulyako Yu.M., Trofimov T.I., Samsonov M.D., Malikov D.A., Mariutina T.A., Spivakov B.Ya. Recovery of *U* and *Pu* from simulated spent nuclear fuel by adducts of organic reagents with HNO_3 followed by their separation from fission products by countercurrent chromatography // Radiochim. Acta. – 2009. - Vol. 97. - Issue 9. - P.473-477.
6. Borts B.V., Kazarinov Yu.G., Neklyudov I.M., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. Sverhkriticheskaya CO_2 ekstrakciya kompleksov urana iz granitov // Fizika I himiya obrabotki materialov. – 2010. - № 3. - S. 94-96.
7. Borts B.V., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. Izvlechenie urana iz materialov tehnogennih mestorojdeniy metodom sverhkriticheskoi flyuidnoi ekstrakcii // Yaderna ta radiciina bezpeca. – 2012. - T. 1(53). - S.61-63.
8. Shadrin A.Yu. Ekstrakciya aktinoidov rastvorami kompleksonov v sverhkriticheskom I jidkom diokside ugleroda. Trudi Radievogo instituta im. V.G. Hlopina. – 2007. - T. XII. - S.20-43.
9. Sabirzyanov A.N., Il'in A.P., Akhunov A.R., Gumerov F.M. Solubility of Water in Supercritical Carbon Dioxide // High Temperature. – 2002. - Vol. 40. – №.2. - P. 203-206.
10. King M.B., Mubarak A., Kim J.D., Bott T. R. The Mutual Solubilities of Water with Supercritical and Liquid Carbon Dioxide // Journal of Supercritical Fluids. – 1992. – №.5. - P. 296-302.
11. Slezov V.V. Metod virtualnih sred v teorii fazovih prevrasheniy pervogo roda // FTT. – 2000. - T. 45. - Vyp. 4. - S. 733-740.
12. Kuklin V.M. O processah izlucheniya v neravnovesnyh sredah // The Journal of Kharkov National University, physical series "Nuclei, Particles, Fields". – 2010. - № 933. - Vyp. 4/48/. - S.4 – 27.
13. Karlov N.V. Lekcii po kvantovoy elektronike. – M.: Nauka, 1988.- 336 s.

УДК 539.219.3

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ АБСОРБЦИОННЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ДИФФУЗИИ

А.С. Посухов, В.Е. Семененко, Н.Г. Стервоедов, Т.А. Коваленко
Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
61108, пр. Курчатова, 31, г. Харьков
e-mail: posuhov@yandex.ru
Received 3 May 2012, accepted 22 May 2012

В работе представлены модифицированный абсорбционный метод для исследования диффузии в металлах и сплавах и структура приборного измерительного комплекса для определения ее параметров. Разработан способ градиентных измерений, с помощью которых реализуется определение энергии активации E и предэкспоненциального множителя D_o за один цикл диффузионного отжига. Проведены контрольные измерения параметров диффузии на сплавах никеля и алюминия, полученных направленной кристаллизацией. Полученные результаты по параметрам диффузии хорошо согласуются с известными литературными данными.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: диффузия, модифицированный абсорбционный метод, градиент температуры

MODIFIED ABSORPTION METHOD OF DIFFUSION PARAMETERS DETERMINATION

O.S. Posukhov, V.Y. Semenenko, M.G. Styervoyedov, T.O. Kovalenko
Karazin Kharkov National University
61108, Kurchatova ave, 31, Kharkov, Ukraine

Both the modified method for the study of diffusion in metals and alloys and the structure of instrumental measuring complex has been presented. The new method for the determination of activation energy E and preexponential factor Do for one cycle of the diffusion annealing has been developed. The results obtained for the diffusion parameters are in good agreement with published data.
KEY WODS: diffusion, modified absorption method, temperature gradient

МОДИФІКОВАНИЙ АБСОРБЦІЙНИЙ МЕТОД ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ДИФУЗІЇ

О.С. Посухов, В.Є. Семененко, М.Г. Стєрвоєдов, Т.О. Коваленко
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61108, пр. Курчатова, 31, м. Харків

У роботі представлено модифікований абсорбційний метод для дослідження дифузії у металах та сплавах, а також структуру приладового вимірювального комплексу для визначення її параметрів. Розроблено спосіб градієнтних вимірювань, за допомогою яких реалізується визначення енергії активації E та передекспоненціального множника D_o за один цикл дифузійного відпалу. Проведено контрольні вимірювання параметрів дифузії на сплавах нікелю та алюмінію, отриманих направленою кристалізацією. Отримані результати за параметрами дифузії добре співпадають з відомими літературними даними.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: дифузія, модифікований абсорбційний метод, градієнт температури

Диффузия является физическим процессом, определяющим стабильность и изменение физико-механических свойств металлов и сплавов при критических режимах эксплуатации – воздействии высоких температур, механических нагрузок, радиационного облучения, сильных электрических и магнитных полей. Знание численных значений основных параметров диффузии - энергии активации E и предэкспоненциального множителя D_o в зависимости коэффициента диффузии D от температуры T при различных силовых воздействиях на образец:

$$D = D_o \exp(- E / RT), \quad (1)$$

где R – постоянная Ридберга, позволяет определить, в конечном счете, возможность применения сплава в требуемых сложных условиях. Эти данные получают из графиков зависимости логарифма коэффициента диффузии от обратной температуры.

Коэффициенты диффузии в диапазоне температур могут быть получены многими методами, в том числе и методом радиоактивной метки. Одним из высокочувствительных неразрушающих методов является абсорбционный метод, позволяющий с высокой точностью определить основные параметры диффузии по изменению активности радиоактивного изотопа на поверхности исследуемого образца до и после диффузионного отжига. Однако, этот метод требует для исследования наличия большого количества одинаково подготовленных образцов, каждый из которых отжигается в высоком вакууме определенное время t при заданной температуре T. При этом набегает значительное суммарное время исследования, а также проявляются погрешности, связанные с неидентичностью подготовленных образцов, конечным временем подъема температуры до заданного для каждого образца уровня, изменения поверхностной активности за счет малого периода полураспада применяемого изотопа и другие составляющие, влияющие на точность экспериментов.

Целью настоящей работы явилось увеличение экспрессности измерений с одновременным улучшением

© Posukhov O.S., Semenenko V.Y., Styervoyedov M.G., Kovalenko T.O., 2012

точности экспериментальных исследований диффузии абсорбционным методом с использованием радиоактивных изотопов, а целью - разработка способа градиентных измерений, с помощью которых можно реализовать определение энергии активации E и предэкспоненциального множителя D_o за один цикл диффузионного отжига, а также его реализация в виде приборного комплекса.

ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В основу предлагаемого способа измерений взят классический абсорбционный метод определения параметров диффузии с помощью радиоактивных изотопов [1]. Образец для исследования изготавливается в виде прямоугольной пластины, толщина которой l много больше наносимого тонкого слоя диффундирующего элемента h, ($h<<l$), а длина определяется количеством точек измерения, эквивалентным количеству образцов при классических измерениях в заданном диапазона температур. В образце делаются прорези, делящие поверхность образца на прямоугольные элементы, по площади, совпадающие с апертурным окном детектора излучения. Через маску вакуумным напылением наносится слой радиоактивного изотопа. Площадь отверстий в маске меньше площади прямоугольных элементов для исключения влияния на точность последующих измерений возможной поверхностной диффузии. После нанесения изотопа измеряется его начальная активность J_o на установке, схема которой аналогична [2]. При правильно подобранных режимах напыления и on-line контроле толщины наносимой пленки поверхностная активность по всей длине образца с точностью до статистической погрешности одинакова. На следующем этапе исследования образец подвергается диффузионному отжигу при наличии градиента температуры вдоль образца. На рис. 1 схематично приведен способ диффузионного отжига в таком режиме.

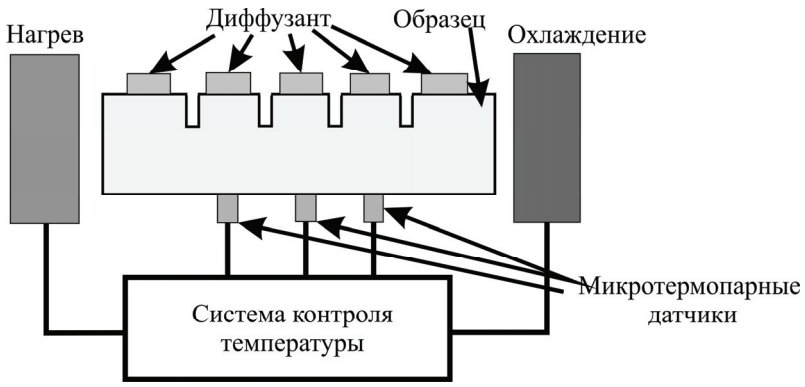


Рис.1. Схема диффузионного отжига при наличии градиента температуры

Один конец образца подвергается нагреву, в то время как второй охлаждается проточной водой до комнатной температуры. При этом осуществляется непрерывный контроль распределения температуры вдоль образца с помощью многоканальной системы микротермопарного контроля температуры. Различная температура отдельных участков образца является причиной различий коэффициентов диффузии и различной скорости проникновения диффундирующего элемента вглубь образца, причем скорость протекания диффузии будет тем больше, чем выше температура диффузионного отжига в локальном месте. При взаимной двухкомпонентной диффузии наблюдается как диффузия компонента А (радиоактивный диффузант) в компонент Б (материал матрицы), так и диффузия компонента Б в компонент А. Но так как слой радиоактивного компонента достаточно тонок, то изменением активности за счет диффузии атомов исследуемого образца можно пренебречь, также, как и самопоглощением излучения в радиоактивном слое.

После диффузионного отжига проводится повторное измерение активности J на поверхности. При этом охлаждаемый конец пластины используется как контрольный образец, практически не подвергнутый диффузионному отжигу.

Модифицированная схема комплекса для измерения активности на поверхности представлена на рис. 2. Получаемые данные об активности после предварительной обработки передаются в персональный компьютер, где подвергаются дальнейшему анализу и выводятся на интерфейс программы пользователя в графическом и/или табличном виде.

Так как слой образца толщиной x ослабляет излучение в $\exp(-\mu x)$ раз, отношение активностей на поверхности можно выразить [3] соотношением:

$$\frac{J_t}{J_0} = \exp(z^2)(1 - erf(z)), \tag{2}$$

где $z = \mu\sqrt{Dt}$, а μ - коэффициент поглощения излучения материалом матрицы.

По времени диффузионного отжига t и известному μ находятся коэффициенты диффузии D для всех температурных участков образца. По измеренным значениям D строится график зависимости логарифма D от обратной температуры, что дает возможность получить численные значения энергии активации и

предэкспоненциального множителя.

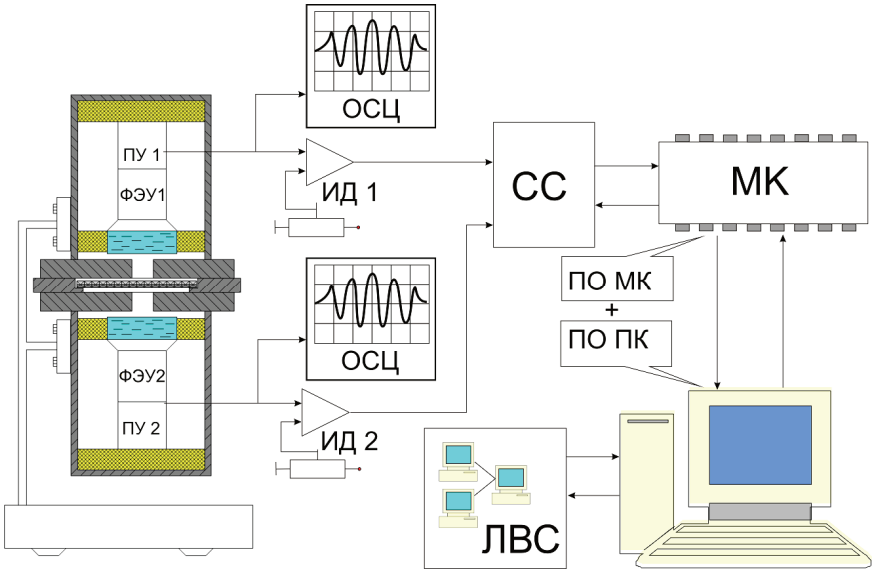


Рис.2. Структурная схема комплекса для измерения активности на поверхности образца

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Модифицированный метод определения параметров диффузии в металлах и сплавах был опробован на сплавах Al-Ni, полученных направленной кристаллизацией. В ходе контрольного исследования образец подвергся диффузионному отжигу, при котором создавался температурный градиент в интервале 30-570 ^{O}C.

Были измерены активности каждого участка пластины, по которым рассчитаны коэффициенты диффузии. Алгоритм измерения активности с циклическим измерением активности контрольного участка образца дал возможность повысить точность измерения исключением погрешности, вызванной нестабильностью электронной аппаратуры и за счет учета изменения активности при малой постоянной распада радиоактивного элемента (рис.3.).

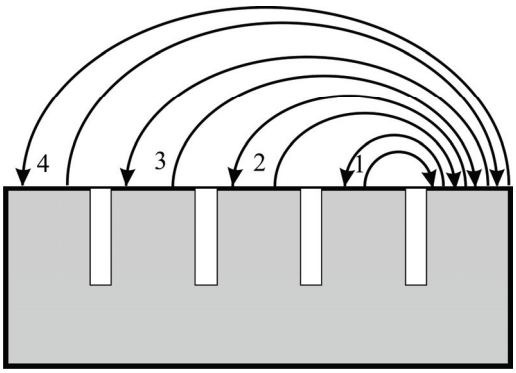


Рис.3. Использование контрольного образца

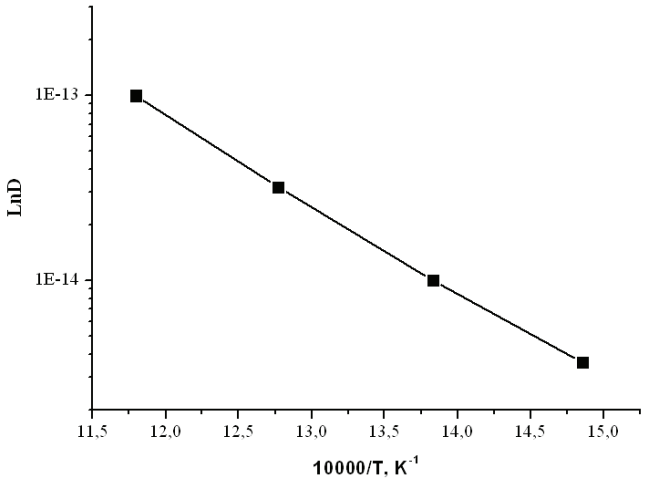


Рис.4. Зависимость коэффициента диффузии от обратной температуры

Полученная зависимость (рис. 4.) согласуется с результатами, полученными в работе [4]. Температурная зависимость коэффициента диффузии при этом определяется следующим выражением:

$$D = (1{,}1 \pm 0{,}1) \cdot 10^{-7} \exp\left(-\frac{98550 \pm 590}{RT}\right), \text{ (см}^2\text{с}^{-1}\text{)}. \quad (3)$$

ВЫВОДЫ

Модифицированный абсорбционный метод позволяет значительно снизить время определения энергии активации и предэкспоненциального множителя при исследовании температурной зависимости коэффициентов диффузии благодаря наличию градиента температуры, сформированного в образце во время диффузионного отжига.

Получение всех необходимых данных в течение одного эксперимента позволяет исключить погрешность, вносимую внешними факторами, например, неидентичностью изучаемых образцов, различным временем подъема температуры до температуры диффузионного отжига и соответственно различного времени охлаждения, погрешностью измерения активности за счет распада радиоактивного элемента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mehrer H. Diffusion in solids. – Springer, 2007. – 651 p.
2. Borodavka A.E., Posukhov A.S., Semenenko V.E., Stervoedov S.N. Komp'yuterizirovannyy kompleks dlya issledovaniya protsessov diffuzii v metalakh i splavakh radioaktivnym metodom // Radiofizika i elektronika. – 2005. – T.10. – №2. – S.326 – 330.
3. Larikov L.N., Isaychev V.I. Diffuziya v metallakh i splavakh. – Kiev: Naukova dumka, 1987. – 510s.
4. Azarenkov N.A., Litovchenko S.V., Semenenko V.E., Stervoedov N.G., Posukhov A.S. Modelirovanie difuzionnykh protsessov i eksperimental'noe opredelenie parametrov diffuzii v konstruktsionnykh materialakh s ispol'zovaniem radioaktivnykh izotopov // VANT, Ser. Fizika radiatsionnykh povrezhdeniy i radiatsionnoe materialovedenie (88). – 2007. – №5. – S.76 – 81.

УДК 519.6, 537.87

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СОПРОВОЖДАЮЩЕГО ОКНА В МЕТОДЕ BOR-FDTD ДЛЯ РАСЧЁТА ПОВЕДЕНИЯ ПРЕДВЕСТНИКА В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВОЛНОВОДЕ

А.Ю. Бутрым, Е.О. Коломиец, М.Н. Лёгенький
Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
61022, площадь Свободы, 4, Харьков, Украина
e-mail: elkayalenka@yandex.ua
Received 5 May 2012, accepted 22 May 2012

В статье рассматривается численное решение уравнений Максвелла на основе метода конечных разностей во временной области для тел вращения (BOR-FDTD) в открытой области с использованием сопровождающего окна, что позволило провести вычисления для долговременного распространения импульсного предвестника в диэлектрическом волноводе.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: метод конечных разностей для тел вращения, BOR-FDTD, предвестник, диэлектрический волновод

USING THE ACCOMPANYING WINDOW IN BOR-FDTD METHOD FOR THE CALCULATION OF CONDUCT PRECURSOR IN THE DIELECTRIC WAVEGUIDE

A. Butrym, L. Kolomietc, M. Legenkiy
Kharkiv national university named V.N. Karazin
61022, sq. Svobody, 4, Kharkiv, Ukraine
The paper deals with numerical solution of Maxwell equations by the method of finite differences in the time domain for bodies of revolution (BOR-FDTD) in an open domain using moving frame. The latter made possible to calculate long time propagation of a pulse precursor in a dielectric waveguide.
KEYWORDS: method of finite differences in the time domain for bodies of revolution, BOR-FDTD, precursor, dielectric waveguide

ВИКОРИСТАННЯ СУПРОВОДЖУЮЧОГО ВІКНА В МЕТОДІ BOR-FDTD ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ПОВЕДІНКИ ПЕРЕДВІСТНИКА В ДІЕЛЕКТРИЧНОМУ ХВИЛЕВОДІ

О.Ю. Бутрим, О.О. Коломієць, М.Н. Легенький
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61022, майдан Свободи, 4, Харків, Україна
У статті розглядається чисельний розв'язок рівнянь Максвела на основі методу скінченних різниць у часовій області для тіл обертання (BOR-FDTD) у відкритій області з використанням супроводжуючого вікна, що дозволило провести розрахунки для довготривалого поширення імпульсного передвісника у діелектричному хвилеводі.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: метод скінченних різниць для тіл обертання, BOR-FDTD, передвісник, діелектричний хвилевід

ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЕЁ АКТУАЛЬНОСТЬ

В работе [1] авторами был выявлен эффект распространения импульсной поверхностной волны в диэлектрическом волноводе. Было установлено, что при импульсном возбуждении диэлектрического волновода, возникает импульсная поверхностная волна, распространяющаяся со скоростью света в свободном пространстве и создающая внутри волновода волновую структуру в виде конусов типа излучения Черенкова, переотражающихся между границами волновода под критическим углом. Представляет интерес исследовать эту волну при распространении на достаточно большое расстояние.

Для рассматриваемой задачи использование численных методов во временной области [2,3] наталкивается на сложности, связанные с возрастанием времени вычислений за счёт существенного увеличения области пространства, требующей дискретизации при изучении распространения импульса на значительные расстояния. Так, с увеличением расстояния, проходимого импульсом, размеры области расчёта растут линейно, а время счета увеличивается квадратично. Для преодоления этой трудности был использован подход на основе сопровождающего окна [4,5], который состоит в том, что вычисления производятся не во всём пространстве, занимаемом волной, а только на участке постоянной длины, движущемся вместе с фронтом волны. При этом область расчёта остаётся постоянной по размеру, и время счёта растёт лишь линейно с увеличением проходимого волной расстояния.

Таким образом, целью работы являлось создание вычислительного алгоритма на основе метода BOR-FDTD [1-2] и метода сопровождающего окна [4,5] с использованием поглощающих граничных условий на основе метода PML для ограничения открытой области пространства [3] и моделирование с его помощью долговременного распространения импульсного предвестника в круглом диэлектрическом волноводе.

МЕТОД РАСЧЁТА

В рамках метода BOR-FDTD поля представляются в виде независимых угловых гармоник, что позволяет от трёхмерных уравнений Максвелла перейти к двумерной задаче в цилиндрических координатах ρ, z для

© Butrym A., Kolomietc L., Legenkiy M., 2012

независимых угловых мод. Формулы обновления компонент поля для этого случая могут быть найдены в [2,3].

Для ограничения области вычислений в радиальном направлении, в отличие от используемых в [4,5] поглощающих граничных условий, в работе был использован идеально согласованный поглощающий слой (PML), особенности применения которого в BOR-FDTD и соответствующие расчётные формулы приведены в [3]. Это позволило избежать проблем с нарастанием поля в радиальном направлении, описанных в [4], и связанной с этим необходимости увеличения расчётного объёма в радиальном направлении, чтобы боковые стенки не оказывали существенного влияния на поведение полей в волноводе.

Вычислительная схема BOR-FDTD является условно-стабильной, то есть шаг по времени должен выбираться исходя из условия стабильности [2], иначе схема оказывается нестабильной, и возникают нефизичные нарастающие решения. Для согласования шага движения окна с шагом по времени, необходимо использовать $c_0\Delta t = \Delta z / 2$ (где c_0 - скорость света в свободном пространстве), что обеспечивает стабильную схему для всех возможных угловых гармоник и не приводит к появлению существенной численной дисперсии [2]. При этом после каждых двух временных шагов все поля в расчётной области сдвигаются назад по отношению к направлению распространения волны на одну ячейку. Впереди добавляется ячейка с нулевыми полями, что не должно возмущать решение, так как в эту область волна не могла ещё дойти вследствие конечности скорости распространения электромагнитного поля и в ней может присутствовать только небольшое по амплитуде нефизичное поле, наличие которого обусловлено численной дисперсией конечно-разностной схемы. Поля удаляемой ячейки временно сохраняются для использования при обновлении полей на задней границе на следующем временном шаге.

Здесь в отличие от [4, 5], поглощающие граничные условия использовались только в радиальном направлении, так как задняя граница рассчитывалась с учётом удаляемых ячеек, а на передней добавлялись нулевые значения.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

С помощью предложенного метода была промоделирована структура, изображённая на рис.1. Это круглый диэлектрический волновод с постоянной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 12$ и радиусом a. Внутри диэлектрика возбуждается импульсная волна с помощью кольцевого магнитного тока следующего вида:

$$\hat{\vec{J}}(\rho,\varphi,z,t) = \vec{\varphi}_0 \exp\left(-\left(\frac{\rho-\rho_0}{0.12a}\right)^2\right)\exp\left(-\left(\frac{t-t_0}{T}\right)^2\right)\cos(\varphi)\delta(z-z_0), \quad (1)$$

$$a = 1{,}1;\ r_0 = 0{,}5a;\ T = a/(5c);\ t_0 = 5T.$$

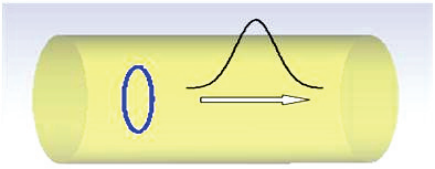


Рис.1. Геометрия задачи.

Размер области вычислений составил 60 ячеек по радиусу (из них 10 ячеек занимает поглощающий слой) и 200 ячеек по длине. Размер ячейки составляет 1/20 радиуса волновода a, шаг по времени равен $\Delta t = 0{,}5\Delta z / c_0$.

На рис.2 представлены распределения продольной составляющей напряженности электрического поля в различные моменты времени. Для наглядности распределение поля показано по обе стороны от оси путём симметричного дублирования расчётной области $0 < \rho < 60\Delta\rho$ для отрицательных ρ. Поля показаны в последовательные моменты времени с шагом $150\Delta t$. Белыми стрелками на графиках помечено положение центра излучаемого импульса (1) с учётом запаздывания на распространение в воздухе со скоростью c_0.

Первые 400 временных шагов, пока волна заполняла вычислительный объём, сдвиг окна не выполнялся, а на левой границе использовались симметричные граничные условия. После 400-го шага началось движение окна со скоростью c_0, при этом передняя часть волны (предвестник) выглядит как «замороженная», её скелетон (линии соединяющие максимумы двумерного графика [6]) не изменяется, а амплитуда медленно убывает по ходу распространения. Это означает, что предвестник распространяется вдоль волновода со скоростью окна c_0, теряя энергию за счёт увеличения пространственной протяжённости от переднего фронта поля до фронта волноводной моды, движущейся с замедленной скоростью позади предвестника.

Результаты расчётов с использованием окна сравнивались с результатами, получаемыми при большой неподвижной области расчёта, наблюдались пренебрежимо малые расхождения вблизи переднего фронта

волны, обусловленные отражением численных артефактов, движущихся со скоростью больше скорости света, от передней границы окна, на которой фактически использовались нулевые граничные условия.

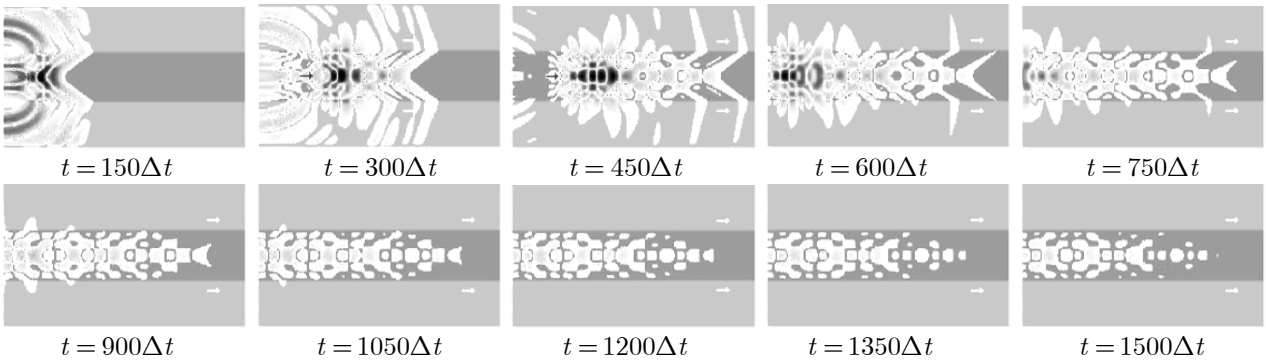


Рис.2. Пространственные распределения E_z в последовательные моменты времени. Тёмно-серым выделена область, занимаемая диэлектриком. Показана вычислительная область размером $200\Delta z$ вдоль волновода и $\pm 60\Delta\rho$ от оси волновода.

ВЫВОДЫ

Предложенный подход позволил провести моделирование распространения импульсной волны в диэлектрическом волноводе на значительное расстояние, при этом время счёта растёт лишь линейно с увеличением проходимого волной пути. Численный эксперимент показал совпадение результатов расчёта в неподвижной системе с расчётом в движущемся окне с пренебрежимо малыми расхождениями на переднем фронте, обусловленными отражением численных артефактов от передней границы, на которой поля дополнялись нулями при вычислении с движущимся окном.

В дальнейшем предполагается использовать предложенный расчётный метод для более тщательного изучения явления распространения импульсного предвестника, в частности необходимо установить закон затухания волны со временем и вдоль волновода, рассмотреть различные формы возбуждающего сигнала, в том числе исследовать распространение цифровых сигналов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Legenkiy M.N., Butrym A.Y., Pulse signals in open circular dielectric waveguide // Progress In Electromagnetics Research Letters. – 2011. - Vol.22. - P.9-17.
2. Allen Taflove A., Hagness S.C.. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. – Artech House, Inc., (2nd Edition), 2000. – 852 p.
3. Yu W., Mittra R. Parallel Finite-Difference Time-Domain Method, – Artech House, Inc., 2006. – 262 p.
4. Pemper Y., et al. Moving Coordinate Frame FDTD Analysis of Long Range Tracking of Pulsed Fields in Graded Index Waveguides // Progress In Electromagnetics Research. – 2000. - Vol. 26. - P. 133-164.
5. Li Y., Wang J.. Application of Moving Coordinate FDTD Method on Electromagnetic Pulses Propagation // PIERS Proceedings, Xi'an, China, March 22-26, 2010. – P.192-195.
6. Lazorenko O.V., Chernogor L.F. Sverkhshirokopolosnye signaly i protsessy. Monografiya. – Khar'kov: Khar'kovskiy natsional'nyy universitet imeni V. N. Karazina, 2009. – 576 s.

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 організацій, 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 зарубежных авторов достаточно рефератов на русском и английском.

Наукове видання

Вісник Харківського національного університету

імені В.Н. Каразіна

№ 1001

серія: фізична

“Ядра, частинки, поля”

Збірник наукових праць

українською, російською, англійською мовами

Коректор - Коваленко Т.О.
Технічний редактор - Гірник С.А.
Комп’ютерне верстання - Гірник С.А.

Підписано до друку 12.03.2012. Формат 60х84 /8. Папір офсетний. Друк ризографічний.
Ум. друк. арк. 21,9. Обл.-вид. арк. 17,5.
Тираж 150 пр. Зам. № Ціна договірна

61022, Харків, майдан Свободи, 4
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Видавництво

Надруковано: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
61022, Харків, майдан Свободи 4, тел. +380-057-705-24-32
Свідоцтво суб’єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09