

СИБИРСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Научный журнал
Основан в 2006 году

2019. Том 14, № 4

СОДЕРЖАНИЕ

Физика высоких энергий, ускорителей и высокотемпературной плазмы

- Глинский В. В., Тимофеев И. В., Анненков В. В., Аржанников А. В. Численное моделирование электромагнитной эмиссии при инжекции электронного пучка в плазму с сильными поперечными градиентами плотности 5
- Труфанов Д. Ю., Зобов К. В., Бардаханов С. П., Завьялов А. П., Чакин И. К. Применение метода испарения вещества высокоэнергетическим пучком электронов для получения нанопорошка вольфрама 17

Физика жидкости, нейтральных и ионизованных газов

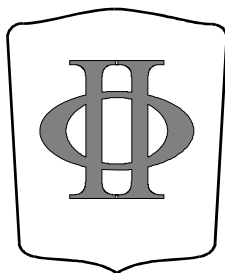
- Грек Г. Р., Катасонов М. М., Козлов В. В., Корнилов В. И., Крюков А. В., Садовский И. А. Управление ламинарно-турбулентным переходом на крыловом профиле путем распределенного отсоса через мелкоперфорированную поверхность 28
- Суслов Д. А., Литвинов И. В., Шторк С. И., Гореликов Е. Ю. Влияние переходных режимов на нестационарные вихревые явления в модели отсасывающей трубы гидротурбины 55
- Шайкин А. П., Галиев И. Р. Влияние интенсивности турбулентности на ширину зоны химических реакций и скорость распространения метановодородного пламени 69
- Прохоров Е. С. К расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеводов при недостатке кислорода 74

Физика твердого тела, полупроводников, наноструктур

- Рубцова Н. Н., Борисов Г. М., Ледовских Д. В. Исследование двухфотонного поглощения фемтосекундного ИК излучения методом «накачка – зондирование» в отражении от пластинки GaAs (001) 82
- Чернышев В. А., Архипов А. В. Кристаллическая структура редкоземельных примесных центров R^{3+} в CaF_2 : *ab initio* расчет 91

Физика химическая, биологическая, медицинская Синхротронное излучение: генерация и применение

- Андышева Е. В., Чанкина О. В., Храмова Е. П., Крестов П. В., Ракиун Я. В., Сороколетов Д. С. Сравнительный анализ элементного состава представителей рода *Dasiphora* из Приморского края и Республики Бурятия 103
- Информация для авторов 118



Сибирский физический журнал

Журнал адресован профессорско-преподавательскому составу университетов, научным работникам, аспирантам и студентам, которые интересуются новейшими результатами фундаментальных и прикладных исследований по различным направлениям физики и физико-технической информатики.

Редакция принимает к опубликованию обзоры и оригинальные научные статьи по тем направлениям физики, которые, главным образом, представлены на кафедрах физического факультета НГУ. Принимаются также к рассмотрению статьи по другим направлениям, если в ходе рецензирования подтверждается их высокий научный статус.

Мы приглашаем научные коллективы и отдельных авторов направлять к нам для опубликования материалы по следующим основным разделам:

- квантовая оптика, квантовая электроника;
- радиофизика и электроника;
- теоретическая и математическая физика;
- физика жидкости, нейтральных и ионизованных газов;
- физика высоких энергий, ускорителей и высокотемпературной плазмы;
- физика твердого тела, полупроводников, наноструктур;
- физика химическая, биологическая и медицинская;
- информатика, информационно-коммуникационные технологии;
- учебно-методическое обеспечение преподавания физики.

Периодичность выхода издания – 4 раза в год. Журнал включен в перечень ВАК выпускаемых в Российской Федерации научных и научно-технических изданий, в которых рекомендуется публикация основных результатов диссертаций на соискание ученой степени кандидата и доктора наук.

SIBERIAN JOURNAL OF PHYSICS

Scientific Journal
Since 2006
In Russian

2019. Volume 14, № 4

CONTENTS

High-Energy and Accelerator Physics, Physics of High-Temperature Plasma

- Glinskiy V. V., Timofeev I. V., Annenkov V. V., Arzhannikov A. V.* Computer Simulations of Electromagnetic Emissions Produced via Injection of Electron Beam into a Plasma with Strong Transverse Density Gradients 5
- Trufanov D. Yu., Zobov K. V., Bardakhanov S. P., Zavyalov A. P., Chakin I. K.* Application of the Method of Evaporation of a Substance by High-Energy Electron Beam to Produce Tungsten Nanopowder 17

Physics of a Fluid, Neutral and Ionized Gases

- Grekh G. R., Katasonov M. M., Kozlov V. V., Kornilov V. I., Kryukov A. V., Sadovskiy I. A.* Control of the Laminar-Turbulent Transition on the Wing Profile by Distributed Suction through a Finely Perforated Surface 28
- Suslov D. A., Litvinov I. V., Shtork S. I., Gorelikov E. Yu.* The Influence of Transient Regimes on Unsteady Vortex Phenomena in the Model of the Draft Tube of the Hydraulic Turbine 55
- Shaykin A. P., Galiev I. R.* Influence Intensity Turbulence on the Width of the Zone Chemical Reactions and Speed Distribution of Methane-Hydrogen Flame 69
- Prokhorov E. S.* To the Computation of Equilibrium States of Hydrocarbon Combustion Products under the Lack of Oxygen 74

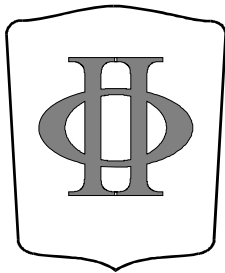
Solid-State and Semiconductor Physics, Physics of Nanostructures

- Rubtsova N. N., Borisov G. M., Ledovskikh D. V.* Investigation of Femtosecond IR Radiation Two-Photon Absorption by Pump-Probe Method in GaAs (001) Plate Reflection 82
- Chernyshev V. A., Arkhipov A. V.* The Crystal Structure of Rare-Earth Impurity Centers R^{3+} in MeF_2 : *ab initio* Calculation 91

Chemical, Biological and Medical Physics

Synchrotron Radiation: Generation and Application

- Andysheva E. V., Chankina O. V., Khramova E. P., Krestov P. V., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S.* Comparative Study of Element Composition of Species of the Genus *Dasiphora* (Rosaceae) in the Primorsky Region and Republic of Buryatia 103
- Instructions to Contributors 118



Siberian Journal of Physics

The magazine is addressed to the faculty of universities, science officers, post-graduate students and students who are interested in the newest results fundamental and applied researches in various directions of physics and physico-technical computer science.

Edition accepts to publication reviews and original scientific articles in those directions of physics which, mainly, are presented on faculties of physical faculty of NSU. Are accepted also to viewing article in other directions if during reviewing their high title proves to be true.

We invite scientific personnel and separate authors to guide to us for publication materials on following basic sections:

- Quantum optics, quantum electronics;
- Radiophysics and electronics;
- The theoretical and mathematical physics;
- Physics of a fluid, neutral and ionized gases;
- High-energy and accelerator physics, physics of high-temperature plasma;
- Solid-state and semiconductor physics, physics of nanostructures;
- Chemical, biological and medical physics;
- Computer science, information-communication technologies;
- Educational and methodical provision of teaching of physics

Periodicity of an exit of the edition – 4 times a year. The magazine is included in list Higher Attestation Committee of scientific and technical editions in Russian Federation in which the publication of the basic results of dissertations on competition of a scientific degree of the doctor and candidate of sciences is recommended.

Editor in Chief Andrej V. Arzhannikov
Executive Secretary Sofiya A. Arzhannikova

Editorial Board of the Journal

S. V. Alekseenko, A. V. Arzhannikov, A. L. Aseev, S. N. Bagaev, A. E. Bondar
S. A. Dzyuba, S. I. Eidelman, V. S. Fadin, V. M. Fomin, A. A. Ivanov, B. A. Knyazev, V. V. Kozlov, E. V. Kozyrev
A. V. Latyshev, I. B. Logashenko, V. P. Maltsev, A. G. Pogosov, A. L. Reznik, A. V. Shalagin
V. I. Telnov, S. V. Tsibulya

*The series is published quarterly in Russian since 2006
by Novosibirsk State University Press*

The address for correspondence
Physics Department, Novosibirsk State University
Pirogov Street 2, Novosibirsk, 630090, Russia
Tel. +7 (383) 363 44 25
E-mail address: physics@vestnik.nsu.ru
On-line version: <http://elibrary.ru>; <http://www.phys.nsu.ru/vestnik/>

УДК 533.951.2, 533.9.01
DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-5-16

Численное моделирование электромагнитной эмиссии при инжекции электронного пучка в плазму с сильными поперечными градиентами плотности

В. В. Глинский^{1,2}, И. В. Тимофеев¹, В. В. Анненков^{1,2}, А. В. Аржанников^{1,2}

¹ Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия

Аннотация

Недавние эксперименты по инжекции килоамперного электронного пучка в замагниченную плазму на установке ГОЛ-ПЭТ показали, что мощность субтерагерцового излучения, выходящего вдоль магнитного поля, возрастает более чем на порядок, если в плазме предварительно созданы сильные поперечные градиенты плотности. В данной работе влияние поперечных неоднородностей плотности плазмы на эффективность генерации электромагнитного излучения вблизи гармоник плазменной частоты изучается с помощью численного моделирования на основе метода частиц в ячейках. Расчеты, проведенные для реальной относительной плотности пучка и реальных пространственных масштабов неоднородности, показали, что пучковая неустойчивость развивается только в ямах плотности, а малый поперечный размер ее локализации, сравнимый с длиной волны, способствует более эффективной конверсии неустойчивых колебаний в электромагнитные. Несмотря на то, что излучение на плазменной частоте оказывается запертым поперек ведущего магнитного поля, оно может покидать область генерации при уменьшении плотности плазменного столба в продольном направлении.

Ключевые слова

электромагнитное излучение, пучково-плазменное взаимодействие, линейная конверсия мод

Источник финансирования

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-12-00250). Вычисления проведены с использованием ресурсов Центра научных ИТ-сервисов ИВТ СО РАН.

Для цитирования

Глинский В. В., Тимофеев И. В., Анненков В. В., Аржанников А. В. Численное моделирование электромагнитной эмиссии при инжекции электронного пучка в плазму с сильными поперечными градиентами плотности // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 5–16. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-5-16

Computer Simulations of Electromagnetic Emissions Produced via Injection of Electron Beam into a Plasma with Strong Transverse Density Gradients

V. V. Glinskiy^{1,2}, I. V. Timofeev¹, V. V. Annenkov^{1,2}, A. V. Arzhannikov^{1,2}

¹ Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

² Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

Abstract

Recent experiments on the injection of kiloampere electron beams into a magnetized plasma at the GOL-PET facility have shown that the power of sub-terahertz radiation escaping from the plasma along the magnetic field increases

© В. В. Глинский, И. В. Тимофеев, В. В. Анненков, А. В. Аржанников, 2019

by more than an order of magnitude if strong transverse density gradients are preliminarily created in the plasma. In this paper, the influence of transverse inhomogeneities of plasma density on the efficiency of electromagnetic radiation generation near the harmonics of the plasma frequency is studied using particle-in-cell simulations. Simulations performed for the real relative density of the beam and the real spatial scales of the inhomogeneity show that the beam instability develops only in the density wells, and the small transverse size of its localization comparable with the wavelength contributes to a more efficient conversion of unstable oscillations into electromagnetic ones. Despite the fact that radiation at the plasma frequency is blocked across the leading magnetic field, it can leave the generation region with the decrease of the plasma density in the longitudinal direction.

Keywords

electromagnetic radiation, beam-plasma interaction, linear mode conversion

Funding

This work is supported by the Russian Scientific Foundation (project number 19-12-00250). Simulations were carried out using computational resources of the Center of scientific IT-services of ICT SB RAS.

For citation

Glinskiy V. V., Timofeev I. V., Annenkov V. V., Arzhannikov A. V. Computer Simulations of Electromagnetic Emissions Produced via Injection of Electron Beam into a Plasma with Strong Transverse Density Gradients. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 5–16. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-5-16

Введение

Генерация электромагнитного (ЭМ) излучения вблизи гармоник плазменной частоты в процессе коллективного взаимодействия плазмы с потоками электронов является одной из фундаментальных проблем физики плазмы, которая в настоящее время активно изучается как применительно к солнечным радио [1–3] и субтерагерцовым [4; 5] вспышкам, так и в связи с разработкой мощного источника терагерцового излучения [6; 7]. В терагерцовой области спектра методы, основанные на коллективном возбуждении плазменных колебаний и их дальнейшей конверсии в электромагнитные волны, имеют ряд преимуществ по сравнению со стандартными методами вакуумной электроники. В частности, плазма позволяет использовать сильнооточные электронные пучки мультигигаваттной мощности, а частота излучения, привязанная к гармоникам плазменной частоты, может легко перестраиваться за счет вариации плотности плазмы. Теоретические и численные исследования последних лет показывают, что эффективность преобразования мощности электронного пучка в мощность излучения в подобных схемах может достигать нескольких процентов [8–10]. Это открывает принципиальную возможность генерации терагерцовых импульсов гигаваттного уровня мощности.

Экспериментальное изучение электромагнитной эмиссии в терагерцовом диапазоне частот, возникающей в процессе инжекции в плазму электронного пучка с энергией 0,5–1 МэВ и током 10–20 кА, началось в 2010–2014 гг. на установках ГОЛ-3 и ГОЛ-3Т [11–13]. В настоящее время эти исследования продолжаются на установке ГОЛ-ПЭТ [14; 15] в Институте ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН. Недавние эксперименты [15] на этой установке показали, что электромагнитное излучение вблизи плазменной частоты (150–200 ГГц) генерируется преимущественно вдоль ведущего магнитного поля, а его мощность возрастает в 10–30 раз, если в плазме предварительно создается сильно неоднородный радиальный профиль плотности. Полная мощность излучения в режиме с сильными поперечными градиентами плотности плазмы оценивается на уровне 4 МВт. Измерения с помощью системы Томсоновского рассеяния показали, что в отдельных выстрелах плотность плазмы может меняться в несколько раз на длине 0,5 см. В некоторых выстрелах на поперечном профиле плотности плазмы наблюдается квазипериодическая структура (рис. 1). Очевидно, что столь сильные градиенты плотности должны существенно влиять как на линейную стадию раскачки пучковой неустойчивости, так и на эффективность конверсии неустойчивых плазменных колебаний в электромагнитные волны, способные выходить из плазменного столба. Поскольку характерный масштаб неоднородности оказывается сравним с длиной волны возбуждаемых пучком плазменных колебаний, стандартные методы анализа волновых процессов на основе приближения геометрической оптики в этих условиях теряют свою применимость.

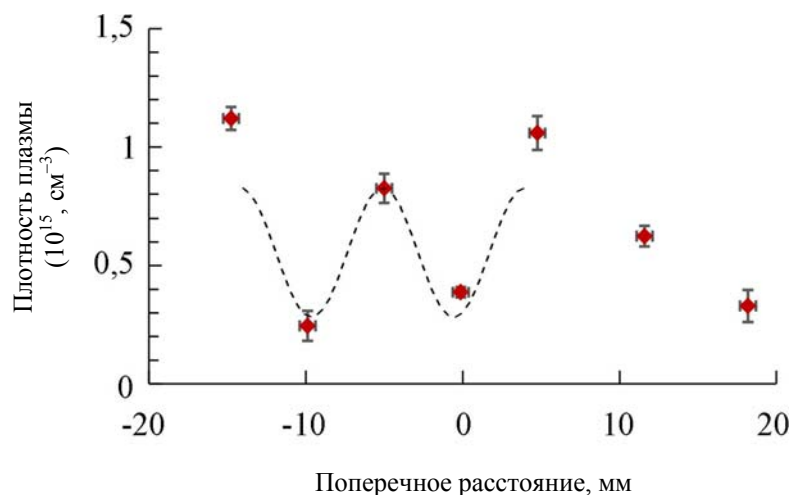


Рис. 1. Радиальный профиль плотности плазмы:
 точки – результаты экспериментальных измерений из работы [15],
 штрихованная линия – аппроксимация периодической функцией $n/n_0 = 1 + 0,5\cos(2\pi r/L)$,
 где $n_0 = 5,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $L = 9,06 \text{ мм}$

Fig. 1. Radial profile of plasma density:
 the points – results of experimental measurements from the paper [15],
 the dashed line – approximation by the periodic function $n/n_0 = 1 + 0.5 \cos(2\pi r/L)$,
 where $n_0 = 5.5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $L = 9.06 \text{ mm}$

В данной работе для изучения основных особенностей развития пучковой неустойчивости в сильно неоднородной плазме и генерации ЭМ излучения на гармониках плазменной частоты в этих условиях используется численное моделирование на основе метода частиц в ячейках (Particle In Cell, PIC). PIC моделирование проводится для тех значений относительной плотности пучка и пространственного масштаба поперечной неоднородности, которые были реализованы в пучково-плазменном эксперименте [15], что позволяет проводить сравнение с его результатами.

PIC модель

Для моделирования самосогласованной динамики пучково-плазменной системы в возбуждаемых электромагнитных полях мы используем параллельный 2D3V PIC код на основе метода частиц в ячейках, реализованный для сопроцессоров Nvidia [16]. Электромагнитные поля вычисляются при помощи стандартного алгоритма с использованием метода конечных разностей во временной области (FDTD) [17]. Для движения макрочастиц используется схема с перешагиванием [18], а для вычисления токов – сохраняющая заряд схема Езиркепова [19]. Чтобы обеспечить непрерывный приток частиц в систему, в численной модели реализованы открытые граничные условия. Это предполагает использование специальных буферов, в которых поддерживаются заданные распределения частиц пучка и плазмы по импульсу. Подробное описание соответствующего алгоритма можно найти в работе [20].

Схематический вид расчетной области показан на рис. 2. Центральная часть этой области занята слоем водородной плазмы конечной ширины, который в 2D3V геометрии предполагается неограниченным и однородным вдоль оси z . Электроны внутри слоя первоначально располагаются в тех же пространственных точках, что ионы, а электрические и магнитные поля, за исключением постоянного и однородного ведущего магнитного поля B_x , повсюду равны нулю. Для изучения того влияния, которое оказывают поперечные градиенты плотности плазмы на эффективность генерации ЭМ волн, в работе моделируется два пространственных

распределения плотности: (1) однородное распределение $n(x,y) = 1$ и (2) канал с пониженной плотностью, поперечный профиль которого описывается функцией $n(x) = 1 + 0,5\cos(2\pi y/L)$, аппроксимирующей экспериментальные точки на рис. 1. За область релаксации пучка канал пониженной плотности искривлен в плоскости (x, y) с целью вывода ЭМ излучения на плазменной частоте в вакуум.

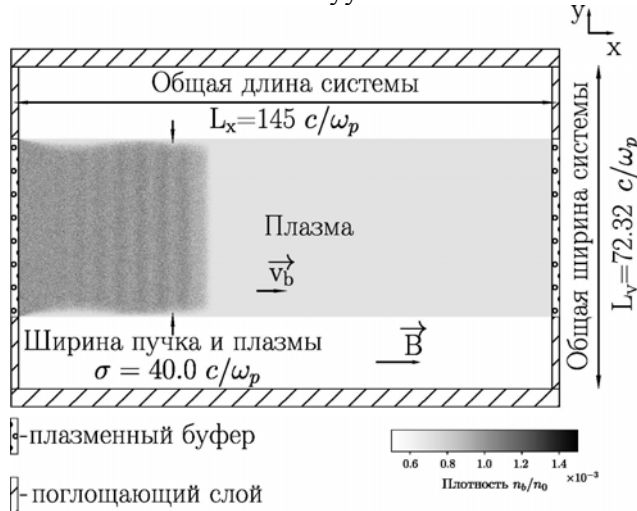


Рис. 2. Схема расчетной области

Fig. 2. The layout of simulation box

В силу вычислительной трудоемкости PIC расчетов поперечный размер плазмы σ выбран равным одному периоду экспериментально наблюдаемой вариации плотности L . В единицах c/ω_p , где c – скорость света, $\omega_p = (4\pi e^2 n_0 / m_e)^{1/2}$ – плазменная частота, e и m_e – заряд и масса электрона, а $n_0 = 5,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ – средняя по сечению плотность плазмы, поперечный размер плазменного слоя составляет величину $\sigma = 40c/\omega_p$. Размер плазмы вдоль магнитного поля определяется длиной релаксации пучка и для характерных параметров эксперимента может быть выбран равным $L_x = 145c/\omega_p$.

В начальный момент времени электроны плазмы имеют максвелловское распределение по импульсам $f_e \propto \exp(-\mathbf{p}^2 / (2\Delta p_e^2))$ с температурой $T_e = \Delta p_e^2 / (2m_e) = 80 \text{ эВ}$, а ионы считаются холодными. Из левого буфера в плазму равномерно по ее сечению инжектируются частицы пучка, которые характеризуются сдвинутым максвелловским распределением с относительной плотностью $n_b/n_0 = 0,001$, средней скоростью $v_b/c = 0,9$ и температурой $T_b = 64 \text{ кэВ}$. Величина удерживающего плазму постоянного и однородного магнитного поля $\mathbf{B} = (B_x, 0, 0)$ определяется отношением электронной циклотронной и плазменной частот, которое в интересующих нас экспериментах было на уровне $\Omega = eB_x / (m_e c \omega_p) = 0,4$.

Чтобы предотвратить накопление генерируемого электромагнитного излучения в системе, используются граничные поглощающие слои, внутри которых значения ЭМ полей на каждом временном шаге умножаются на коэффициент $k < 1$, зависящий от расстояния до границы. В предыдущих наших работах эти поглощающие слои использовались также для измерения мощности электромагнитного излучения, которое могло покидать плазму. В данной постановке задачи гораздо больший интерес для нас представляет регистрация излучения, которое распространяется вдоль плазменного столба и способно в дальнейшем выходить из плазмы вдоль силовых линий магнитного поля при постепенном снижении ее плотности. Использование поглощающего слоя на краях плазмы в этом случае не позволит разделить вклады потенциальных и электромагнитных волн, поэтому для измерения мощности продольного потока излучения мы будем вычислять вектор Пойнтинга через сечение плазменного столба.

В представленных расчетах шаг сетки в обоих направлениях составляет $h = 0,04 \text{ c}/\omega_p$, а шаг по времени равен $\tau = 0,02\omega_p^{-1}$. Приемлемый уровень шума достигается при использовании более миллиарда макрочастиц (100 макрочастиц с параболическим ядром каждого сорта в ячейке).

Результаты моделирования

В качестве первого шага на пути к пониманию процессов коллективной релаксации пучка в плазме с сильными градиентами плотности исследуем, можно ли увеличить эффективность ЭМ эмиссии по сравнению со случаем однородной плазмы за счет создания одной лишь поперечной неоднородности (канала с пониженной плотностью). Приближение геометрической оптики дает очевидный ответ: любые плазменные волны, раскачиваемые пучком на черенковском резонансе с продольным показателем преломления $N_{\parallel} > 1$, не могут линейно конвертироваться в ЭМ волны, показатель преломления которых в вакууме не превышает единицы, в силу сохранения величины $N_{\parallel}$ в продольно однородной плазме. Однако пространственный масштаб наблюдаемых в эксперименте на ГОЛ-ПЭТ поперечных неоднородностей плотности плазмы (см. рис. 1) сравним с длиной волны раскачиваемых пучком колебаний, поэтому ответ на поставленный вопрос не является заранее очевидным и требует моделирования задачи из первых принципов.

Плазма с однородной плотностью

Рассмотрим сначала инжекцию пучка в слой плазмы однородной плотности $n(x, y)/n_0 = 1$. В спектре пучковой неустойчивости в этом случае с самого начала доминирует распространяющаяся вдоль магнитного поля ленгмюровская волна с частотой $\omega = \omega_p$ и волновым числом $k = \omega_p/v_b$, удовлетворяющим условию черенковского резонанса. Из карт электромагнитных полей, представленных на рис. 3, а, б, в, г, а также пространственного распределения плотности пучка (рис. 3, е), видно, что неустойчивые колебания заполняют собой весь объем плазмы. Линейная конверсия такой волны в ЭМ волны становится возможной только после появления возмущений ионной плотности, которые нарастают вследствие развития модуляционной неустойчивости доминирующей плазменной волны. Регистрация поперечного потока ЭМ излучения осуществляется после прохождения им вакуумного промежутка на границе поглощающего слоя. Из Фурье-спектров электрических полей E_x и E_z (рис. 3, ж, з), измеренных вдоль этой границы, видно, что выходящее из плазмы излучение сосредоточено в основном вблизи плазменной частоты ω_p и лишь малая доля его спектральной энергии приходится на вторую гармонику $2\omega_p$. Полная мощность такого излучения $P_{\perp}$ достигает 0,01 % мощности инжектируемого пучка $P_b \approx (\gamma_b - 1)m_e c^2 n_b v_b S$ (рис. 3, и), где γ_b – релятивистский фактор пучка, а S – площадь его поперечного сечения. Чтобы оценить, насколько большой поток энергии ЭМ поля течет вдоль плазменного слоя, проинтегрируем продольную компоненту вектора Пойнтинга по поперечному сечению плазмы и получим мощность излучения в продольном направлении:

$$\frac{P_{\parallel}}{P_b} = \frac{1}{(\gamma_b - 1)n_b v_b \sigma} \int_{-\sigma/2}^{\sigma/2} dy (E_y B_z - E_z B_y). \quad (1)$$

Рисунок 3 показывает, что продольный поток энергии ЭМ полей в этом случае слабо меняется в разных сечениях плазмы (рис. 3, е) и сопоставим по мощности с потоком излучения, выходящим поперек плазменного столба (рис. 3, и).

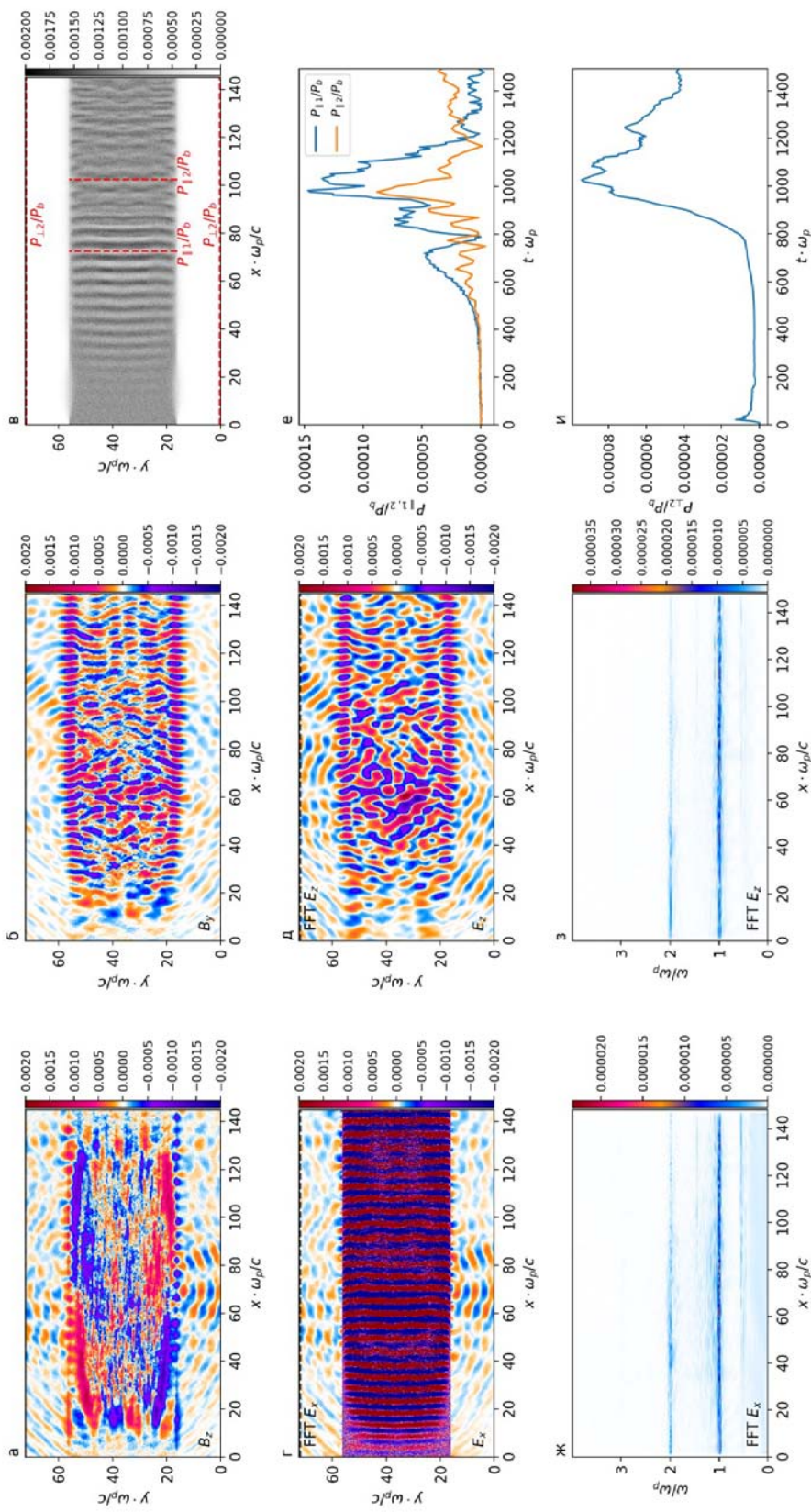


Рис. 3. Результаты PIC расчетов в однородной плазме: карты электромагнитных полей $B_z(x, y) - (a)$, $B_y(x, y) - (b)$, $E_x(x, y) - (c)$, $E_z(x, y) - (d)$, карта плотности пучка $n_b(x, y)/n_0 - (e)$ в момент времени $\omega_p t = 1026$; Фурье-спектры электрических полей $E_x(x, \omega) - (ж)$ и $E_z(x, \omega) - (з)$, измеренных в различных точках x на приграничном поглощающем слое; (e) мощность продольного потока ЭМ полей (J) в разных сечениях плазменного столба (сечения показаны на рисунке e штриховыми линиями) как функция времени; (u) мощность поперечного потока ЭМ излучения $P_{\perp,2}/P_b$, измеряемая на поглощающем слое как функция времени

Fig. 3. Results of PIC simulations in the uniform plasma: the maps of electromagnetic fields $B_z(x, y) - (a)$, $B_y(x, y) - (b)$, $E_x(x, y) - (c)$, $E_z(x, y) - (d)$, the map of beam density $n_b(x, y)/n_0 - (e)$ in the moment $\omega_p t = 1026$; Fourier spectra of electric $E_x(x, \omega) - (ж)$ and $E_z(x, \omega) - (з)$ measured in various points x at the boundary absorbing layer; (e) the power of longitudinal flux of EM fields (J) in different plasma cross sections (cross sections are indicated in the plot (e) by dashed lines) as a function of time; (u) the power of the transverse EM flux $P_{\perp,2}/P_b$ measured at the simulation boundary as a function of time

Плазма с поперечной неоднородностью

Выясним, как изменится эффективность ЭМ эмиссии при инъекции пучка в плазму с такими же поперечными градиентами плотности, какие наблюдаются в эксперименте. Наложим на плазму периодическое возмущение $n/n_0 = 1 + 0,5 \cos(2\pi r/L)$, которое на длине одного периода представляет собой канал с пониженной центральной плотностью $n/n_0 = 0,5$, растущей к периферии до максимального значения $n/n_0 = 1,5$ (рис. 4, а). Как видно из рис. 4, з, ж, несмотря на то, что пучок по-прежнему инжектируется по всему сечению плазменного слоя, возбуждение плазменных колебаний сильно локализовано вблизи ямы плотности. Видно также, что неустойчивость срывается даже вблизи стенок канала, где модуль градиента плотности так же мал, как и в окрестности ямы. Частота неустойчивых ленгмюровских волн, бегущих по дну канала, определяется локальной плазменной частотой, которая в 2 раза меньше плазменной частоты ω_p , вычисленной по средней плотности n_0 ($\omega_1/\omega_p \approx 0,71$). Трехкратное увеличение плотности плазмы на периферии канала приводит к непрозрачности его стенок для ЭМ колебаний с частотами $\omega/\omega_p < 1,22$. Это значит, что даже при эффективной линейной конверсии резонансных с пучком колебаний в ЭМ волны выходить из плазмы сможет только излучение вблизи удвоенной локальной плазменной частоты $\omega_2/\omega_p \approx 1,42$. Для подтверждения принципиальной возможности выхода запертого в канале излучения на плазменной частоте за область интенсивной релаксации пучка канал изгибается, как показано на рис. 4, а, и выходит в вакуум.

Как видно из рис. 4, в, на котором демонстрируется мощность прошедшего через вакуум поперечного потока излучения от времени, генерация ЭМ волн на плазменной частоте в канале начинается раньше, чем в однородной плазме. Это объясняется тем, что конверсия неустойчивых колебаний в электромагнитные внутри канала не требует нарастания модуляционной неустойчивости, а происходит уже на тех поперечных градиентах плотности плазмы (см. рис. 4, а), которые были заданы в начальный момент времени. Возможность такой конверсии, по-видимому, связана с сильной локализацией возбуждаемых полей на масштабах порядка длины волны. Как видно из рис. 4, ж, первая вспышка излучения ($\omega_p t = 800$) имеет ярко выраженную ТЕ поляризацию (E_z, B_x, B_y), а ее спектральная энергия сосредоточена вблизи локальной плазменной частоты $\omega_1/\omega_p \approx 0,71$, вычисляемой по плотности на дне канала (рис. 4, и). Вычисляя вектор Пойнтинга на границе плазмы, в месте выхода канала в вакуум, легко убедиться, что первая вспышка действительно сосредоточена вблизи устья канала. Мощность этой вспышки лишь незначительно ниже, чем в однородной плазме (рис. 4, в), хотя объем плазмы, в котором развивается пучковая неустойчивость, уменьшился в несколько раз. Последующая вспышка, измеренная в момент времени $\omega_p t = 1300$ после начала инъекции (см. рис. 4, в), связана с эмиссией на второй гармонике плазменной частоты $\omega_2/\omega_p \approx 1,42$ (рис. 4, е). Это излучение появляется после нарастания продольной мелкомасштабной модуляции плотности плазмы (рис. 4, б), свободно проходит через стенки канала (рис. 4, д) и оказывается в 2 раза более мощным, чем излучение на плазменной частоте в однородной плазме. Такое усиление эмиссии на второй гармонике связано с включением механизма пучково-плазменной антенны [10; 21], который начинает эффективно работать, если поперечный размер неустойчивой системы «плазма – пучок» становится сопоставим с длиной волны излучения.

Что касается продольного потока энергии, переносимого ЭМ полями внутри канала, то его мощность можно оценить, вычисляя в формуле (1) вклад полей с ТЕ поляризацией. Как видно из рис. 4, з, ж, только ТЕ мода способна выходить в вакуум через изогнутый участок канала. Из сравнения сплошной и штриховой черных кривых на рис. 5 видно, что

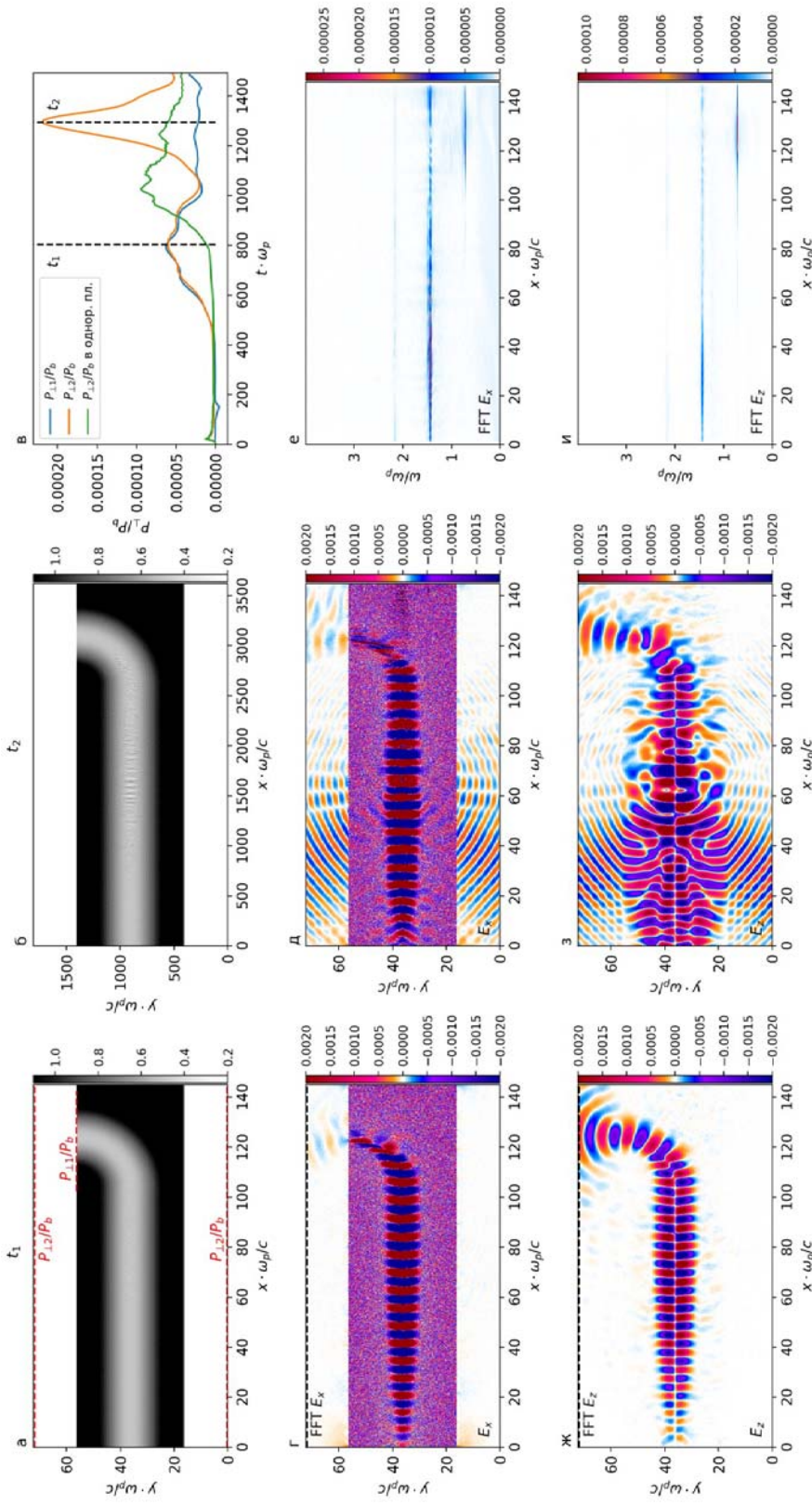


Рис. 4. Результаты PIC расчетов в неоднородной плазме с каналом: карта плотности ионов $n_i(x,y)/n_0$ – (a) и электрических полей $E_x(x,y) - (z)$ и $E_z(x,y) - (ж)$ в момент времени $\omega_p t_1 = 800$; карта плотности ионов $n_i(x,y)/n_0 - (б)$ и электрических полей $E_x(x,y) - (з)$ и $E_z(x,y) - (и)$ в момент времени $\omega_p t_2 = 1300$; (e) мощность поперечного потока излучения $P_{\perp 2}/P_b$, измеренная на поглощающих слоях как функция времени в плазме с каналом (оранжевая кривая) и в однородном случае (зеленая кривая) (мощность потока через устье канала $P_{\perp 2}/P_b$ показана синей кривой); Фурье-спектры электрических полей $E_x(x,\omega) - (e)$ и $E_z(x,\omega) - (и)$, измеренных в различных точках x на верхнем поглощающем слое

Fig. 4. Results of PIC simulations in the inhomogeneous plasma with a channel: the map of ion density $n_i(x,y)/n_0 - (a)$ and electric fields $E_x(x,y) - (z)$ and $E_z(x,y) - (ж)$ in the moment $\omega_p t_1 = 800$; the map of ion density $n_i(x,y)/n_0 - (б)$ and electric fields $E_x(x,y) - (з)$ and $E_z(x,y) - (и)$ in the moment $\omega_p t_2 = 1300$; (e) the power of transverse radiation flux $P_{\perp 2}/P_b$, measured at absorbing layers as a function of time in the channel plasma (orange) and in the uniform plasma case (green) (the power of EM flux through the channel mouth is shown by a blue curve); Fourier spectra of electric fields $E_x(x,\omega) - (e)$ and $E_z(x,\omega) - (и)$ measured in different points x along the upper absorbing layer

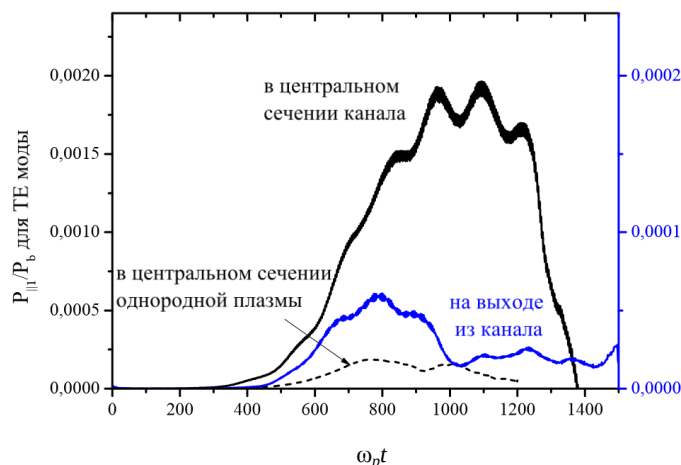


Рис. 5. Мощность $P_{\parallel}/P_b$, переносимая ЭМ колебаниями с ТЕ поляризацией в центральном сечении канала (сплошная черная кривая) и в центральном сечении однородного плазменного столба (штриховая черная кривая). Мощность поперечного потока ТЕ моды $P_{\perp}/P_b$, выходящего из устья канала в вакуум (синяя кривая)

Fig. 5. The power $P_{\parallel}/P_b$ transmitted by EM oscillations with the TE polarization in the central cross section of the channel (solid black line) and in the central cross section of the uniform plasma (dashed black line). The power of transverse flux of the TE mode $P_{\perp}/P_b$ escaping from the channel in vacuum (blue line)

в центральном сечении плазмы поток энергии, переносимый ТЕ модой, увеличивается в 10 раз, если в плазме присутствуют поперечные градиенты плотности. В единицах мощности пучка мощность этого потока достигает 0,2 %. В представленных расчетах, где на большей части длины релаксации пучка плазма имела строго поперечную неоднородность, за счет создания изогнутого канала удалось продемонстрировать выход только $1/30$ доли этого потока в вакуум (см. синюю кривую на рис. 5). Можно ли увеличить эту долю в присутствии продольных градиентов плотности и насколько эффективнее генерируемые ЭМ колебания могут покидать плазму вдоль силовых линий магнитного поля, предстоит выяснить в будущих расчетах, однако сам факт увеличения на порядок потока энергии ЭМ полей в плазме с сильными поперечными градиентами плотности плазмы дает, на наш взгляд, ключ к объяснению эффекта многократного увеличения мощности суб-ТГц излучения, наблюдаемого в экспериментах с сильно неоднородной предплазмой на установке ГОЛ-ПЭТ.

Выводы

В работе проведено моделирование коллективного взаимодействия килоамперного электронного пучка с плазмой и сопутствующих процессов электромагнитной эмиссии на гармониках плазменной частоты в присутствии сильных поперечных градиентов ионной плотности, наблюдаемых в недавних экспериментах на установке ГОЛ-ПЭТ. На основе сравнения PIC расчетов, проведенных как для однородной плазмы, так и для случая сильной поперечной неоднородности, можно сделать вывод о локализации области развития пучковой неустойчивости в неоднородной плазме вблизи ям плотности на масштабах, сравнимых с длиной волны раскачиваемых пучком колебаний. Малый поперечный размер неустойчивой системы приводит к включению механизма плазменной антенны, благодаря которому генерация излучения на второй гармонике плазменной частоты, свободно выходящего через стенки моде-

лируемого канала, становится в 2 раза более эффективной, чем ЭМ эмиссия на плазменной частоте в однородной плазме. ЭМ колебания на плазменной частоте оказываются запертыми внутри ям плотности и не могут выходить из плазмы поперек оси системы. Несмотря на то, что поток энергии, создаваемый запертыми ЭМ полями, на порядок превышает аналогичный поток в однородной плазме (достигая уровня $P_{\parallel}/P_b \approx 0,2\%$) и мог бы объяснить наблюдаемое в эксперименте увеличение мощности ω_p -излучения вдоль плазменного столба до уровня нескольких мегаватт, попытка вывести его в вакуум в численной модели посредством изогнутого канала продемонстрировала пока тот же уровень мощности, который достигался в однородном случае ($\sim 0,01\%$ мощности инжектируемого пучка). Следующим очевидным шагом в исследовании возможности вывода столь интенсивных ЭМ колебаний в вакуум будет создание продольного градиента плотности плазмы в области интенсивной релаксации пучка, а также модификация численной модели, допускающей обрыв плазменного столба в продольном направлении и регистрацию излучения, выходящего в вакуум вдоль силовых линий магнитного поля.

Список литературы / References

1. Reid H. A. S., Ratcliffe H. A review of solar type III radio bursts. *Res. Astron. Astrophys.*, 2014, vol. 14, p. 773.
2. Thurgood J. O., Tsiklauri D. Self-consistent particle-in-cell simulations of fundamental and harmonic plasma radio emission mechanisms. *Astron. Astrophys.*, 2015, vol. 584, p. A83.
3. Henri P., Sgattoni A., Briand C., Amiranoff F., Riconda C. Electromagnetic Simulations of Solar Radio Emissions. *J. Geophys. Res.: Space Phys.*, 2019, vol. 124 (3), p. 1475–1490.
4. Kaufmann P. A New Solar Burst Spectral Component Emitting Only in the Terahertz Range. *Astrophys. J. Lett.*, 2004, vol. 603 (2), p. L121.
5. Zaitsev V. V., Stepanov A. V., Melnikov V. F. Sub-terahertz emission from solar flares: The plasma mechanism of chromospheric emission. *Astronomy Letters*, 2013, vol. 39, p. 650.
6. Arzhannikov A. V., Timofeev I. V. Generation of powerful terahertz emission in a beam-driven strong plasma turbulence. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2012, vol. 54, p. 105004.
7. Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Burmasov V. S., Ivanov I. A., Kasatov A. A., Kuznetsov S. A., Makarov M. A., Mekler K. I., Polosatkin S. V., Popov S. A. et al. Dynamics and Spectral Composition of Subterahertz Emission from Plasma Column Due to Two-Stream Instability of Strong Relativistic Electron Beam. *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, 2016, vol. 6, p. 245.
8. Timofeev I. V., Annenkov V. V., Arzhannikov A. V. Regimes of enhanced electromagnetic emission in beam-plasma interactions. *Phys. Plasmas*, 2015, vol. 22, p. 113109.
9. Annenkov V. V., Volchok E. P., Timofeev I. V. Generation of high-power electromagnetic radiation by a beam-driven plasma antenna. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2016, vol. 58, p. 045009.
10. Timofeev I. V., Volchok E. P., Annenkov V. V. Theory of a beam-driven plasma antenna. *Phys. Plasmas*, 2016, vol. 23, p. 083119.
11. Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Kalinin P. V., Kuznetsov S. A., Makarov S. N., Mekler K. I., Polosatkin S. V., Postupaev V. V., Rovenskikh A. F., Sinitsky S. L., Sklyarov V. F., Sulyaev Yu. S., Thumm M. K. A., Vyacheslavov L. N. Subterahertz Generation by Strong Langmuir Turbulence at Two-Stream Instability of High Current 1-MEV Rebs. *Vestnik NSU. Series: Physics*, 2010, vol. 5, no. 4, p. 44–49.
12. Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Vyacheslavov L. N., Ivanov I. A., Ivantsivsky M. V., Kasatov A. A., Kuznetsov S. A., Makarov M. A., Mekler K. I., Polosatkin S. V. et al. Diagnostic system for studying generation of subterahertz radiation during beam-plasma interaction in the GOL-3 facility. *Plasma Phys. Rep.*, 2012, vol. 38, p. 450.

13. Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Burmasov V. S., Gavrilenko D. E., Ivanov I. A., Kasatov A. A., Kuznetsov S. A., Mekler K. I., Polosatkin S. V., Postupaev V. V. et al. Observation of spectral composition and polarization of sub-terahertz emission from dense plasma during relativistic electron beam–plasma interaction. *Phys. Plasmas*, 2014, vol. 21, p. 082106.
14. Arzhannikov A. V., Thumm M. K. A., Burdakov A. V., Burmasov V. S., N. S., Ivanov I. A., Kalinin P. V., Kasatov A. A., Kurkuchekov V. V., Kuznetsov S. A. et al. Two Ways for High-Power Generation of Subterahertz Radiation by Usage of Strong Relativistic Electron Beams. *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, 2015, vol. 5, p. 478.
15. Arzhannikov A. V., Ivanov I. A., Kasatov A. A., Kuznetsov S. A., Makarov M. A., Mekler K. I., Polosatkin S. V., Popov S. S., Rovenskikh A. F., Samtsov D. A., Sinitsky S. L., Stepanov V. D., Annenkov V. V., Timofeev I. V. Well-directed flux of megawatt sub-mm radiation generated by a relativistic electron beam in a magnetized plasma with strong density gradients. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2019, vol. 62, p. 045002.
16. Lindholm E., Nickolls J., Oberman S., Montrym J. NVIDIA Tesla: A Unified Graphics and Computing Architecture. *IEEE Micro*, 2008, vol. 28, p. 39–55.
17. Yee K. S. Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1966, vol. 14 (3), p. 302–307.
18. Boris J. P. Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code. In: Proc. of Fourth Conference on Numerical Simulations of Plasmas. Washington, D.C., 1970, p. 3–67.
19. Esirkepov T. Exact charge conservation scheme for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor. *Computer Physics Communications*, 2001, vol. 135, p. 144.
20. Annenkov V. V., Berendeev E. A., Timofeev I. V., Volchok E. P. High-power terahertz emission from a plasma penetrated by counterstreaming different-size electron beams. *Phys. Plasmas*, 2018, vol. 25, p. 113110.
21. Annenkov V. V., Berendeev E. A., Volchok E. P., Timofeev I. V. Second harmonic electromagnetic emission in a beam-driven plasma antenna. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2019, vol. 61, p. 055005.

Материал поступил в редколлегию
Received
03.12.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Глинский Владимир Владимирович, старший лаборант Института ядерной физики имени Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия); магистрант Новосибирского государственного университета (Новосибирск, Россия)

Vladimir V. Glinskiy, laboratory assistant of the Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation); graduate student, Novosibirsk State University (Novosibirsk, Russian Federation)

vova-glin@yandex.ru

Тимофеев Игорь Валериевич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия)

Igor V. Timofeev, doctor of science, leading researcher of the Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

timofeev@ngs.ru

Анненков Владимир Вадимович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия); ассистент кафедры физики плазмы ФФ Новосибирского государственного университета (Новосибирск, Россия)

Vladimir V. Annenkov, PhD, researcher of the Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation); Assistant, Department of Plasma Physics, Novosibirsk State University (Novosibirsk, Russian Federation)

annenkov.phys@gmail.com

Аржанников Андрей Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия); профессор Новосибирского государственного университета (Новосибирск, Россия)

Andrey V. Arzhannikov, doctor of science, professor, chief researcher of the Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation); professor, Novosibirsk State University (Novosibirsk, Russian Federation)

arzhan1@ngs.ru

Применение метода испарения вещества высокоэнергетическим пучком электронов для получения нанопорошка вольфрама

Д. Ю. Труфанов¹, К. В. Зобов¹, С. П. Бардаханов¹
А. П. Завьялов², И. К. Чакин³

¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН
Новосибирск, Россия

² Дальневосточный федеральный университет
Владивосток, Россия

³ Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

Аннотация

Метод получения нанопорошка испарением высокоэнергетическим пучком электронов имеет большой потенциал применения для тугоплавких веществ, так как пучок электронов дает возможность получить высокую плотность мощности в пятно взаимодействия не больше $3\text{--}4\text{ см}^2$ и, как следствие, высокие градиенты температуры. Ускоритель и пучок электронов имеет высокий КПД передачи энергии от электросети в испарение (до 70 %). Электронный пучок не вносит загрязнения и не избирателен к материалу. Специфика работы с ускорителем электронов связана с радиационным излучением, вызванным торможением электронов и большими температурами. Эти явления значительно осложняют наблюдение за процессами, происходящими в зоне испарения. Поэтому в настоящее время метод требует развития и адаптации к конкретным материалам. В данной работе исследовался процесс получения наноразмерного порошка вольфрама указанным методом. Экспериментально апробированы методы, позволяющие получать данные о процессах синтеза нанопорошков по калориметрии зоны испарения и измерениям уровня радиации вблизи нее. Отработана технология и определены параметры полученных нанопорошков вольфрама. Показаны пути увеличения производительности данного метода применительно к вольфраму.

Ключевые слова

нанопорошок, вольфрам, испарение, электронный пучок, ускоритель электронов, радиация

Источник финансирования

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проектов № 18-29-11044 «Синтез и характеристика керамических нанопорошков оксида иттрия» и № 16-31-60076 «Оптимизация технологических параметров испарения порошков оксидов релятивистским пучком электронов».

Для цитирования

Труфанов Д. Ю., Зобов К. В., Бардаханов С. П., Завьялов А. П., Чакин И. К. Применение метода испарения вещества высокоэнергетическим пучком электронов для получения нанопорошка вольфрама // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 17–27. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-17-27

Application of the Method of Evaporation of a Substance by High-Energy Electron Beam to Produce Tungsten Nanopowder

D. Yu. Trufanov¹, K. V. Zobov¹, S. P. Bardakhanov¹
A. P. Zavyalov², I. K. Chakin³

¹ Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

² Far Eastern Federal University
Vladivostok, Russian Federation

³ Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

Abstract

The method of producing nanopowder by evaporation by a high-energy electron beam has a great potential for refractory substances, since the electron beam makes it possible to obtain high the power density in the interaction spot is not more than 3–4 cm² and, as a result, high temperature gradients. The accelerator and electron beam have a high efficiency of transferring energy from the power grid to evaporation (up to 70 %). The electron beam does not introduce pollution and is not selective to the material. Work specifics with an electron accelerator is associated with radiation caused by electron deceleration and high temperatures. These phenomena greatly complicate the monitoring of processes occurring in the evaporation zone. Therefore, at present, the method requires development and adaptation to specific materials. In this work, we studied the process of obtaining nanosized tungsten powder by the indicated method. Experiments were tested that allow obtaining data on the processes of nanopowder synthesis by calorimetry of the evaporation zone and measurements of the radiation level near it. The technology was developed and the parameters of the obtained tungsten nanopowders were determined. Showing ways to increase productivity This method is applied to tungsten.

Keywords

nanopowder, tungsten, evaporation, electron beam, electron accelerator, radiation

Funding

This work was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research in the framework of projects no. 18-29-11044 and no. 16-31-60076

For citation

Trufanov D. Yu., Zobov K. V., Bardakhanov S. P., Zavyalov A. P., Chakin I. K. Application of the Method of Evaporation of a Substance by High-Energy Electron Beam to Produce Tungsten Nanopowder. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 17–27. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-17-27

Введение

Одной из актуальных задач производства нанопорошков является получение наночастиц тугоплавких материалов. В данной статье предлагается использование универсального метода получения нанопорошков при помощи испарения непрерывным высокоэнергетическим пучком электронов с последующей конденсацией паров в газе-носителе при атмосферном давлении [1] для получения наночастиц вольфрама.

Создание и развитие методов производства часто приводит к получению нанопорошков, сходных по размерам и составу, но различных по свойствам. Это может приводить как к расширению области их применения, так и к невозможности применения в уже известных процессах. Интерес к наноразмерным порошкам поднимает все больше вопросов об их классификации и свойствах, на которые может оказать влияние метод их производства [2].

В связи с этим возникает вопрос о контроле параметров производственного процесса и определении их влияния на количество и свойства получаемых наночастиц. В случае получения нанопорошков при помощи испарения исходного сырья пучком высокоэнергетических электронов радиация и температура мешают непосредственному наблюдению за параметрами процесса. Не представляется возможным измерять температуру в зоне испарения как контактными, так и пирометрическими методами. Чтобы лучше представлять процессы, проис-

ходящие в области плавления материала, необходимо развивать косвенные методы анализа параметров процесса в зоне испарения.

Малый размер наночастиц также препятствует измерению параметров получаемого продукта непосредственно во время его синтеза или фильтрации. Тем не менее исследование полученного наноматериала методами ПЭМ и рентгеноסקопии показывает множество особенностей структуры, которые говорят об условиях в испарительной камере.

Данная работа посвящена апробации метода испарения вещества электронным пучком для случая получения нанопорошков вольфрама. Описываются важные элементы производственного процесса и характеристики получаемых порошков.

Методы и оборудование

Работы проводились в ИЯФ СО РАН на экспериментальном стенде на базе промышленного ускорителя электронов ЭЛВ-6 предназначенным для обработки материалов концентрированным электронным пучком, выпущенным в атмосферу. Ускоритель имеет ускоряющее напряжение 1,4 МэВ. Генерируемый ускорителем электронный пучок фокусируется и выходит в атмосферу через отверстие площадью 2–3 мм². Ускоритель имеет уникальную систему выпуска сфокусированного пучка электронов в атмосферу, что позволяет без существенных потерь энергии получать на выходе из ускорителя мощность пучка до 100 кВт. Так как ускорение электронов происходит при давлении 10⁻⁶ Торр, то для поддержания необходимого градиента давления между ускорительной трубкой и выходным отверстием электронный пучок проходит через систему дифференциальной вакуумной откачки, состоящей из трех ступеней [3].

В данной работе электронный пучок используется в качестве нагревательного элемента для процесса испарения вольфрамового материала. Длина свободного пробега электронов пучка в воздушной атмосфере составляет 6 м, в работе же исследовалось воздействие пучка на вольфрамовую мишень на расстоянии 10–15 см, это позволяет нам пренебрегать потерями энергии электронов при взаимодействии с молекулами газа в испарительно-конденсационной камере (сублиматоре). С другой стороны, газ при атмосферном давлении, который не является существенной преградой для пучка электронов, является хорошим носителем для отвода паров испаряемого вещества. При взаимодействии пара с холодным газом происходит резкое охлаждение пара, препятствующее росту частиц получаемого нанопорошка, использование теплопроводящего газа при давлении, близком к атмосферному, позволяет существенно увеличить производительность установки по получению наноразмерных порошков. Чтобы защитить выходное отверстие ускорителя от попадания на него продуктов испарения и кипения сырья, между выпускным отверстием и испаряемым сырьем находится камера повышенного давления, из которой часть газа попадает в выпускное отверстие и откачивается системой насосов, а другая часть попадает в сублиматор, создавая поток газа, отталкивающий пары испаряемых веществ.

Несмотря на преимущества применения ускорителя в качестве нагревателя, особенность, обусловленная тормозным излучением электронов, является основным препятствием для непосредственного наблюдения за процессами, происходящими в сублиматоре. Помещение должно иметь необходимую радиационную защиту, а измерительные и регулирующие устройства – радиационную стойкость. Энергия электронов такова, что возникновение изотопов элементов исключено, и наличие тормозного излучения приводит лишь к трудностям, связанным непосредственно с радиацией, но не влечет радиационной активации продукта. Тормозное излучение способствует разрушению молекул кислорода в воздухе вокруг реактора с последующим образованием озона. Это препятствует работе персонала непосредственно после прекращения генерации электронного пучка, требует дополнительного времени для удаления озона системой вентиляции и/или использования средств индивидуальной защиты (противогазов).

Тормозное излучение при взаимодействии электронов с вольфрамом может быть использовано для наблюдения процесса. Уровень ионизирующего излучения контролировался с помощью датчиков радиации, основанных на фотодиоде ФД-24К. Фотодиод подключается в запирающем направлении потенциала и закрывается светонепроницаемой оболочкой. Таким образом, на фоточувствительный элемент могут попасть лишь фотоны тормозного излучения. При их попадании на фотодиод происходит формирование носителей заряда, и в схеме появляется ток, регистрируемый в виде напряжения на последовательно подключенном сопротивлении. Датчик был тарирован в предыдущих экспериментах. При подаче запирающего напряжения 10 В и подключении измерительного сопротивления 11 кОм уровня чувствительности достаточно, чтобы различать изменение толщины слоя материала при размещении датчика соосно с электронным пучком за слоем испаряемого материала.

Сила тока пучка электронов регулируется штатными системами ускорителя, расход газа – контрольно-измерительными системами GFC Aalborg (США). Для измерения температуры охлаждающей сублиматор жидкости использовалась система дополнительно тарированных термодатчиков ТМ-106 (Россия).

Для исследования качества нанопорошка применялся рентгенофазовый анализ на рентгеновском дифрактометре HZG-4 (Freiberger Präzisionsmechanik, Германия) при использовании Co K_α линии. Для экспресс-оценки размерных характеристик нанопорошка использовалось измерение удельной поверхности по многоточечному методу БЭТ при адсорбции и десорбции азота при температуре жидкого азота на приборе Sorbi-M (Meta, Россия). Определение геометрии частиц порошка и более тщательное изучение их размерных характеристик проведено при анализе изображений, полученных методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на JEM-100CX (Япония, ускоряющее напряжение 100 кВ).

Элементный примесный состав сырья и полученного нанопорошка определялся методом атомно-эмиссионной спектроскопии на спектрометре с индуктивно связанной плазмой iCAP-6500 Duo (Thermo Scientific, США).

Экспериментальная часть

Для изучения воздействия пучка высокоэнергетических электронов на мишень были проведены работы по испарению вольфрамовой мишени. С испарением такого тугоплавкого вещества возникает ряд трудностей. Первое – необходимость изолировать расплавленный материал от стенок сублиматора, так как водяное охлаждение его стальных стенок не в состоянии справиться с воздействием кипящего вольфрама. Кроме того, нужно понимать, что вольфрам, как и все металлы, имеет довольно высокую теплопроводность. Для того чтобы избежать разрушения сублиматора, вольфрамовый порошок был помещен в графитовый тигель, а сам графитовый тигель – в графитовый порошок. Это было сделано, чтобы замедлить передачу тепла из зоны воздействия на мишень электронным пучком к стенкам сублиматора. Тем не менее такое устройство испарительной камеры не решало все проблемы, связанные с тугоплавкостью вольфрама, так как температура кипения вольфрама (5 555 °С) значительно выше температуры сублимации графита (4 200 °С). В связи с этим было решено воздействовать электронным пучком на вольфрам непродолжительное время, чтобы избежать разрушения тигля. На рис. 1 представлена схема сублиматора, в котором проводились эксперименты.

Все стенки сублиматора были водоохлаждаемыми, на каждый из контуров водяного охлаждения были установлены датчики температуры и расхода. Такая схема позволяет не только вовремя предотвращать необратимые разрушения в сублиматоре, но и получать данные о происходящих в нем процессах. Отметим, что пары вольфрама, распределенные в атмосфере, взрывоопасны из-за большой площади реакции окисления, поэтому, чтобы получать наноразмерные порошки таких веществ, испарение необходимо проводить в инертной атмосфере, в данной работе использовался газ аргон.

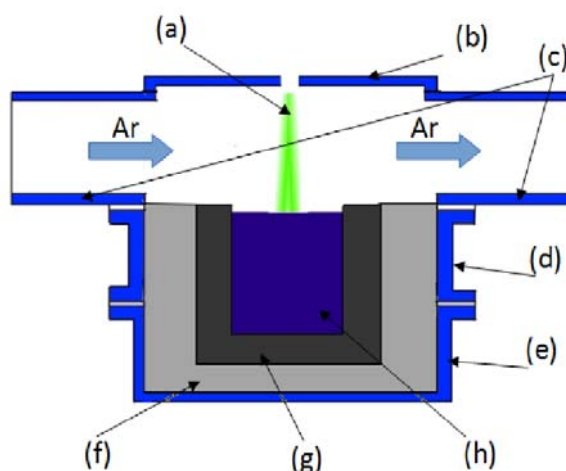


Рис. 1. Схема реактора для испарения вольфрама:

a – электронный пучок; *b* – верхняя секция водоохлаждаемая; *c* – секция с патрубками для отводящего газового потока; *d* – нижняя секция водоохлаждаемая; *e* – дно испарительной камеры водоохлаждаемое; *f* – графитовый порошок; *g* – графитовый тигель; *h* – вольфрамовое сырье

Fig. 1. Scheme of the reactor for the evaporation of tungsten:

a – the electron beam; *b* – the upper section is water-cooled; *c* – section with branch pipe for exhaust gas flow; *d* – lower section water-cooled; *e* – the bottom of the evaporation chamber is water-cooled; *f* – graphite powder; *g* – a graphite melting pot; *h* – tungsten raw materials

Первым этапом в работе было установление характерных картин плавления вольфрамового порошка под действием пучка высокоэнергетических электронов. Для этого материал нагревался электронным пучком, а после определенного времени, которое варьировалось, ускоритель останавливался, и проводилось визуальное наблюдение результатов воздействия. Были получены слитки из вольфрама, определяющие характерные картины плавления в сублиматоре, которые зависели от времени воздействия и от мощности, генерируемой ускорителем. Полученные слитки из порошкового вольфрамового материала представлены на рис. 2. Видно, что форма слитка существенно зависит от времени воздействия электронного пучка на материал и от мощности, с которой электронный пучок воздействует на мишень.

В ходе этой серии экспериментов разрушение графитового тигля не происходило даже при достижении пучком дна тигля. Было установлено три основных характерных режима воздействия на мишень: испарение и плавление вещества по ходу движения электронного пучка; достижение пучком дна тигля и плавление вольфрама около дна, испарение графита в зоне контакта с электронным пучком; плавление вольфрамового слитка около дна тигля, рост уровня расплавленного металла на дне тигля. Эти данные дают нам качественную картину процессов, происходящих в сублиматоре, но не позволяют сделать каких-либо выводов о временных интервалах, в которые происходят те или иные процессы. А это необходимо знать для своевременного предотвращения разрушения тигля или стенок сублиматора.

Качественные данные о временных процессах, происходящих в сублиматоре, были получены при помощи измерения температуры и расхода воды от охлаждающих сублиматор контуров. На рис. 3 представлен пример калориметрии реактора. Видно, что верхняя секция и секция с патрубками, получающие тепло главным образом от теплового излучения материала, и зависимость отводимой мощности имеет форму, соответствующую мощности подводимой пучком электронов, в то время как остальные части сублиматора имеют плавный рост отводимой водой мощности с заметным запаздыванием по времени. По этим данным

нет возможности судить о разрушении тигля, но резкий рост отводимого тепла с нижних контуров будет свидетельствовать о присутствии расплавленного вольфрама вблизи стенок сублиматора.

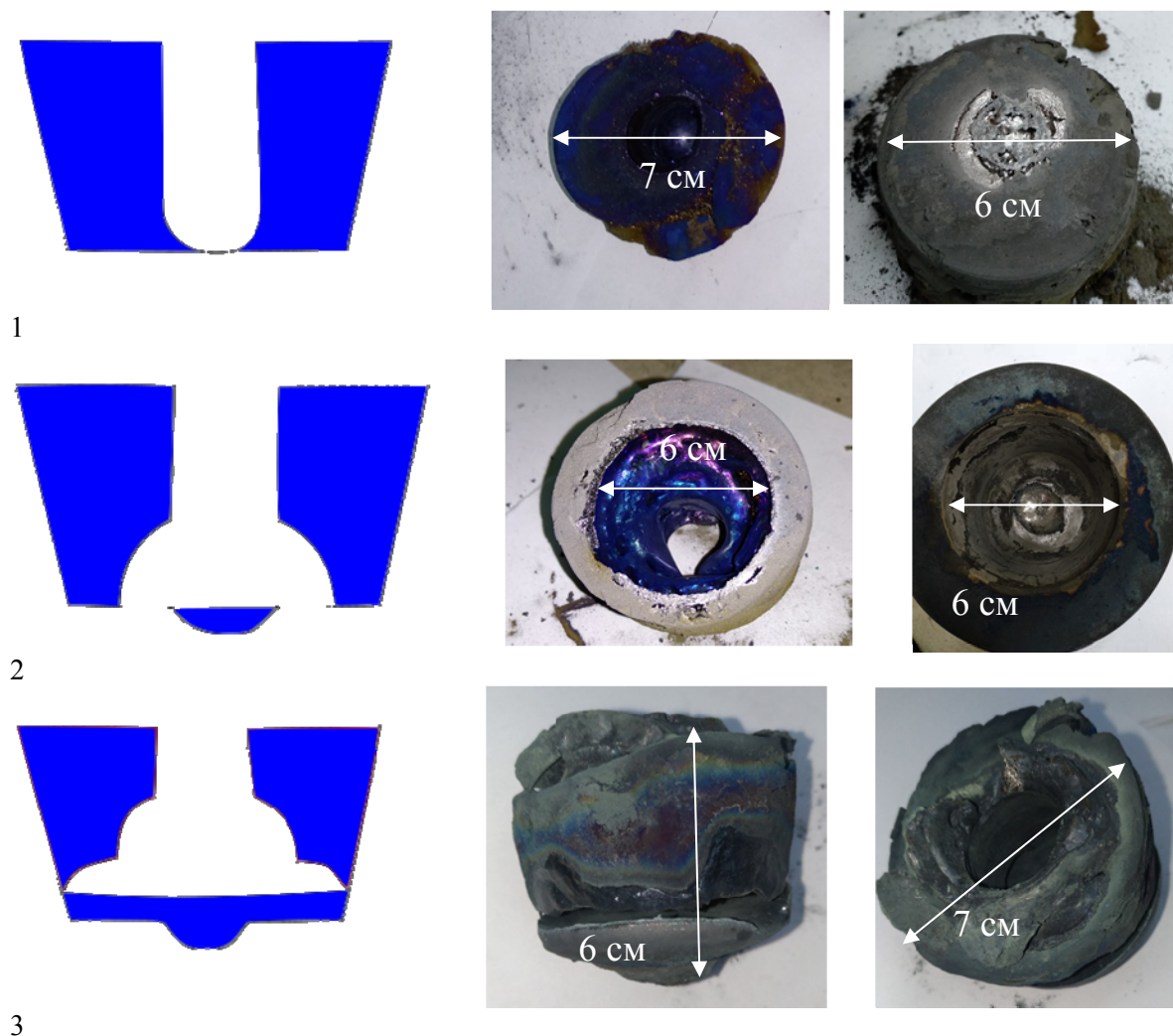


Рис. 2. Схематическое изображение слитка вольфрама, образованного в тигле после испарения вещества при воздействии на исходное сырье электронным пучком:

- 1 – ток пучка 13 мА, время воздействия 5 минут (фото – вид слитка сверху и снизу);
 2 – ток пучка 15 мА, время воздействия 5 минут (фото – вид слитка снизу и тигля сверху после изъятия слитка); 3 – ток пучка 15 мА, время воздействия 6 минут (фото – вид слитка сбоку и сверху)

Fig. 2. Schematic representation of a tungsten ingot formed in a crucible after evaporation of a substance when exposed to the raw material by an electron beam:

- 1 – beam current 13 mA, exposure time 5 minutes (photo – view of the ingot from above and below);
 2 – beam current 15 mA, exposure time 5 minutes (photo – view of the ingot from below and the crucible from above after removal of the ingot); 3 – beam current 15 mA, exposure time 6 minutes (photo – view of the ingot side and top)

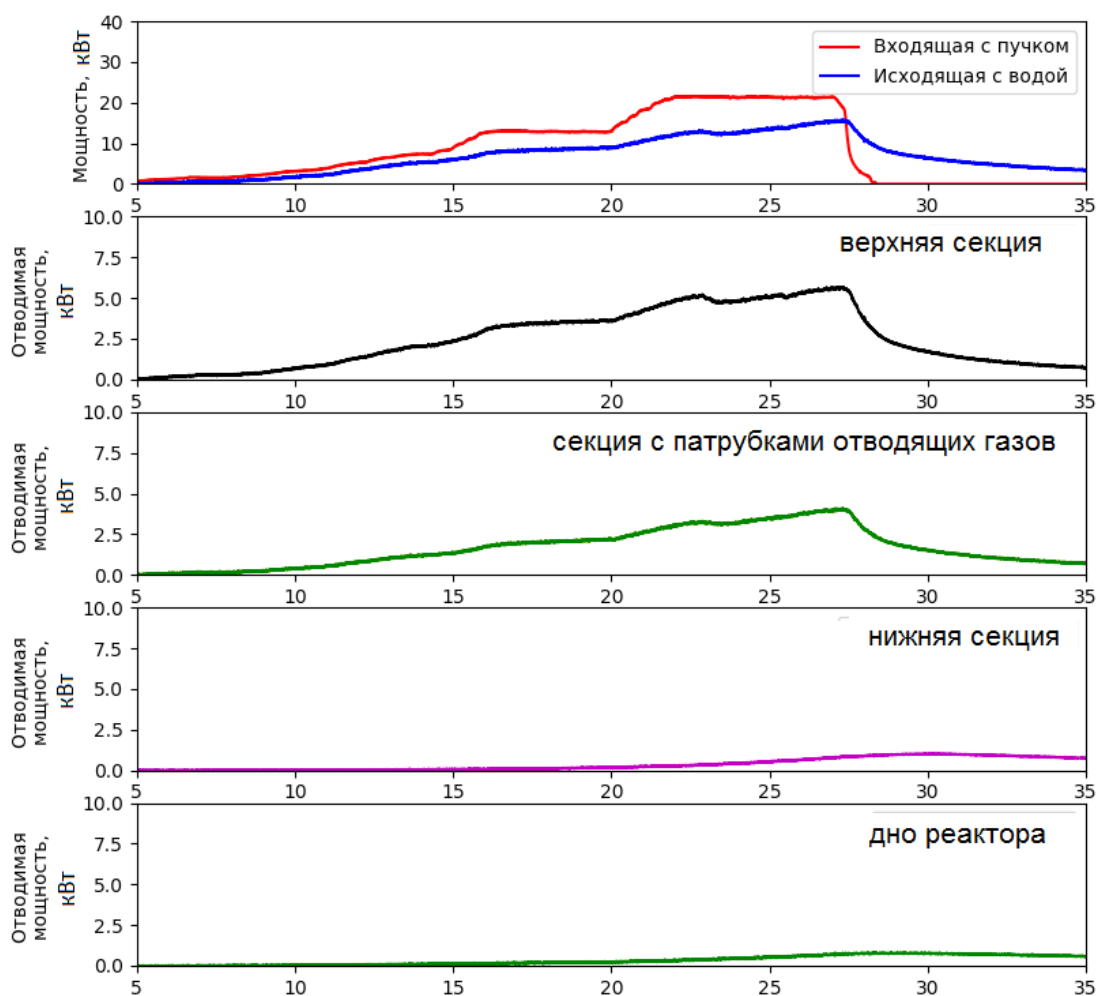


Рис. 3. Измерение тепла отводимого водой и сопоставление его с мощностью пучка
 Fig. 3. Measurement of heat removed by water and its comparison with the power of the beam

Для еще более детального анализа использовался датчик гамма-радиации, измеряющий тормозное излучение электронов. Датчик помещался под сублиматором соосно воздействию на мишень электронному пучку, и его показания регистрировали толщину слоя вольфрама, которая отделяет датчик от места торможения электронов. На рис. 4 представлены данные об испарении вольфрама в течение 6 минут при 15 мА тока пучка (общее время эксперимента, включая нагрев материала, около 25 минут).

Видно, что вначале достаточно продолжительное время толщина слоя порошка вольфрама, отделяющего датчик от пучка электронов, остается постоянной. Эту стадию мы связываем с нагреванием исходного материала. Далее происходит плавный рост, связанный с тем, что вольфрам начинает закипать, испаряя и выплескивая капли вещества вдоль канала воздействия пучка. Если остановить нагрев в этот момент, мы получим слиток, похожий на тот, что изображен на рис 2, 1. С какого-то момента начинается взрывной рост, на графике это соответствует резкому пику. Этот процесс мы связываем с образованием и углублением кра-

тера в испаряемом материале. Дальнейшее плавное падение уровня радиации обусловлено плавлением стенок вольфрамового слитка и стеканием вольфрама на дно тигля.

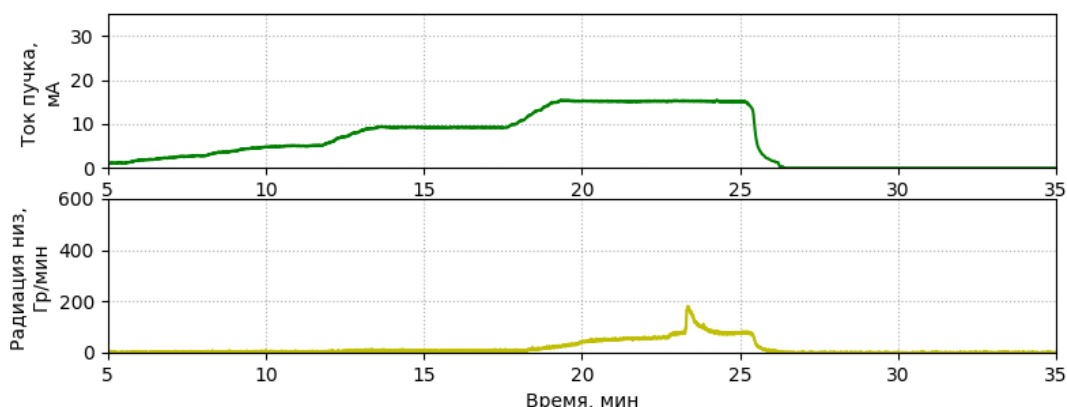


Рис. 4. Сопоставление данных мощности энергии, подводимой пучком электронов, и данных по гамма-излучению под реактором

Fig. 4. Comparison of the power data of the energy supplied by the electron beam, and data on gamma radiation under the reactor

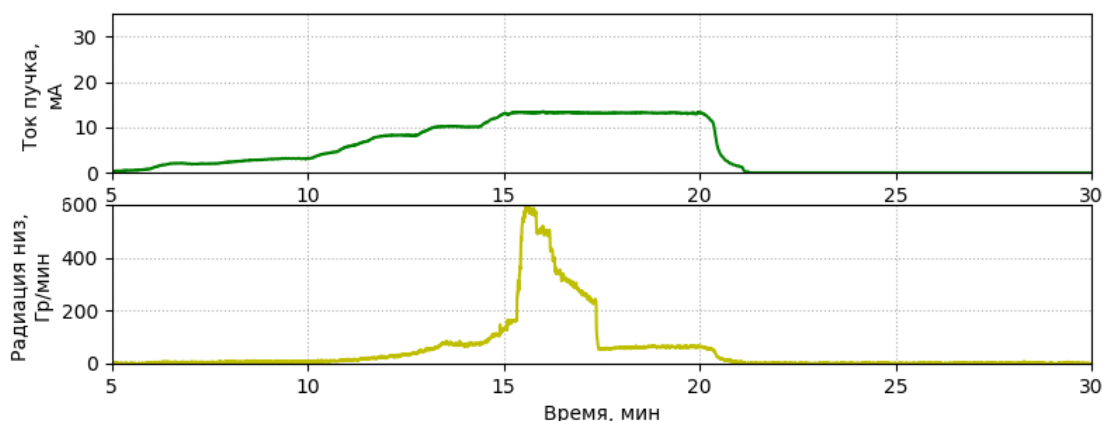


Рис. 5. Проверка данных, полученных при помощи датчика гамма-радиации в конфигурации с более высоким тиглем

Fig. 5. Verification of data obtained using a gamma radiation sensor in configuration with a higher crucible

Для проверки результата и получения более наглядной картины был изготовлен тигель с более высокими стенками, что позволило увеличить толщину слоя вольфрама, отделяющего пучок электронов от датчика радиации. В этом эксперименте мы наблюдали точно такую же картину: экспоненциальный рост уровня радиации, достижение пучком дна тигля, частичное разрушение и испарение дна тигля, плавное повышение уровня расплавленного вольфрама. Но в данном случае было замечено резкое падение уровня радиации на стадии повышения уровня расплавленного вольфрама (рис. 5), этот этап мы объясняем падением стенок еще не расплавленного вещества в расплав, из-за чего возникло резкое повышение уровня вольфрама. Кроме того, как можно заметить, обрушение стенок слитка уменьшило

уровень радиации даже ниже того, что был в самом начале. Это объясняется тем, что вольфрам испаряется достаточно медленно, не более 1–2 г за все время эксперимента, поэтому количество вольфрама в тигле можно считать примерно постоянным. После достижения пучком дна он сделал в нем углубление. При этом плавление вольфрама продолжается на стенках прожженного канала. Расплавленный вольфрам заполнил углубление в дне графитового тигля, что привело к увеличению толщины слоя вольфрама между датчиком и зоной максимального торможения пучка. Из проведенного эксперимента видно, что данные, которые позволяют нам получать датчик радиации, не только своевременно предупреждают нас о необратимых процессах разрушения тиглей, но и дают представление о непосредственной конфигурации испаряемого материала. При дальнейшем развитии установки, подобные датчики позволят наладить обратную связь для автоматического добавления материала в реактор и выбирать наиболее благоприятный режим испарения.

Характеристики полученного наноразмерного порошка

Был проведен всесторонний анализ получаемого наноразмерного порошка. Рентгенофазовый анализ показал, что порошок состоит из смеси нескольких фаз: W (рентгенограмма эталонного образца 22-959), WO_3 (32-1395), WO_3 (20-1324) и WO_3 (20-1323). Наличие оксидных компонентов обусловлено сложностью организации инертной атмосферы в данной конфигурации сублиматора, в результате чего в поток несущего газа попадает кислород. Проблема может быть устранена при дальнейшей модификации установки.

Также важно знать чистоту получаемого нанопорошка, для этого было проведено исследование элементного состава (см. таблицу).

Результаты исследования примесного состава исходного материала и синтезированного наноразмерного порошка

Элемент	Примесный состав, %	
	исходный материал	нанопорошок
Al	$1,7 \cdot 10^{-2}$	0,14
Ca	0,12	0,13
Cu	$6,3 \cdot 10^{-2}$	0,12
Fe	$< 8 \cdot 10^{-3}$	$5,0 \cdot 10^{-2}$
Mo	~1,5	~0,4
Si	$\sim 3 \cdot 10^{-2}$	~0,2

По результатам исследования примесного состава видно, что в ходе синтеза наноразмерного порошка не вносятся существенных загрязнений. Небольшой рост примесей в порошке обусловлен тем, что большинство элементов (в чистой или, возможно, оксидной форме) имеет более низкую, чем вольфрам, температуру кипения, из-за чего начинают испарение раньше. Но в ходе продолжительной работы чистота получаемого порошка будет расти, в результате чего последние фракции образцов будут иметь очищенный по сравнению с исходным материалом состав. Удельная поверхность полученных образцов составила $11 \text{ м}^2/\text{г}$.

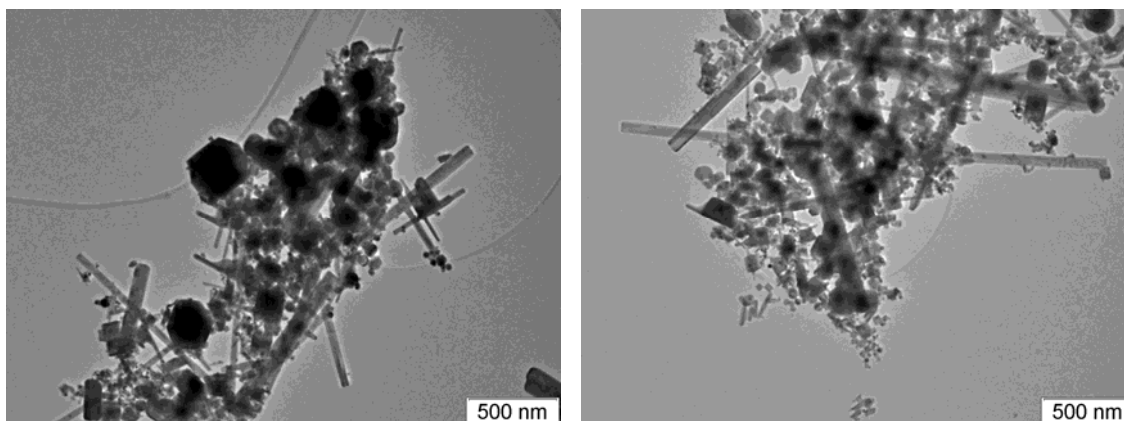


Рис. 6. Внешний вид наноразмерного порошка вольфрама (ПЭМ)

Fig. 6. Appearance of nanoscale tungsten powder (TEM)

На рис. 6 приведены изображения, полученные методом ПЭМ. Видно, что в порошке присутствуют два типа частиц: одна группа представляет собой многогранники, по форме близкой к сферической, вторая имеет вытянутую геометрию.

Заключение

В результате данной серии экспериментов получены нанопорошки вольфрама и оксидов вольфрама. Были проведено всестороннее изучение свойств наноразмерного порошка. На основе данных, полученных по изменению температуры и расхода воды, проведено качественное описание теплового баланса в реакторе. Получены данные по радиационному фону в нижней полусфере от сублиматора. На основе наблюдаемых данных описан ход плавления порошка вольфрама под действием электронного пучка. В результате проведенных экспериментов была создана система контроля процесса испарения веществ под действием электронного пучка высокой мощности. Показано что данные хорошо описывают процессы, происходящие в сублиматоре, и могут служить основой не только для качественного описания но и для построения теоретических моделей

Работа выполнена в ИЯФ СО РАН на стенде ЭЛВ-6, входящем в список Уникальных установок РФ.

Список литературы

1. Бардаханов С. П., Корчагин А. И., Куксанов Н. К., Лаврухин А. В., Салимов Р. А., Фадеев С. Н., Черепков В. В. Получение нанопорошков испарением исходных веществ на ускорителе электронов при атмосферном давлении // Докл. Академии наук. 2006. Т. 409, № 3. С. 320–323.
2. Syzrantsev V. V., Zavyalov A. P., Bardakhanov S. P. The role of associated liquid layer at nanoparticles and its influence on nanofluids viscosity. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, May 2014, vol. 72, p. 501–506. DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.12.082
3. Корчагин А. И. Электронно-лучевая технология получения нанодисперсных порошков диоксида кремния при атмосферном давлении: Дис. ... канд. техн. наук. Томск, 2003. 150 с.

References

1. **Bardakhanov S. P., Korchagin A. I., Kuksanov N. K., Lavrukhin A. V., Salimov R. A., Fadeev S. N., Cherepkov V. V.** Nanopowders obtained by evaporating initial substances in an electron accelerator at atmospheric pressure. *Doklady Physics*, 2006, vol. 51, no. 7, p. 353–356.
2. **Syzrantsev V. V., Zavyalov A. P., Bardakhanov S. P.** The role of associated liquid layer at nanoparticles and its influence on nanofluids viscosity. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, May 2014, vol. 72, p. 501–506. DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.12.082
3. **Korchagin A. I.** Electron beam technology for producing nanodispersed powders silicon dioxide at atmospheric pressure: Dissertation tech. Sciences. Tomsk, 2003. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию

Received

01.07.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Труфанов Дмитрий Юрьевич, научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (Новосибирск, Россия)

Dmitry Yu. Trufanov, Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)
trufanov@itam.nsc.ru

Завьялов Алексей Павлович, научный сотрудник, Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук (Владивосток, Россия)

Alexey P. Zavialov, Researcher, Far Eastern Federal University, School of Natural Sciences (Vladivostok, Russian Federation)
Zav_Alexey@list.ru

Зобов Константин Владимирович, младший научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (Новосибирск, Россия)

Konstantin V. Zobov, Junior Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)
zobov.kv@gmail.com

Бардаханов Сергей Прокопьевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (Новосибирск, Россия)

Sergey P. Bardakhanov, Doctor of Physics and Mathematics, Chief Scientific, Associate Professor, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)
bard@itam.nsc.ru

Чакин Иван Константинович, инженер, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия)

Ivan K. Chakin, engineer, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)
chak_in2003@bk.ru

Управление ламинарно-турбулентным переходом на крыловом профиле путем распределенного отсоса через мелкоперфорированную поверхность

Г. Р. Грек¹, М. М. Катасонов^{1,2}, В. В. Козлов^{1,2}
В. И. Корнилов¹, А. В. Крюков¹, И. А. Садовский^{1,2}

¹ Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН
Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия

Аннотация

Представлены результаты экспериментальных исследований влияния распределенного отсоса через перфорированный вкладыш на пространственное развитие возмущений пограничного слоя прямого крыла. Обнаружено, что распределенный отсос снижает в 10 раз интенсивность естественных возмущений пограничного слоя и в 20 раз интенсивность искусственных возмущений, генерируемых внешним акустическим полем. Спектральный анализ возмущений показал, что отсос снижает интенсивность высокочастотных пульсаций как для естественных, так и для вынужденных возмущений. Найдено, что распределенный отсос воздействует на среднее течение – при включенном отсосе устраняется отрыв пограничного слоя вблизи задней кромки крыла.

Ключевые слова

пограничный слой, линейная устойчивость, волны Толлмина – Шлихтинга, распределенный отсос, спектр возмущений

Источник финансирования

Работа частично выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (проект АААА-А17-117030610128-8) и при государственной поддержке научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских вузах, соглашение № 075-15-2019-1923

Для цитирования

Грек Г. Р., Катасонов М. М., Козлов В. В., Корнилов В. И., А. В. Крюков, Садовский И. А. Управление ламинарно-турбулентным переходом на крыловом профиле путем распределенного отсоса через мелкоперфорированную поверхность // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 28–54. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-28-54

Control of the Laminar-Turbulent Transition on the Wing Profile by Distributed Suction through a Finely Perforated Surface

G. R. Grek¹, M. M. Katasonov^{1,2}, V. V. Kozlov^{1,2}
V. I. Kornilov¹, A. V. Kryukov¹, I. A. Sadovskiy^{1,2}

¹ Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

² Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

Abstract

The results of experimental investigations of the influence of distributed suction through a finely perforated section of a symmetric airfoil on the spatial development of disturbances in the boundary layer are presented. It was found that distributed suction reduces by 10 times the intensity of natural disturbances of the boundary layer and by 20 times

© Г. Р. Грек, М. М. Катасонов, В. В. Козлов,
В. И. Корнилов, А. В. Крюков, И. А. Садовский, 2019

the intensity of artificial disturbances generated by an external acoustic field. A spectral analysis of disturbances showed that suction reduces the intensity of high-frequency fluctuations for both natural and forced disturbances. It was found that the distributed suction affects the average flow – when the suction is on, the separation of the boundary layer near the trailing edge of the wing is eliminated. It was found that distributed suction significantly affects the mean flow, up to eliminating the boundary-layer separation near the trailing edge of the wing.

Keywords

boundary layer, linear stability, Tollmien – Schlichting waves, distributed suction, disturbance spectrum

Funding

The work was partially completed (with distributed suction) within the framework of the program of fundamental scientific research of the state academies of Sciences for 2013–2020 (project AAAA17-117030610128-8) and with state support of scientific research conducted under the guidance of leading scientists in Russian universities, agreement No. 075-15-2019-1923

For citation

Грек Г. Р., Катасонов М. М., Козлов В. В., Корнилов В. И., Крюков А. В., Садовский И. А. Control of the Laminar-Turbulent Transition on the Wing Profile by Distributed Suction through a Finely Perforated Surface. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 28–54. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-28-54

Введение

Линейная теория гидродинамической устойчивости

Если выделить главные моменты процесса перехода ламинарного пограничного слоя в турбулентное состояние при малой интенсивности внешних возмущений, то его можно представить в виде трех определяющих этапов [1]:

- 1) генерация волн неустойчивости (волн Толлмина – Шлихтинга) (*ТШ*) и проблема восприимчивости (*receptivity*);
- 2) усиление волн *ТШ* по законам линейной теории устойчивости;
- 3) нелинейное разрушение ламинарного течения, сопровождаемое взаимодействием возмущений, образованием нелинейных волновых пакетов, турбулентных пятен и других структур (рис. 1).

О важной роли линейной теории устойчивости в проблеме ламинарно-турбулентного перехода говорит тот факт, что в настоящее время эта теория представляет собой глубоко и полно разработанный раздел механики жидкости, газа и плазмы. При исследовании устойчивости ламинарного течения согласно линейной теории [1] среднее течение рассматривается как основное, устойчивость которого исследуется, и возмущающее, наложенное на основное. Для плоскопараллельного течения несжимаемой жидкости полная функция тока представляется в виде суммы функций тока основного потока и возмущения:

$$\Psi(x, y, t) = \Psi_0(x, y, t) + \Psi'(x, y, t). \quad (1)$$

Основная задача линейной теории устойчивости состоит в том, чтобы определить, будут малые возмущения основного ламинарного потока нарастать или затухать во времени и пространстве и с какими скоростями будут происходить эти процессы. В случае плоскопараллельного течения возмущение рассматривается в виде бегущих гармонических волн, так называемых волн Толлмина – Шлихтинга, функция тока каждой из которых может быть представлена в виде

$$\Psi'(x, y, t) = \varphi e^{i\alpha(x - ct)}, \quad (2)$$

где c – фазовая скорость волны, $\alpha = \alpha_r + i\alpha_i$ – комплексное число, в котором α_r – волновое число, а α_i – скорость нарастания возмущений по пространству. При $\alpha_i > 0$ возмущение при его распространении вниз по потоку затухает, тогда как при $\alpha_i < 0$, наоборот, нарастает. В последнем случае течение считается неустойчивым. Подставив функцию тока в двумерные

уравнения Навье – Стокса для несжимаемой жидкости, получим обыкновенное дифференциальное уравнение относительно функции $\varphi(y)$, которое называется уравнением Орра – Зоммерфельда:

$$(u - c)(\varphi'' - \alpha^2 \varphi) - u''\varphi = (t/\alpha \text{Re})(\varphi^4 - 2\alpha^2 \varphi'' + \alpha^4 \varphi). \quad (3)$$

Основной задачей линейной теории гидродинамической устойчивости для плоскопараллельных течений является решение этого уравнения с соответствующими граничными условиями. Исследование устойчивости ламинарного течения представляет собой задачу на собственные значения уравнения (3) с заданными граничными условиями. Решение данной задачи приводит к характеристическому уравнению, определяющему собственные значения $\alpha = \alpha(\omega, \text{Re})$. Значения $\alpha = 0$ в плоскости ω, Re дают кривую нейтральной устойчивости. Расчет нейтральных кривых (рис. 2) и, в частности, критических чисел Рейнольдса, является одной из основных задач теории гидродинамической устойчивости.

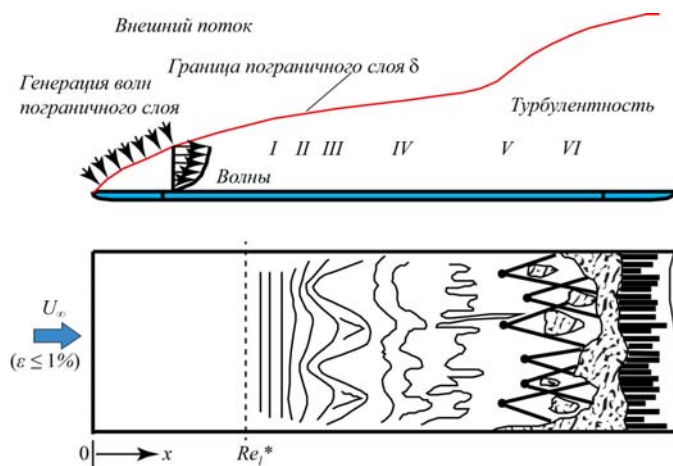


Рис. 1. Сценарий ламинарно-турбулентного перехода при низкой степени турбулентности набегающего потока: I – стадия линейного усиления волн ТШ; II – развитие трехмерных Λ -вихрей; III – образование продольных вихревых структур; IV – появление слоев сильного сдвига; V – область образования турбулентных пятен; VI – взаимодействие и слияние турбулентных пятен [2]

Fig. 1. Stages of the transition process at low free-stream turbulence: I – linear instability stage of the Tollmien – Schlichting waves; II – development of three-dimensional Λ -structures; III – formations of the streamwise vortical structures; IV – appearance of strong shear layers; V – region of the turbulent spots origination; VI – interaction and merging of turbulent spots [2]

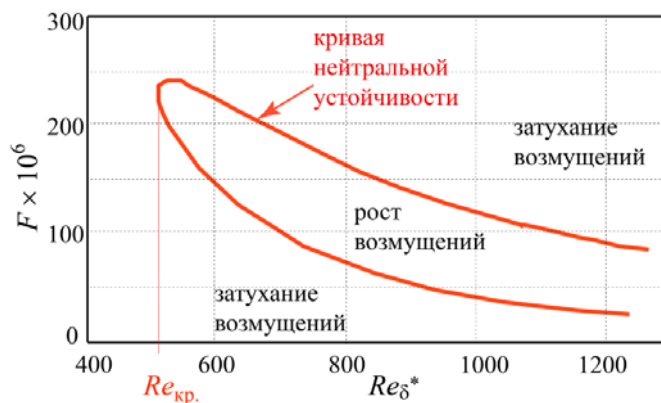


Рис. 2. Пример графического изображения кривой нейтральной устойчивости [2]

Fig. 2. An example of a graphic image of the neutral stability curve [2]

Основные выводы линейной теории устойчивости были впервые подтверждены экспериментами Г. Б. Шубауэра и Х. К. Сремстеда [3].

При достижении амплитуд возмущений порядка одного процента от скорости набегающего потока начинается область нелинейного развития и взаимодействия волн. Нелинейную стадию перехода можно представить в виде последовательности отдельных ее этапов:

- 1) слабонелинейное нарастание двумерных волн ТШ;

- 2) включение в процесс эффектов трехмерности;
- 3) образование нелинейных волновых пакетов (Λ -структур);
- 4) трансформация Λ -структур в турбулентные пятна и образование полностью турбулентного пограничного слоя.

Классические эксперименты [4; 5] по переходу продемонстрировали возможность существования так называемых гармонического (основная волна с кратными гармониками в частотном спектре) и субгармонического (основная волна и субгармоника в частотном спектре) сценариев перехода, где нелинейные волновые пакеты (Λ -структуры) генерируются в тандемном порядке в первом случае и в шахматном порядке во втором случае.

Основные факторы, влияющие на переход к турбулентности

Существует большое число факторов, влияющих на линейную устойчивость течений и переход к турбулентности. В целом, следуя физическим представлениям о природе ламинарно-турбулентного перехода в пограничном слое, основные факторы можно разделить на две группы. В первую входят те, которые непосредственно влияют на начальные возмущения ламинарного течения, вызывающие его турбулизацию. Например, волновые и частотные спектры волн неустойчивости можно изменить путем уменьшения внешних акустических возмущений, турбулентности набегающего потока, вибраций и неровностей поверхности. В другую группу входят факторы, изменяющие характеристики устойчивости исходного течения; именно на их основе развиты основные методы управления переходом к турбулентности.

Неровности поверхности. С уменьшением высоты неровности (например, препятствия) переход постепенно перемещается вниз по потоку. В зависимости от формы, места расположения неровности на поверхности обтекаемого тела и параметров течения имеется критическая высота шероховатости h^* , ниже которой никакого влияния на переход нет, т. е. он происходит так же, как на гладкой поверхности. С другой стороны, по мере увеличения высоты неровности может быть достигнута такая величина h , при которой переход реализуется сразу за элементом шероховатости.

Кривизна поверхности. Продольные градиенты давления оказывают существенное влияние на устойчивость течений и, как следствие, на положение перехода к турбулентности и сопротивление трения. Поэтому контур обтекаемого тела должен быть подобран таким образом, чтобы распределение давления во внешнем потоке обеспечивало максимально протяженный участок ламинарного течения. Отрицательный градиент давления $dp/dx < 0$ является в этом отношении благоприятным фактором, а положительный $dp/dx > 0$ неблагоприятным, поэтому указанная цель достигается смещением наиболее широкой части крыла вниз по потоку.

Нагревание поверхности. Результаты расчетов линейной устойчивости и экспериментальные данные показывают, что в определенных условиях нагревание стенки также можно использовать для подавления нарастания волн неустойчивости пограничного слоя в газе. К числу первых теоретических работ, в которых было показано стабилизирующее влияние неравномерного нагревания поверхности на течение в пограничном слое, относятся [6–8]. Результаты теории получили подтверждение в последующих экспериментах [9]. Было установлено, что локальное нагревание пластины вблизи ее передней кромки либо участков поверхности ниже по потоку действительно задерживает нарастание волн TSH и приводит к увеличению числа Рейнольдса перехода.

Оребрение поверхности. Успешное применение риблет для управления турбулентным пограничным слоем инициировало работы по использованию аналогичного метода для воздействия на процесс перехода к турбулентности. В экспериментах [10–12] было показано, что риблеты, расположенные на плоской пластине в области развития линейной волны TSH , дестабилизируют течение и ускоряют переход, тогда как такие же риблеты, расположенные в области образования и развития Λ -структур или стационарных вихрей, существенно задер-

живают переход к турбулентности. Такие риблеты также затягивают переход к турбулентности, при этом высота и ширина вихревого следа становится значительно меньше над оребренной поверхностью по сравнению с гладкой поверхностью. Таким образом, риблеты могут значительно затягивать поздние или трехмерные стадии перехода к турбулентности, но в то же время ускорять его начальную или двумерную фазу. Эти результаты можно объяснить подавлением трансверсальной компоненты скорости продольных структур, что, в свою очередь, способствует замедлению их нарастания и предотвращает генерацию вторичных возмущений. Экспериментальные данные хорошо согласуются с результатами расчетов, согласно которым пограничный слой дестабилизируется в области линейной неустойчивости [13; 14]. Однако в области нелинейного развития возмущений продольные риблеты уменьшают амплитуду локализованных возмущений и задерживают их преобразование в турбулентные пятна. Оптимизация треугольных риблет по их влиянию на развитие уединенного локализованного возмущения, аналогичного Λ -вихрю, была проведена в [15]. Размеры риблет оказались близкими к тем, которые используются для управления турбулентными течениями. Еще одна задача, в которой могут найти применение риблеты, – управление процессом перехода в течение с продольными стационарными вихрями, где один из механизмов турбулизации заключается в развитии высокочастотной вторичной неустойчивости. Эта проблема изучалась в [12] для пограничного слоя плоской пластины, возмущенного продольными вихрями, которые генерировались трехмерными элементами шероховатости, расположенными с равным шагом в трансверсальном направлении. В управляемом потоке уменьшаются как трансверсальная модуляция среднего течения, так и амплитуда бегущих возмущений, распространяющихся вдоль вихрей.

Отсасывание пограничного слоя. Основной результат отсасывания потока аналогичен действию продольного градиента давления и заключается в уменьшении сопротивления трения за счет смещения вниз по потоку ламинарно-турбулентного перехода. Хотя отсасывание и привносит некоторое увеличение сопротивления трения, оно незначительно по сравнению с турбулентным, даже в случае асимптотического профиля средней скорости. Причем возможности метода не исчерпываются подавлением волн $TIII$. В трехмерном пограничном слое его можно использовать для управления неустойчивостью поперечного течения [16; 17], а в экспериментах на скользящем крыле [18] наблюдалась задержка перехода, вызванная неустойчивостью течения у передней кромки. Определенного эффекта можно достичь и на нелинейных стадиях развития возмущений: отсасывание приводит к полному подавлению субгармоники нарастающих колебаний в пограничном слое плоской пластины [19] и способствует предотвращению развития вторичных возмущений на скользящем крыле [20]. Эксперименты на моделях скользящего крыла [21–23] имели целью оптимизировать форму участка поверхности, на котором производится равномерное отсасывание. Рассматривались поверхности, оборудованные поперечными щелями и перфорированные отверстиями двух диаметров с постоянной пористостью 1 % и коэффициентом отсасывания $c_q = 0,1$. Было показано, что бегущие возмущения подавляются сильнее, чем стационарные моды, причем щелевое отсасывание оказывается более эффективным.

В определенной степени альтернативой равномерному отсасыванию может служить локализованное отсасывание пограничного слоя через щель, расположенную в трансверсальном направлении по отношению к потоку. При этом амплитуда возмущений в потоке уменьшается поперек всего пограничного слоя в окрестности щели; следовательно, возмущения остаются линейными на значительно большем расстоянии вниз по потоку, и переход к турбулентности не происходит.

Результаты исследования пограничного слоя с продольно ориентированными стационарными вихрями [24; 25] показали, что локализованное отсасывание через миниатюрное отверстие в обтекаемой поверхности способно заметно ослабить вторичную неустойчивость такого течения. Эффект достигается воздействием на структуру первичных вихрей и максимален при отсасывании непосредственно под вихрем, на котором развивается вторичная неустой-

чивость. В целом эксперименты показывают, что отсос газа наиболее эффективен для управления ламинарно-турбулентным переходом по сравнению с другими методами управления данным процессом.

Целью настоящей работы является анализ эффективности различных способов управления, основанных на отсосе воздуха из пограничного слоя через проницаемую стенку, и поиск такой проницаемой поверхности, которая обладала бы свойством некой универсальности, позволяющей использовать достоинства указанных способов воздействия на пограничный слой как на линейной, так и на нелинейной стадиях перехода в различных течениях.

Результаты экспериментальных исследований управления переходом с помощью различных методов отсоса газа

Управление развитием возмущений с помощью щелевого отсоса на плоской пластине

В работе [24] исследован процесс развития первоначально синусоидальных возмущений в ламинарном пограничном слое при наличии отсасывания через узкую щель. На рис 3, *a* показано изменение максимума в профиле возмущений вдоль пластины для различных начальных амплитуд без отсоса и с отсосом пограничного слоя. Отсутствие зависимости процесса развития возмущений от величины начальной амплитуды свидетельствует о том, что он протекает в соответствии с линейной теорией гидродинамической устойчивости. С другой стороны, рис 3, *b* демонстрирует, что при различных интенсивностях отсоса развитие возмущений протекает плавно, без каких-либо резких изменений в окрестности щели. При этом амплитуда возмущений в потоке уменьшается поперек всего пограничного слоя в окрестности щели; следовательно, возмущения остаются линейными на значительно большем расстоянии вниз по потоку, и переход к турбулентности не происходит. Таким образом, эффективность отсоса как средства затягивания перехода к турбулентности зависит не от интенсивности пульсаций внутри пограничного слоя, а от стадии протекания процесса перехода, а именно линейной и слабо нелинейной стадий.

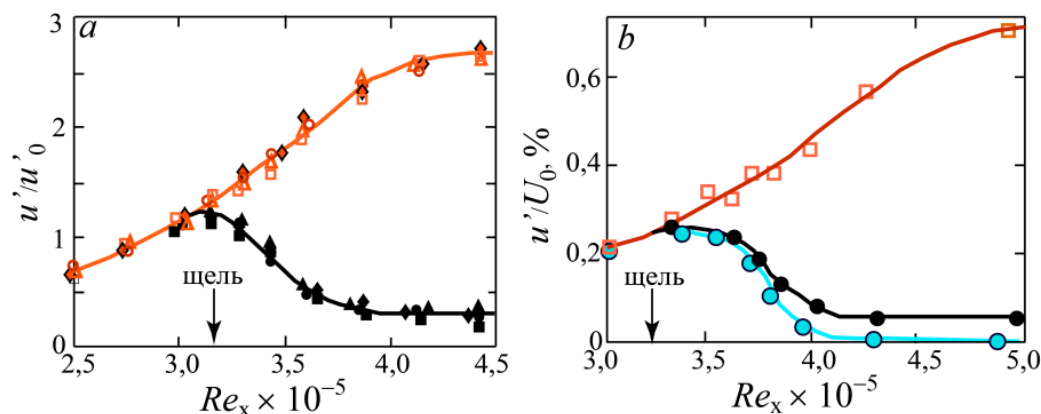


Рис. 3. Влияния отсасывания потока через щель в поверхности плоской пластины на амплитуды возмущений пограничного слоя при варьировании различных начальных амплитуд отсасывания (*a*) и степени отсасывания (*b*) [24]

*Fig. 3. The influence of the flow suction through a slot in the flat plate surface on the perturbation amplitudes of the boundary layer with varying of different initial suction amplitudes (*a*) and suction degree (*b*) [24]*

Управление развитием вторичной неустойчивости продольного стационарного вихря с помощью отсоса через отверстие на обтекаемой поверхности

Результаты исследования пограничного слоя с продольно ориентированными стационарными вихрями [25] показали, что локализованное отсасывание через миниатюрное отверстие в обтекаемой поверхности способно заметно ослабить вторичную неустойчивость такого течения. Эффект достигается воздействием на структуру первичных вихрей и максимален при отсасывании непосредственно под вихрем, на котором развивается вторичная неустойчивость (рис. 4).

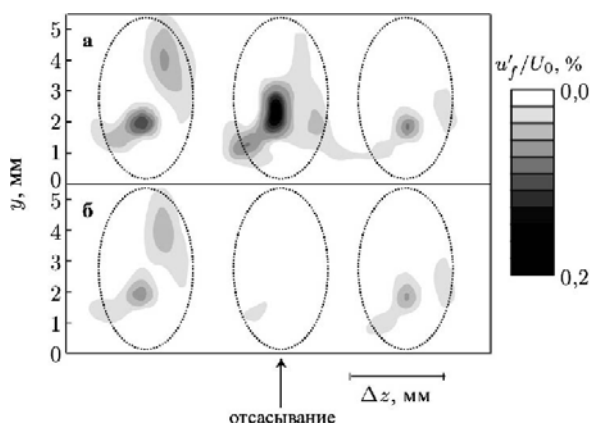


Рис. 4. Влияние отсасывания на развитие бегущих возмущений в стационарных полосчатых структурах в пограничном слое [25]. Амплитуды возмущений без отсоса (а) и при отсасывании (б)

Fig. 4. The effect of suction on the development of traveling disturbances in stationary streaky structures in the boundary layer [25]. The amplitude of the disturbance without suction (a) and suction (b) is presented

Управление развитием вторичной неустойчивости продольных структур в пограничном слое скользящего крыла с помощью локализованного и распределенного отсоса

Результаты экспериментальных исследований возможности управления развитием возмущений в пограничном слое скользящего крыла (рис. 5) с помощью локализованного и распределенного отсоса через ряд отверстий на обтекаемой поверхности [26] можно кратко сформулировать следующим образом.

1. Турбулизация течения в пограничном слое скользящего крыла связана с развитием вторичных высокочастотных возмущений на полосчатых структурах, модулирующих течение в трансверсальном направлении.

2. Локализованный отсос (рис. 6) в трансверсальном направлении не оказывает существенного влияния на подавление интенсивности вторичных возмущений.

3. Распределенный отсос (рис. 7) через несколько локализованных в трансверсальном направлении отверстий (при той же величине отсасываемого газа, что и через одно отверстие) снижает как интенсивность полосчатой структуры, так и интенсивность вторичных возмущений, и коэффициент этого снижения растет с увеличением количества отверстий, через которые ведется отсос.

4. Распределенный отсос (см. рис. 7) через ряд отверстий, общая протяженность которых занимает весь трансверсальный размер полосчатой структуры, подавляет интенсивность развития вторичных возмущений примерно в три раза и, таким образом, затягивает турбулизацию течения.

Рис. 5. Схема эксперимента
Fig. 5. Sketch of experiment

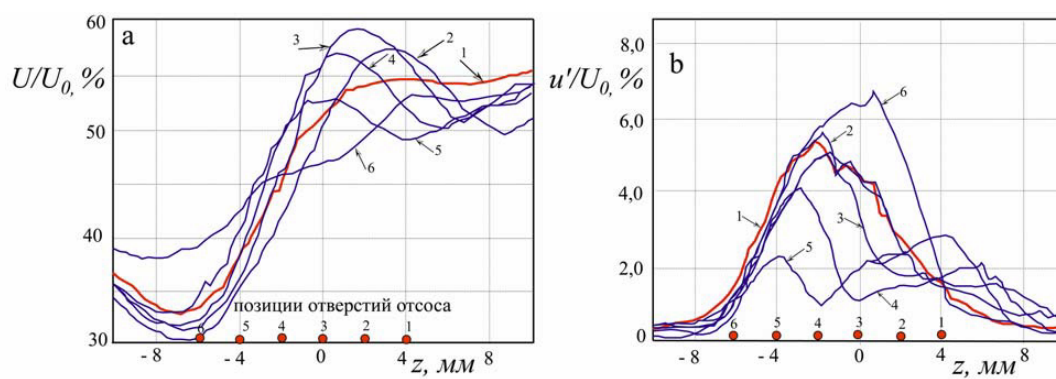
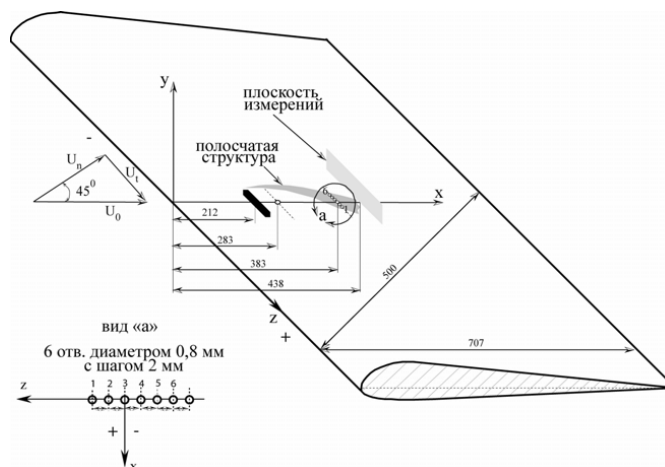


Рис. 6. Влияние локализованного отсоса на распределения средней скорости (а) и пульсаций скорости (b) при развитии возмущения в пограничном слое скользящего крыла:
1 – без отсоса; 2–6 –отсос через отверстия 1–5 соответственно

Fig. 6. The effect of localized suction on the mean velocity distribution (a) and velocity pulsations (b) during the development of a disturbance in the boundary layer of the swept wing:
1 – with no suction; 2–6 suction through the holes 1–5 respectively

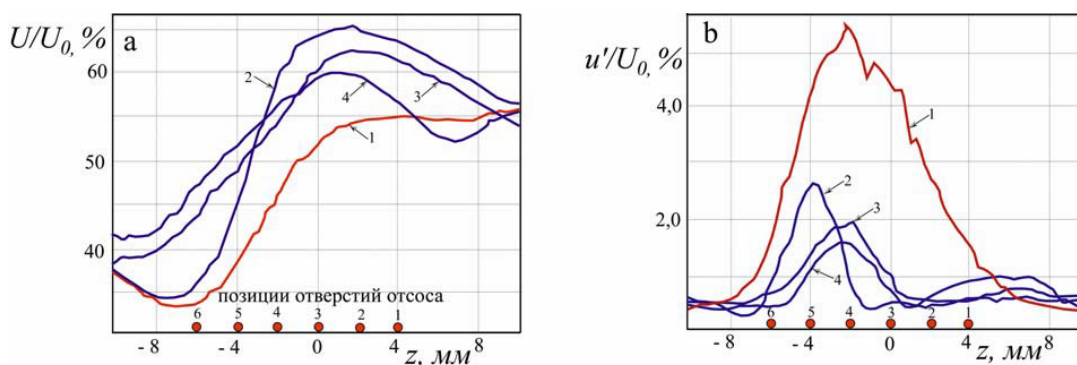


Рис. 7. Влияние распределенного отсоса на распределения средней скорости (а) и пульсаций скорости (b) при развитии возмущения в пограничном слое скользящего крыла:
1 – без отсоса; 2 – отсос через отверстия 1–4; 3 – отсос через отверстия 1–6; 4 –отсос через отверстия 3–6

Fig. 7. The effect of distributed suction on the of mean velocity distribution (a) and velocity fluctuations (b) during the development of disturbances in the boundary layer of the swept wing:
1 – with no suction; 2 – suction through the holes 1–4; 3 – suction through holes 1–6; 4 – suction through holes 3–6

Экспериментальная установка. Модель. Методика эксперимента

Эксперименты проводились в дозвуковой малотурбулентной аэродинамической трубе Т-324 Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН с размерами рабочей части $1 \times 1 \times 4 \text{ м}^3$ при скорости набегающего потока $U_\infty = 10,5 \text{ м/с}$, что соответствовало числам Рейнольдса по хорде крыла $Re_c = 0,35 \times 10^6$.

Исследуемая модель представляет собой прямоугольное крыло, составленное из профильных сечений НАСА 0012 с относительной толщиной $t = t/c = 0,12$. Крыло изготовлено из влагостойкой древесины и имеет симметричный профиль с хордой $c = 501 \text{ мм}$, размахом $z = 950 \text{ мм}$ и максимальной толщиной $t = 60 \text{ мм}$. Качество отделки соответствует уровню шлифованной поверхности. Поперечные координаты верхней y_v и нижней y_n образующих профиля в прямоугольной системе координат с началом на носике крыла определяются в соответствии со следующей формулой:

$$y_{v,n} = t^* (0,2969x^{0,5} - 0,1260x - 0,3516x^2 + 0,2843x^3 - 0,1015x^4)/0,2,$$

где t^* – относительная толщина профиля, равная 0,12. Схема модели крыла для отсоса пограничного слоя представлена на рис. 8 и 9.

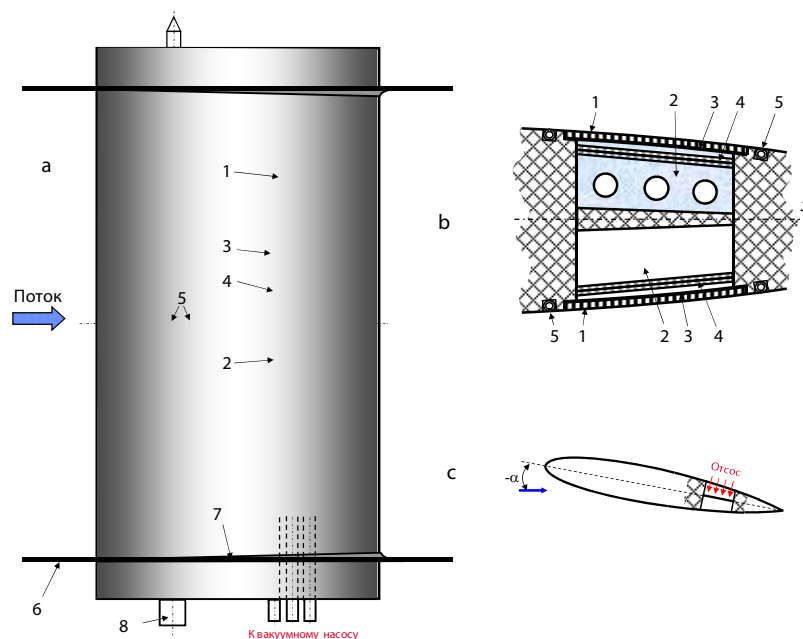


Рис. 8. Основные конструктивные элементы модели крыла для отсоса пограничного слоя: *a* – вид в плане; *b* – вид в продольном сечении; *c* – схема отсоса. 1 – перфорированный вкладыш, 2 – камера отсоса, 3 – мелкоячеистый фильтр, 4 – двухслойный регулируемый хонейкомб, 5 – приемники давления, 6 – концевая шайба, 7 – зализ, 8 – ось поворота крыла по углу атаки

Fig. 8. The main structural elements of the wing model for suction of the boundary layer: *a* – plan view; *b* – view in longitudinal section; *c* – suction circuit. 1 – perforated surface section, 2 – suction chamber, 3 – fine-mesh filter, 4 – two-layer adjustable honeikomb, 5 – pressure orifices, 6 – end plate, 7 – fillet, 8 – wing rotation axis along the angle of attack



Рис. 9. Фотография модели прямого крыла с перфорированным вкладышем (а) и параметры проницаемости перфорированной поверхности (б): пористость 17,1 %, средний диаметр пор (отверстий), расположенных в шахматном порядке, $d = 0,17$ мм, толщина стенки 1,1 мм, удлинение пор 6,7

Fig. 9. Photo of the straight wing model with a perforated surface part (a) and (b) permeability parameters of a perforated surface: porosity 17.1 %, average diameter of pores (holes) $d = 0.17$ mm, wall thickness 1.1 mm, elongation of pores 6.7

Выполненное выше сравнение методов управления ламинарно-турбулентным переходом с помощью отсоса указывает на необходимость поиска поверхности, обладающей достоинствами отмеченных подходов. В этой связи в настоящих экспериментах использовалась заделанная заподлицо с основной поверхностью мелкоперфорированная секция длиной 90 мм и размахом 400 мм, изготовленная по технологии 2-го поколения, которая служит для организации равномерного стационарного отсоса воздуха из пограничного слоя. Положение передней и задней границ перфорированных участков составляет 0,623с и 0,775с от передней кромки крыла. Степень проницаемости собственно перфорированного материала составляла около 17 %. Следующие соображения были приняты за основу при выборе параметров перфорированной секции. Известно, что перфорированная поверхность должна удовлетворять комплексу минимальных требований: высокое качество отделки, необходимая относительная толщина t/d , повышенная равномерность расположения отверстий и оптимальный диаметр, а также достаточная степень проницаемости. Лишь при соблюдении указанных требований можно надеяться, что исходный пограничный слой (при отсутствии отсоса) будет иметь свойства классического, являющегося стартовой основой для изучения характеристик модифицированного течения на крыле. При этом здесь очень важно, чтобы обтекание перфорированной стенки было эквивалентно обтеканию гидравлически гладкого аналога.

В качестве характеристики вдуваемого или отсасываемого воздуха нередко используется безразмерный коэффициент C_μ , равный $(\rho_j h_j U_j^2) / (0,5 \rho U_\infty^2 c)$, где $\rho h U$ – произведение плотности воздуха, ширины струи и скорости, в котором индексы j и ∞ относятся соответственно к струе и к набегающему потоку, а c – хорда крыла. В случае использования перфорированной поверхности понятие ширины струи становится неопределенным. Поэтому нами выполнены достаточно подробные измерения средней скорости отсасываемого воздуха над поверхностью вкладыша на расстоянии $y = 1,5$ мм от стенки при помощи термоанемометра и в отсутствие основного потока. В среднем эта величина составила $U_s = 0,2$ м/с. Безразмерный коэффициент отсоса $C_s = \rho_s v_s / \rho_\infty U_\infty$ в этом случае оказался равным 0,019. Здесь $\rho_s v_s$ – произведение плотности и осредненной по площади скорости вдуваемого воздуха, а $\rho_\infty U_\infty$ – произведение плотности и скорости набегающего потока.

Исследования проводились как с естественными, так и с искусственными возмущениями, генерируемыми с помощью акустики на частоте 169 Гц с интенсивностью звука 92 дБ.

Средняя скорость U и пульсации скорости u' регистрировались в потоке термоанемометром постоянной температуры AN-1003. Тарировка одноточечного датчика и сбор данных производились по стандартной методике. Перемещение датчика в пограничном слое осуществлялось с помощью полностью автоматизированного координатного устройства с тремя степенями свободы (x, y, z). Искусственное внешнее акустическое поле создавалось громкоговорителем, помещенным в рабочую часть аэродинамической трубы позади модели крыла.

Результаты исследований

Влияние распределенного по поверхности отсоса на развитие волн малой амплитуды

Важно отметить, что за счет использования данного проницаемого материала удается получить достаточно равномерное распределение скорости отсасываемого воздуха U_s как по продольной координате X , так и в направлении размаха Z крыла (рис. 10). Видно, что на основной части вкладыша, которая составляет 60 мм по хорде крыла и 250 мм в направлении размаха, неравномерность величины U_s при отсутствии основного потока не превышает 0,05 м/с.

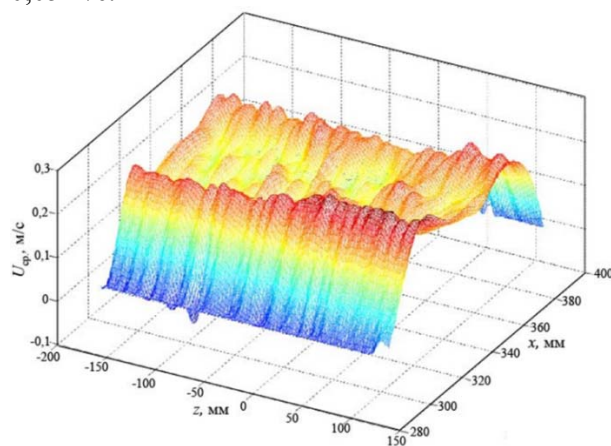


Рис. 10. Распределение скорости отсоса через перфорированный вкладыш в плоскости xz на высоте $Y = 2$ мм

Fig. 10. Distribution of the suction velocity through a perforated surface area in the xz plane at the height $Y = 2$ mm

На рис. 11 показано распределение средней скорости вне пограничного слоя вдоль прямого крыла при отсутствии отсоса при $Z = 50$ мм и угле атаки $\alpha = -6^\circ$. Видно, что перфорированный вкладыш расположен в области слабого неблагоприятного градиента давления, что обычно ассоциируется с нарастанием интенсивности возмущений в данной области пограничного слоя. Здесь буквами $a-e$ показаны позиции точек термоанемометрических измерений, которые находятся как перед вкладышем (a, b), т. е. в области практически безградиентного течения, так и за ним (c, d, e), т. е. в области неблагоприятного градиента давления.

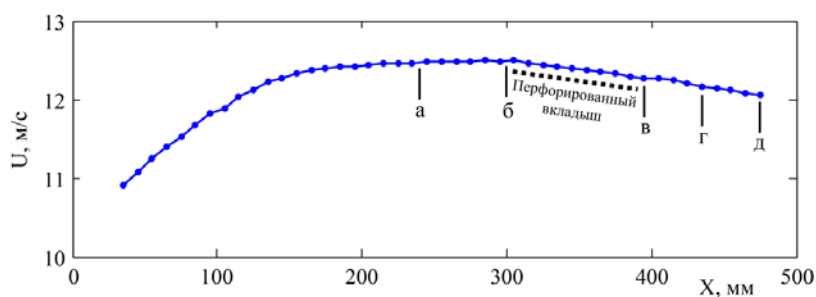


Рис. 11. Распределение средней скорости вне пограничного слоя вдоль хорды прямого крыла в отсутствии отсоса
Fig. 11. Mean velocity distribution outside the boundary layer along the airfoil chord with no suction

Распределение дефекта скорости потока (разность скоростей с отсосом и без отсоса) за перфорированным вкладышем ($X = 395$ мм) в пограничном слое прямого крыла (рис. 12), демонстрирует достаточно равномерное распределение скорости, что должно указывать на одинаковость степени воздействия отсоса на всей протяженности вкладыша вдоль оси Z .

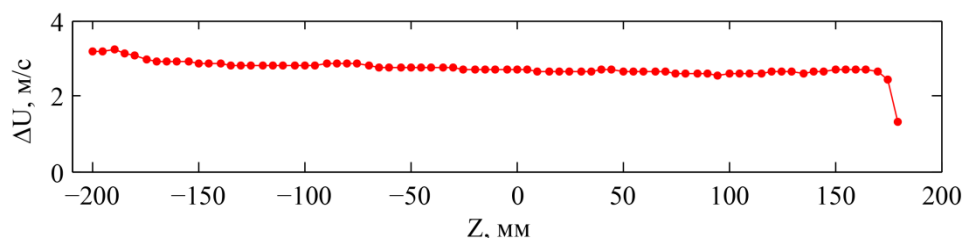


Рис. 12. Распределение дефекта скорости потока (разность скоростей с отсосом и без отсоса) в пограничном слое прямого крыла на высоте 1,5 мм от поверхности вдоль оси Z

Fig. 12. Distribution of the flow velocity defect (difference of velocity between the suction and without suction) in the boundary layer of the straight wing at a height of 1.5 mm from the surface along Z axis

На рис. 13, 14 показаны профили скорости $U_i(y)$ и пульсации скорости $u'(y)$ в пограничном слое прямого крыла впереди перфорированного вкладыша ($x = 240$ и 290 мм соответственно) при наличии естественных возмущений и отсутствии отсоса. Как видно, пограничный слой на поверхности прямого крыла имеет ламинарный характер течения. Это подтверждают также профили средней скорости в пограничном слое, интегральные параметры которого (толщина вытеснения δ^* и потери импульсов δ^{**} и формпараметр H) составляют 0,9 и 0,98; 0,3 и 0,4; 2,84 и 2,76 при $x = 240$ и 290 мм соответственно. Профили пульсаций скорости демонстрируют наличие пульсаций естественных возмущений по всей толщине пограничного слоя с достаточно низкой их интенсивностью в обоих сечениях. При толщине пограничного слоя порядка 4 мм максимум интенсивности естественных фоновых возмущений расположен в области близкой к стенке, а именно на расстоянии 0,5–0,7 мм от нее, так же как и в сечении позади перфорированного вкладыша (рис. 15).

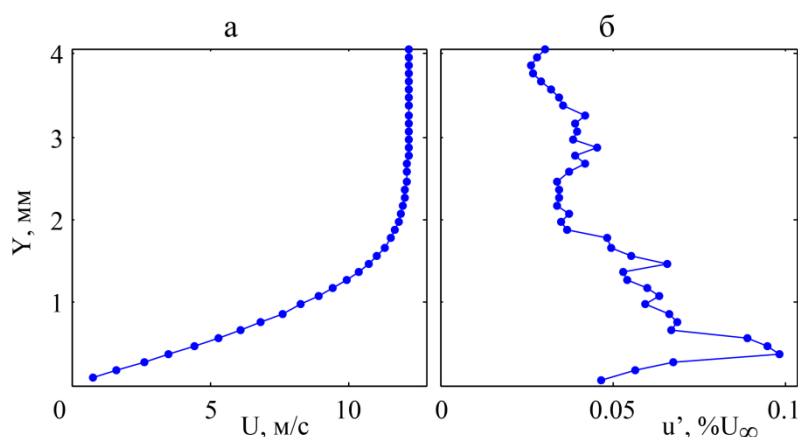


Рис. 13. Профиль скорости $U_i(Y)$ (а) и пульсации скорости $u'(Y)$ (б) в пограничном слое прямого крыла впереди перфорированного вкладыша при наличии естественных возмущений и отсутствии отсоса, $X = 240$ мм

Fig. 13. The velocity profile $U_i(Y)$ (a) and the velocity fluctuations $u'(Y)$ (b) in the airfoil boundary layer in front of the perforated surface in the presence of natural disturbances and with no suction, $X = 240$ mm

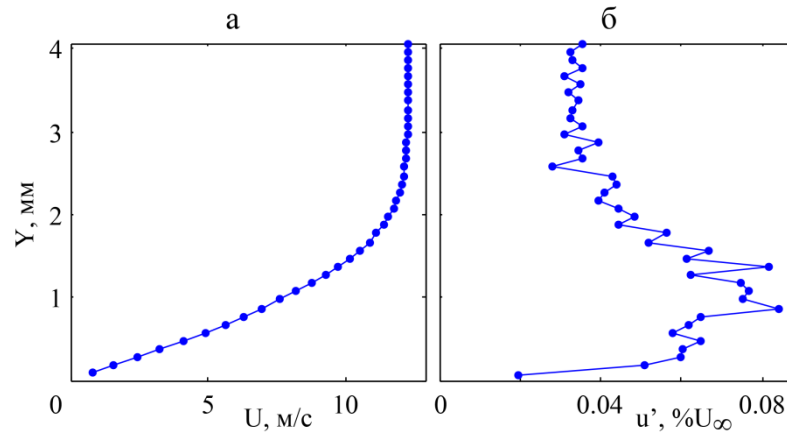


Рис. 14. Профиль скорости $U_i(y)$ (а) и пульсации скорости $u'(y)$ (б) в пограничном слое крыла впереди перфорированного вкладыша при наличии естественных возмущений и отсутствии отсоса, $x = 290$ мм

Fig. 14. The velocity profile $U_i(y)$ (a) and the velocity fluctuations $u'(y)$ (b) in the airfoil boundary layer in front of the perforated surface in the presence of natural disturbances and with no suction, $x = 290$ mm

На рис. 15–17 показаны профили скорости $U_i(y)$ и пульсации скорости $u'(y)$ в пограничном слое прямого крыла позади перфорированного вкладыша при наличии естественных возмущений с отсосом и без отсоса при $x = 395, 435$ и 475 мм. Как видно, распределенный отсос существенно влияет на профили скорости, уменьшая толщину ламинарного пограничного слоя и заметно снижая уровень пульсаций фоновых возмущений по всей высоте пограничного слоя. Обращает также на себя внимание тот важный факт, что отсос способствует присоединению оторвавшегося пограничного слоя при $x = 435$ и 475 мм (см. рис. 16, а, 17, а).

На рис. 18 показаны кривые нарастания интенсивности естественных возмущений вниз по потоку без отсоса и при наличии отсоса со скоростью $U_s = 0,2$ м/с через перфорированный вкладыш в пограничном слое прямого крыла. Можно отчетливо наблюдать гашение интенсивности пульсаций с помощью отсоса в 10 раз при $X = 475$ мм.

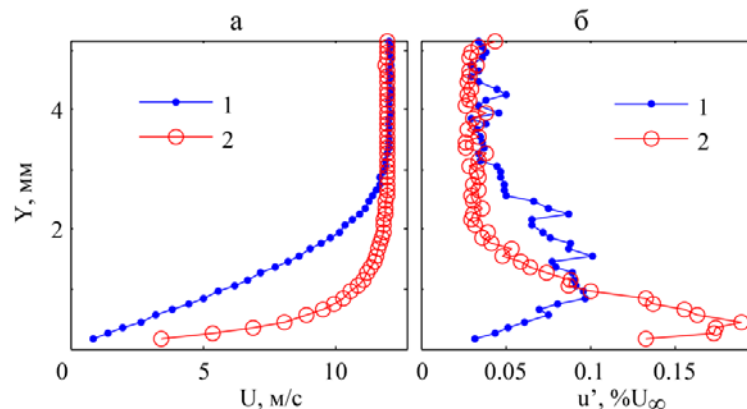


Рис. 15. Профили средней скорости $U_i(y)$ (а) и пульсации скорости $u'(y)$ (б) в пограничном слое крыла позади перфорированного вкладыша при наличии естественных возмущений без отсоса (1) и при отсосе (2), $x = 395$ мм

Fig. 15. The mean velocity profiles $U_i(y)$ (a) and the velocity fluctuations $u'(y)$ (b) in the airfoil boundary layer behind the perforated surface area in the presence of natural disturbances with no suction (1) and with suction (2), $x = 395$ mm

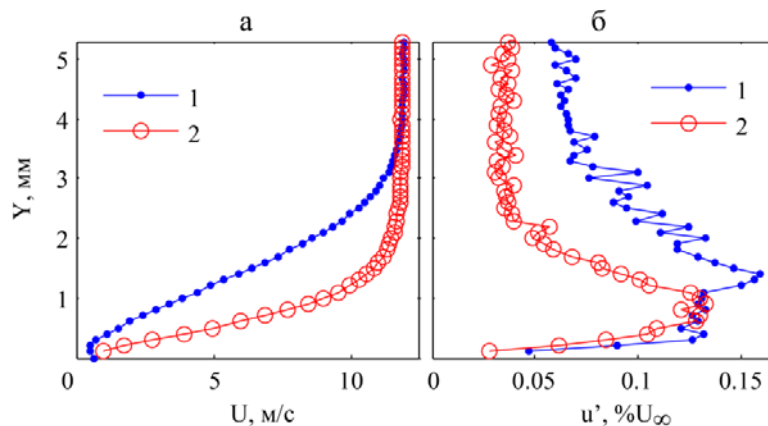


Рис. 16. Профили средней скорости $U_i(y)$ (а) и пульсации скорости $u'(y)$ (б) в пограничном слое позади перфорированного вкладыша при наличии естественных возмущений без отсоса (1) и при отсосе (2), $x = 435$ мм

Fig. 16. The mean velocity profiles $U_i(y)$ (a) and the velocity fluctuations $u'(y)$ (b) in the boundary layer behind the perforated surface area in the presence of natural disturbances with no suction (1) and with suction (2), $x = 435$ мм

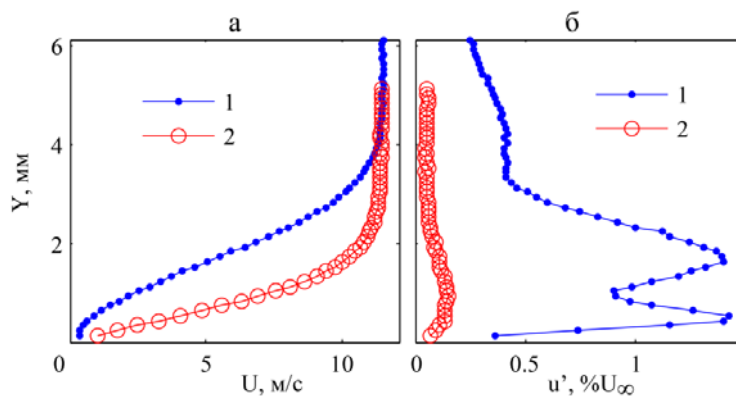


Рис. 17. Профили средней скорости $U_i(y)$ (а) и пульсации скорости $u'(y)$ (б) в пограничном слое позади перфорированного вкладыша при наличии естественных возмущений без отсоса (1) и при отсосе (2), $x = 475$ мм

Fig. 17. The mean velocity profiles $U_i(y)$ (a) and the velocity fluctuations $u'(y)$ (b) in the boundary layer behind the perforated surface area in the presence of natural disturbances with no suction (1) and with suction (2), $x = 475$ мм

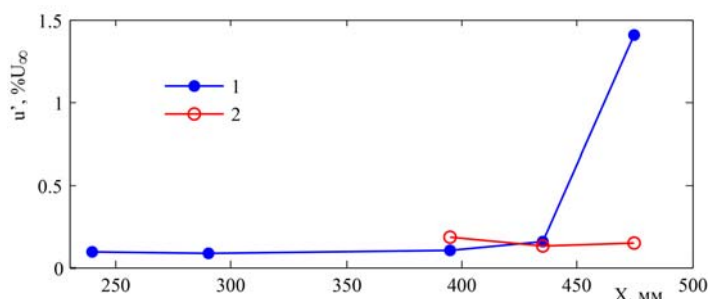


Рис. 18. Кривые распределения интенсивности естественных возмущений вниз по потоку без отсоса (1) и при наличии отсоса через перфорированный вкладыш (2) в пограничном слое прямого крыла

Fig. 18. Distribution curves of the intensity of natural disturbances downstream with no suction (1) and in the presence of suction through a perforated surface (2) in the boundary layer of the straight wing

На рис. 19 показан пример распределения по пространственной координате Y амплитудных спектров пульсаций пограничного слоя. На рис. 20 – те же частотные спектры пульсаций пограничного слоя от естественного акустического шума в отсутствие отсоса, но в плоскости Y – f , амплитуда представлена цветом для координаты X . Видно, как в спектре пульсаций пограничного слоя выделяются две характерные частоты. При $X = 240, 290$ мм, характерная частота $f = 361$ Гц, т. е. в области почти безградиентного течения впереди перфорированного вкладыша. В области неблагоприятного градиента давления при $X = 395, 435$ и 475 мм характерная частота $f = 361$ Гц исчезает, но зато возникает и усиливается возмущение с частотой $f = 169$ Гц по всей толщине пограничного слоя. Данный факт хорошо согласуется с известным сценарием перехода на прямом крыле, когда сначала в пограничном слое возникает собственное возмущение (волна $TIII$) с основной частотой (в нашем случае это 361 Гц), затем ниже по потоку, происходит интенсивный рост субгармоники (у нас это 169 Гц), приводящий к ламинарно-турбулентному переходу. Спектры пульсаций после воздействия отсоса показаны на рис. 21. Пульсации сосредоточены внутри пограничного слоя в области низких частот, рис. 21, *а*. Ниже по потоку происходит равномерное заполнение спектра, а возмущения на основной частоте и ее субгармонике не выделяются, рис. 21, *в*.

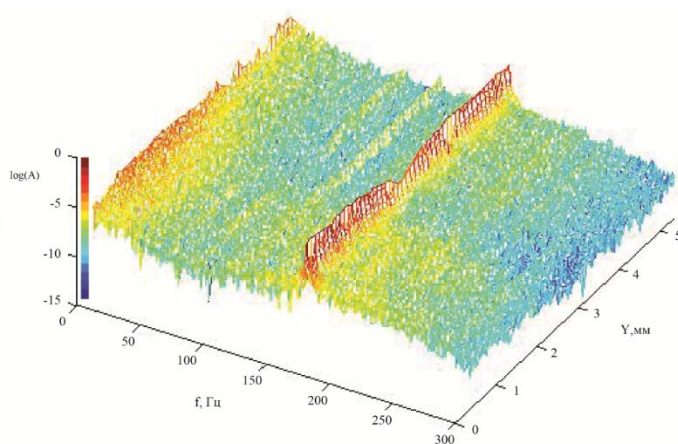


Рис. 19. Пространственный амплитудно-частотный спектр возмущений пограничного слоя от естественного акустического шума в отсутствие отсоса, $X = 435$ мм

Fig. 19. The spatial amplitude-frequency spectrum of the boundary fluctuations from natural acoustic noise in the absence of suction, $X = 435$ mm

На каждом из рис. 22–26 показаны профили скорости $U_x(Y)$ (*а*) и пульсации скорости $u'(Y)$ в выделенном диапазоне частот $f = 169 \pm 20$ Гц (*б*) внутри пограничного слоя прямого крыла при $X = 240, 290, 395, 435$ и 475 мм, а также амплитудно-частотные спектры, распределенные по координате Y (*с*) и для фиксированной координаты Y (*д*), соответствующей максимуму возмущения. Результаты представлены без воздействия отсоса в условиях наложенного акустического поля с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб. Частота акустического воздействия $f = 169$ Гц выбрана не случайно, поскольку именно она была обнаружена ранее при исследовании естественных возмущений как наиболее растущая в области неблагоприятного градиента давления за перфорированным вкладышем. Интенсивность акустического воздействия 92 дБ является минимально необходимой для устойчивого проявления эффекта усиления данной гармоники. Предварительно исследовались и другие частоты с разной амплитудой акустического воздействия. Преобразование внешних акустических колебаний в собственные возмущения пограничного слоя наблюдалось и для частоты акустики $f = 361$ Гц. Профили средней скорости (рис. 22, *а* – 26, *а*) демонстрируют наличие ламинарного течения во всей области измерений, а профили пульсаций скорости (рис. 22, *б* – 26, *б*) показывают наличие возмущения типа волны $TIII$ с двумя максимумами вблизи стенки и в области внешней границы пограничного слоя. Таким образом, в данной ситуации мы имеем дело с процессом развития линейной волны $TIII$ с основной частотой $f = 169$ Гц. При $X = 240$ и 290 мм (рис. 22, *с, д* и 23, *с, д*) в спектрах появляется частота $f = 361$ Гц, которую можно назвать кратной гармоникой для искусственно генерируемой волны 169 Гц. Далее,

частота 361 Гц пропадает из спектров при $X = 395$ и 465 мм (рис. 24, *c, d* и 25, *c, d*), и затем снова появляется при $X = 475$ мм (рис. 26, *c, d*).

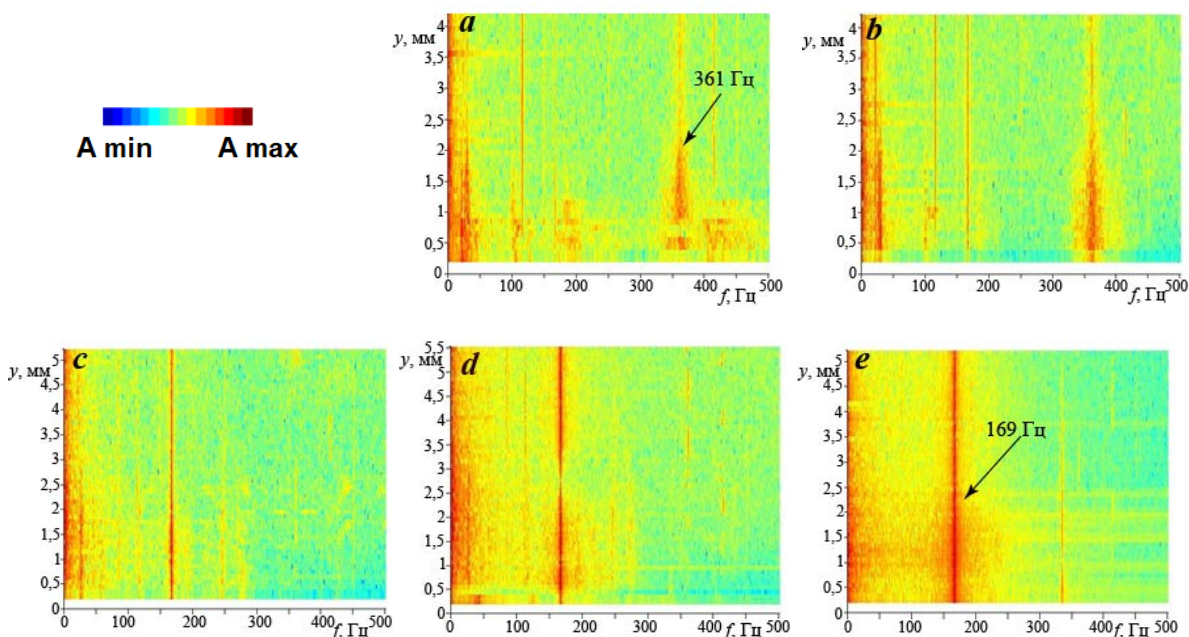


Рис. 20. Пространственные амплитудно-частотные спектры возмущений пограничного слоя от естественного акустического шума в отсутствие отсоса, измеренные при X : *a* – 240 мм, *b* – 290 мм, *c* – 395 мм, *d* – 435 мм, *e* – 475 мм

Fig. 20. The spatial amplitude-frequency spectra of the boundary fluctuations from natural acoustic noise in the absence of suction, measured at X : *a* – 240 mm, *b* – 290 mm, *c* – 395 mm, *d* – 435 mm, *e* – 475 mm.

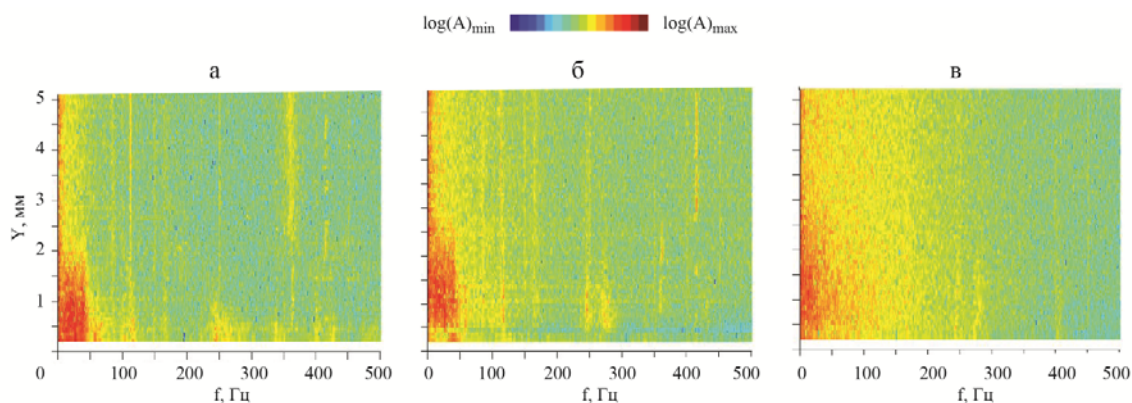


Рис. 21. Пространственные амплитудно-частотные спектры возмущенности пограничного слоя от естественного акустического шума при отсосе, измеренные при X : *a* – 395 мм, *б* – 435 мм, *в* – 475 мм

Fig. 21. The spatial amplitude-frequency spectra of the boundary fluctuations from natural acoustic noise in the absence of suction, measured at X : *a* – 395 mm, *б* – 435 mm, *в* – 475 mm

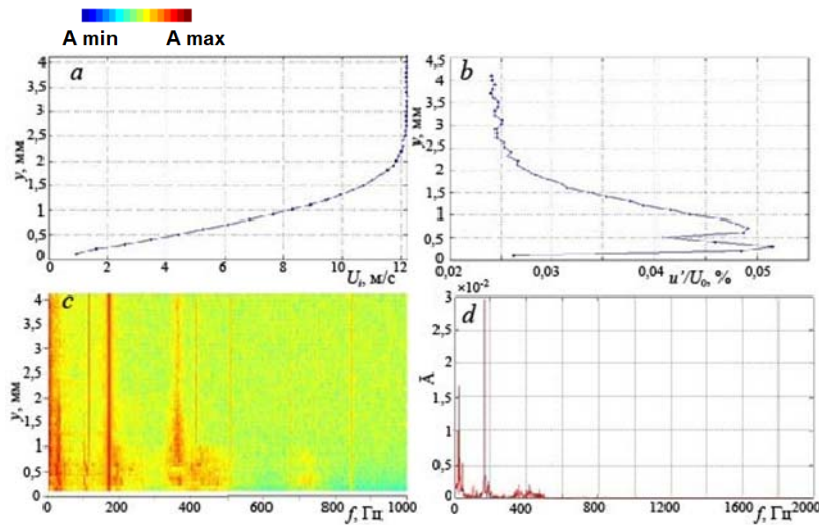


Рис. 22. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла перед перфорированным вкладышем при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб в отсутствие отсоса, $X = 240$ мм

Fig. 22. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing in front of perforated surface with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB in the absence of suction, $X = 240$ mm

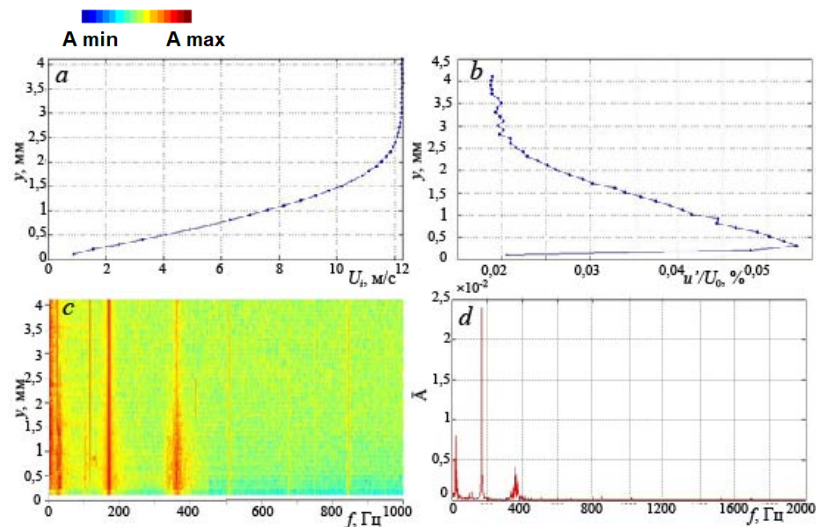


Рис. 23. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла перед перфорированным вкладышем при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб в отсутствие отсоса, $X = 290$ мм

Fig. 23. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing in front of perforated surface with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB in the absence of suction, $X = 290$ mm

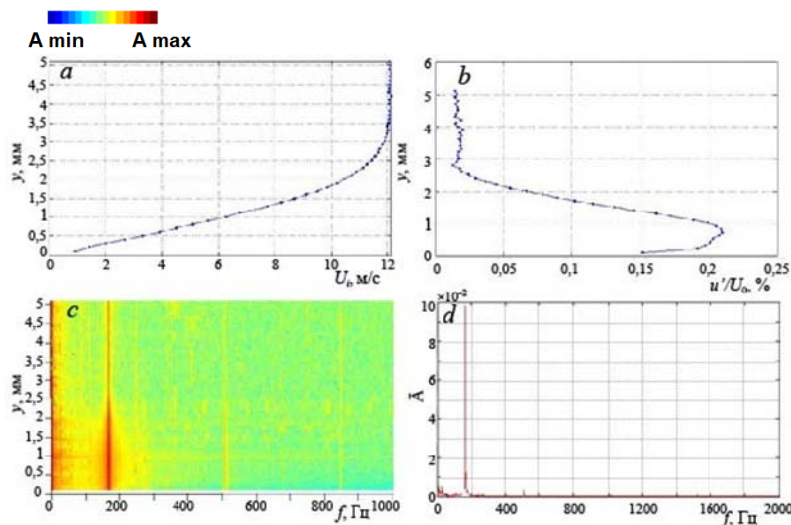


Рис. 24. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла за перфорированным вкладышем при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб в отсутствие отсоса, $X = 395$ мм

Fig. 24. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing behind perforated surface with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB in the absence of suction, $X = 395$ mm

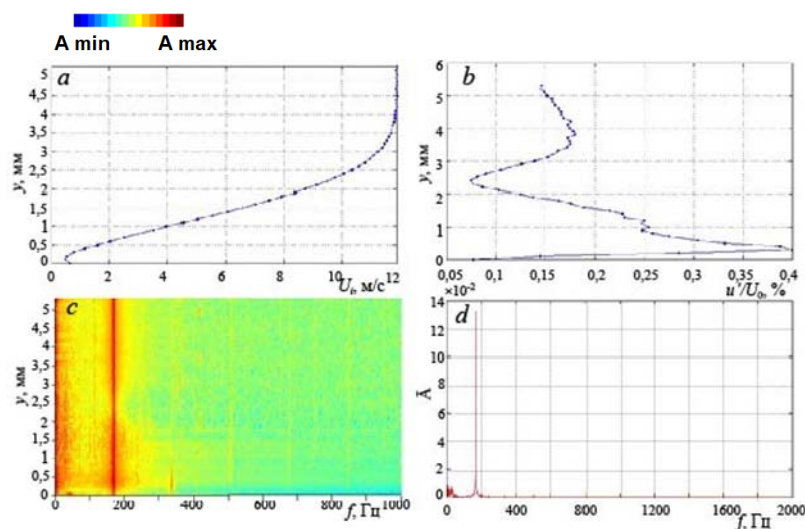


Рис. 25. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб в отсутствие отсоса за перфорированным вкладышем, $X = 435$ мм

Fig. 25. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing behind perforated surface with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB in the absence of suction, $X = 435$ mm

Таким образом, повторился сценарий для случая естественных возмущений, рассмотренного выше, хотя мы генерируем не основную частоту, а только ее субгармонику. Развиваясь в области неблагоприятного градиента давления интенсивность возмущения на частоте $f = 169$ Гц нарастает и достигает 2,4 % от U_∞ при $X = 475$ мм. С другой стороны, можно наблюдать появление кратных основной частоте гармоник, рис. 26, *c, d*, т. е. процесс, постепенно переходит на нелинейную стадию развития.

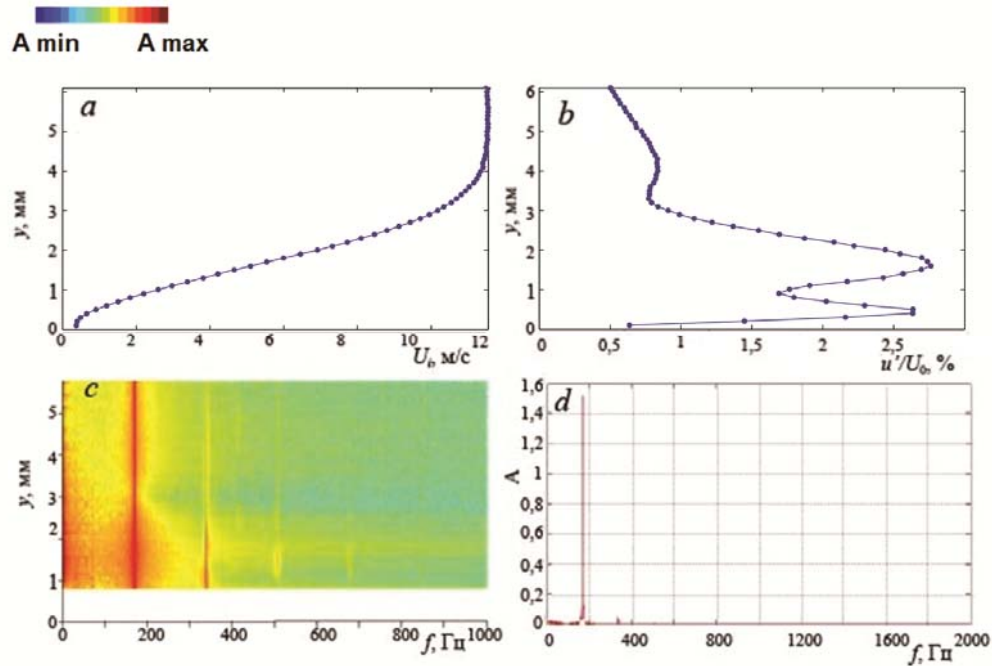


Рис. 26. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб в отсутствие отсоса за перфорированным вкладышем, $X = 475$ мм

Fig. 26. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing behind perforated surface with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB in the absence of suction, $X = 475$ mm, $Z = 50$ mm

На рис. 27–29 показаны профили скорости $U_i(Y)$ (a) и пульсации скорости $u'(Y)$ в выделенном диапазоне частот $f = 169 \pm 20$ Гц (b) за перфорированным вкладышем при $X = 395$, 435 и 475 мм, а также амплитудно-частотные спектры, распределенные по координате Y (c) и для фиксированной координаты Y (d), соответствующей максимуму возмущения. Исследования проведены при включенном отсосе через перфорированный вкладыш в условиях такого же, что и в предыдущем случае, наложенного акустического поля с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб. Отсос пограничного слоя, как уже отмечалось, оказывает существенное влияние как на профиль средней скорости, так и на профиль ее пульсаций по всей

толщине пограничного слоя, при этом в спектрах пульсаций видно подавление кратных гармоник и субгармоники, но зато подросла интенсивность низкочастотной части спектра ($f < 100$ Гц), рис. 26, в, г и 29, в, г). На рис. 30 представлена общая картина, показывающая эволюцию профилей средней скорости и пульсаций скорости. Как и для естественных возмущений, воздействие отсоса, помимо снижения пульсаций скорости, способствовало присоединению оторвавшегося пограничного слоя. На рис. 31 показаны кривые изменения интенсивности возмущений на частоте 169 Гц вниз по потоку без отсоса и при наличии отсоса $U_s = 0,2$ м/с через перфорированный вкладыш в пограничном слое прямого крыла. Что касается воздействия отсоса на гашение интенсивности возмущений, то, как видно из рис. 31, интенсивность пульсаций снизилась в 20 раз при $X = 475$ мм.

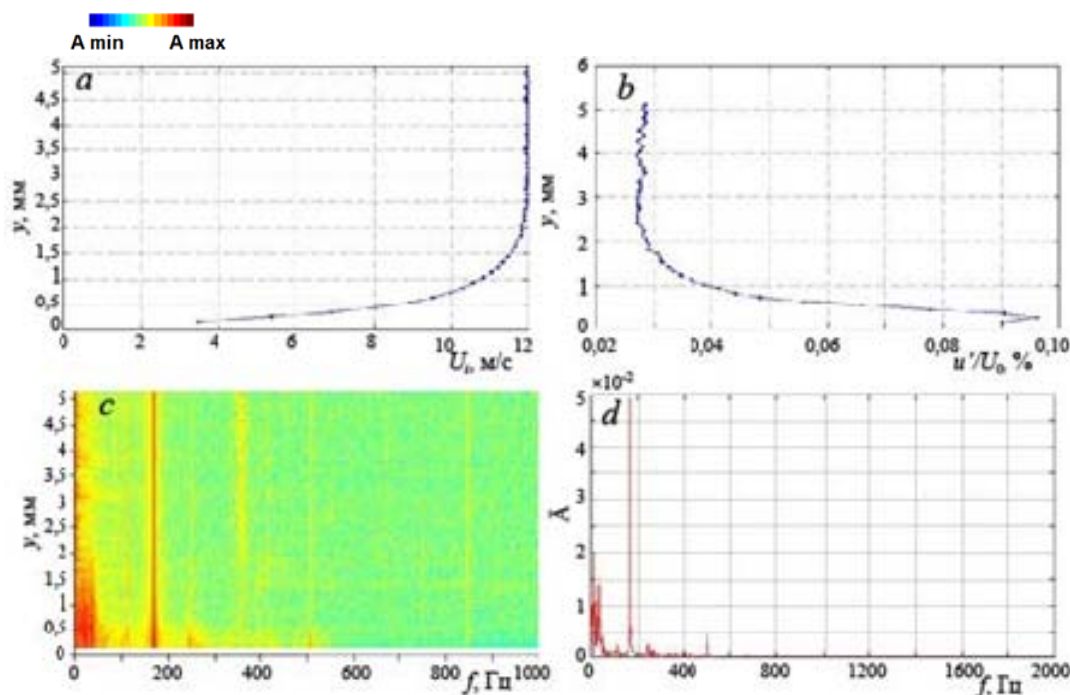


Рис. 27. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб с отсосом через перфорированный вкладыш, $X = 395$ мм

Fig. 27. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB behind with suction through the perforated surface, $X = 395$ mm

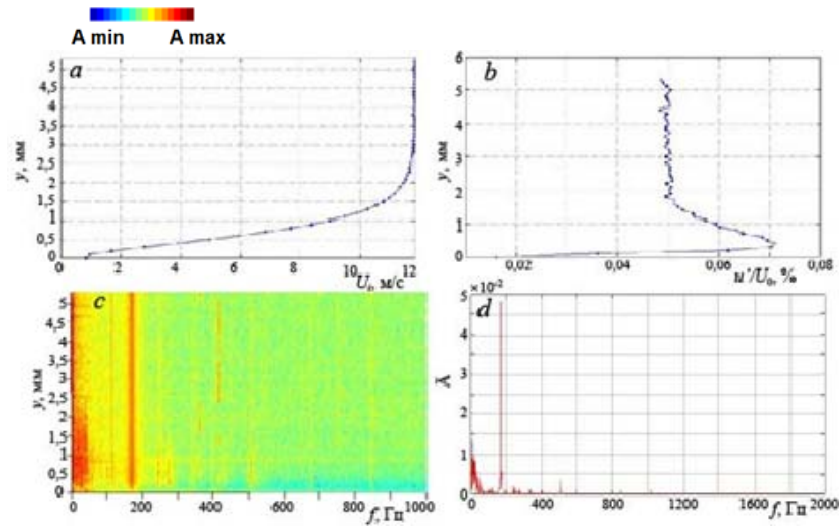


Рис. 28. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб с отсосом через перфорированный вкладыш, $X = 435$ мм.

Fig. 28. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB behind with suction through the perforated surface, $X = 435$ mm.

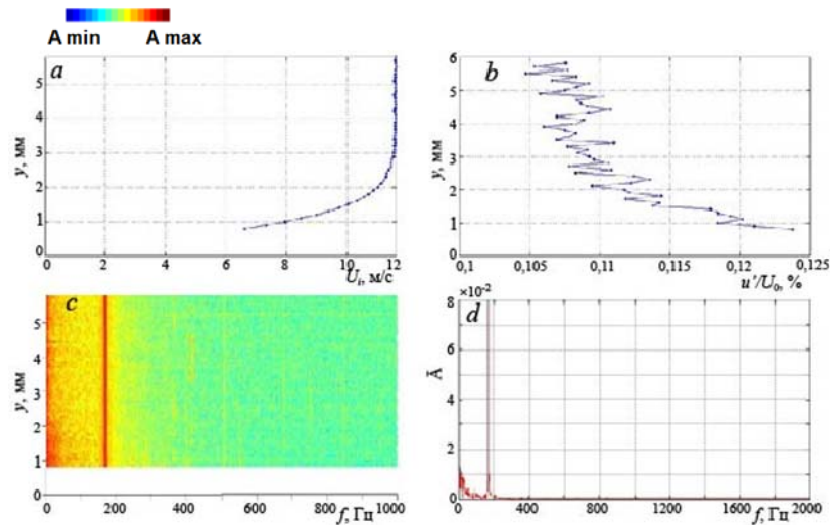


Рис. 29. Профиль средней скорости $U_i(Y)$ (a), пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (b), пространственные амплитудно-частотные спектры (c) и амплитудно-частотный спектр в области максимума возмущения по Y (d) в пограничном слое прямого крыла при наложенном акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб с отсосом через перфорированный вкладыш, $X = 475$ мм

Fig. 29. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a), velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b), spatial amplitude-frequency spectra (c) and amplitude-frequency spectrum in the region of the disturbance maximum on Y (d) in the boundary layer of the straight wing with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB behind with suction through the perforated surface, $X = 475$ mm

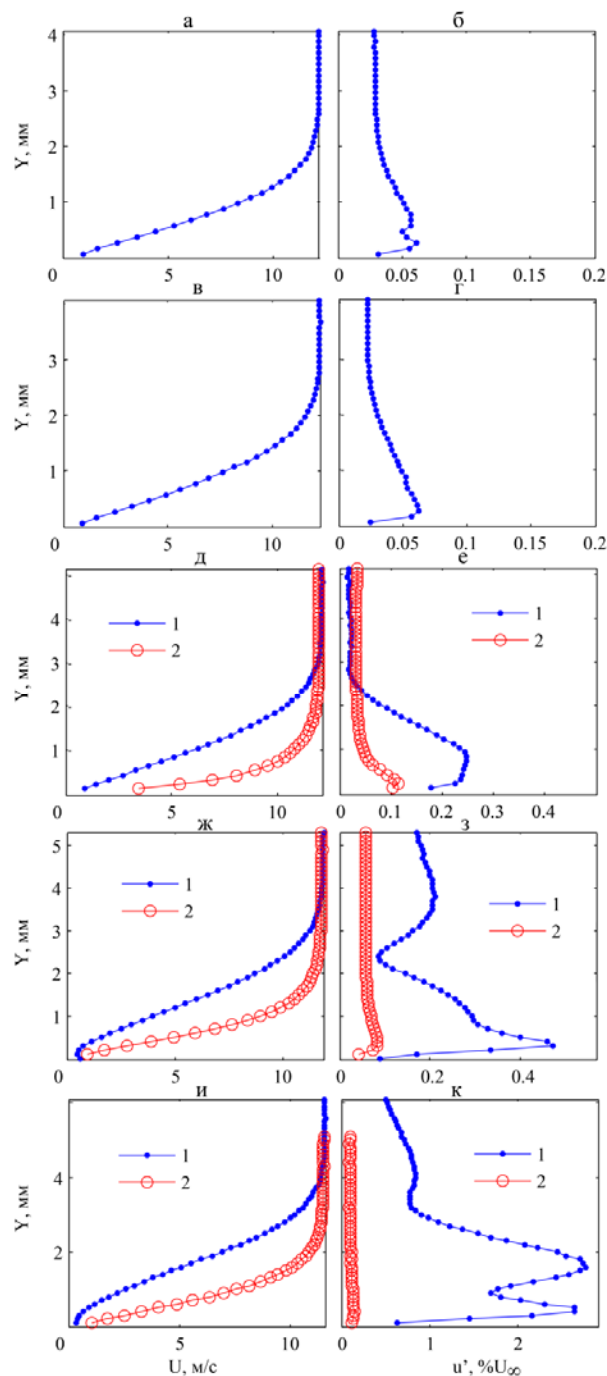


Рис. 30. Профили средней скорости $U_i(Y)$ (а, в, д, ж, и) и пульсаций скорости $u'(Y)$ на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц (б, г, е, з, к) в пограничном слое прямого крыла без отсоса (1) и с отсосом через перфорированный вкладыш (2); при наложенном внешнем акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб, $Z = 50$ мм; при $X = 240$ мм (а, б), 290 мм (в, г), 395 мм (д, е), 435 мм (ж, з), 475 мм (и, к)

Fig. 30. Mean velocity profile $U_i(Y)$ (a, c, e, g, i), and velocity pulsations $u'(Y)$ at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz (b, d, f, h, j), in the boundary layer of the straight wing without suction (1) and with suction through the perforated surface (2 with an applied acoustic field with a frequency of $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB, $Z = 50$ mm; at $X = 240$ mm (a, b), 290 mm (c, d), 395 mm (e, f), 435 mm (g, h), 475 mm (i, j)

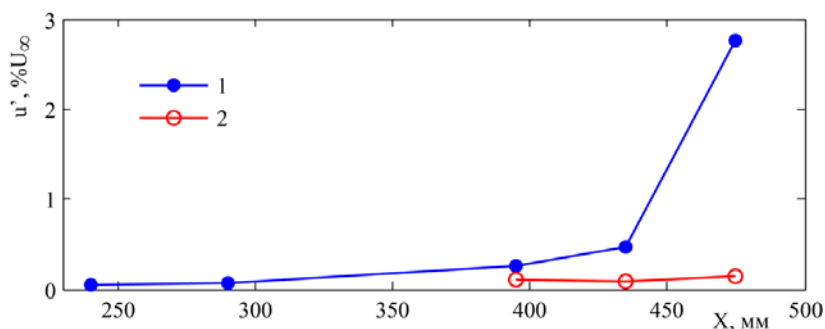


Рис. 31. Изменение интенсивности возмущений на частоте $f = 169 \pm 20$ Гц вниз по потоку без отсоса (1) и при наличии отсоса (2) через перфорированный вкладыш в пограничном слое прямого крыла при наложенном внешнем акустическом поле с частотой $f = 169$ Гц и интенсивностью 92 Дб, при $Z = 50$ мм, $Y = Yu'_{\max}$

Fig. 31. The downstream distribution of the disturbances intensity at the frequency $f = 169 \pm 20$ Hz without suction (1) and in the presence of suction (2) through the perforated surface in the straight wing boundary layer with an external acoustic field with the frequency $f = 169$ Hz and intensity of 92 dB, at $Z = 50$ mm, $Y = Yu'_{\max}$

Выводы

Исследовано влияние распределенного отсоса через перфорированный вкладыш на пространственное развитие возмущений пограничного слоя прямого крыла. Обнаружено, что распределенный отсос снижает в 10 раз интенсивность естественных возмущений пограничного слоя и в 20 раз интенсивность искусственных возмущений, генерируемых внешним акустическим полем. Спектральный анализ возмущений показал, что отсос снижает интенсивность высокочастотных пульсаций как для естественных, так и для вынужденных возмущений. Распределенный отсос существенно влияет на среднее течение, вплоть до устранения отрыва пограничного слоя вблизи задней кромки крыла. Усиление вниз по потоку амплитуды естественных возмущений происходит на частоте субгармоники.

Список литературы

1. Качанов Ю. С., Козлов В. В., Левченко В. Я. Возникновение турбулентности в пограничном слое. Новосибирск: Наука, 1982. 151 с.
2. Бойко А. В., Грек Г. Р., Довгаль А. В., Козлов В. В. Физические механизмы перехода к турбулентности в открытых течениях / НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ин-т компьютерных исследований. М.; Ижевск, 2005. 304 с.
3. Schubauer G. B., Skramstad H. K. Laminar-boundary layer oscillations and transition on a flat plate. NACA TN 909, 1948.
4. Klebanoff P. S., Tidstrom K. D., Sargent I. M. The three-dimensional nature of boundary layer instability. *J. Fluid Mech.*, 1962, vol. 12, pt. 1, p. 1–34.
5. Козлов В. В., Левченко В. Я., Сарик У. С. Образование трехмерных структур при переходе в пограничном слое. Новосибирск, 1983. 34 с. (Препринт / ИТПМ СО АН СССР, № 10-83)
6. Казаков А. В., Коган М. Н., Купарев В. А. О повышении устойчивости дозвукового пограничного слоя при нагревании поверхности вблизи передней кромки // Докл. АН СССР. 1985. Т. 283, № 2. С. 333–335.

7. Лебедев Ю. В., Фомичев В. М. Устойчивость пограничного слоя на неравномерно нагретой и охлажденной поверхности // *Аэрофизика и геокосмические исследования*. М., 1985. С. 35–41.
8. Струминский В. В., Лебедев Ю. В., Фомичев В. М. Влияние градиента температуры вдоль поверхности на протяженность ламинарного пограничного слоя газа // *Докл. АН СССР*. 1986. Т. 289, № 4. С. 813–816.
9. Dovgal A. V., Levchenko V. Y., Timofeev V. A. Boundary layer control by a local heating of the wall. In: Arnal D., Michel R. (eds.) *Laminar-Turbulent Transition*. IUTAM Symposium. Berlin, Springer-Verlag, 1990, p. 113–121.
10. Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V. Effects of riblets on vortex development in the wake behind a single roughness element in the laminar boundary layer on a flat plate. *Rech. Aerospac.*, 1996, vol. 1996, no. 1, p. 1–9.
11. Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V. An experimental study on the influence of riblets on transition. *J. Fluid Mech.*, 1996, vol. 315, p. 31–49.
12. Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V., Klingmann B. G. B. The influence of riblets on a boundary layer with embedded streamwise vortices. *Phys. Fluids A*, 1995, vol. 7, no. 10, p. 2504–2506.
13. Luchini, P. Asymptotic analysis of laminar boundary-layer flow over finely grooved surfaces. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 1995, vol. 14, no. 2, p. 169–195.
14. Luchini P., Manzo M., Pozzi A. Resistance of a grooved surface to parallel flow and cross-flow. *J. Fluid Mech.*, 1991, vol. 228, p. 87–109.
15. Грек Г. Р., Козлов В. В., Титаренко С. В. Исследование влияния оребрения поверхности на процесс развития уединенного волнового пакета (Λ -вихря) в ламинарном пограничном слое // *Сиб. физ.-техн. журн.* 1993. Т. 35, № 2. С. 29–36.
16. Bippes H., Wiegel M., Bertolotti F. Experiments on the control of crossflow instability with the aid of suction through perforated walls. In: Meier G. E. A., Viswanath P. R. (eds.). *Mechanics of Passive and Active Flow Control*. Dordrecht, Kluwer, 1999, p. 165–170.
17. Michel R., Arnal D., Coustols E. Stability calculations and transition criteria on two and three-dimensional flows. In: Kozlov V. V. (ed.) *Laminar-Turbulent Transition*. IUTAM Symposium. Berlin, Springer-Verlag, 1985, p. 455–461.
18. Arnal D., Juillen J. C., Reneaux J., Gasparian G. Effect of wall suction on leading edge contamination. *Aerosp. Sci. Technol.*, 1997, vol. 8, p. 505–517.
19. Forest A. E. Engineering predictions of transitional boundary-layers: CP 224: AGARD, 1977.
20. Evert F., Ronneberger D., Grosche F.-R. Application of linear and nonlinear adaptive filters for the compensation of disturbances in the laminar boundary layer. *Z. Angew. Math. Mech.*, 2000, vol. 80, no. 1, p. 85–88.
21. Abegg C., Bippes H., Boiko A., Krishnan V., Lerche T., Pothke A., Wu Y., Dallmann U. Transitional flow physics and flow control for swept wings: Experiments on boundary-layer receptivity, instability excitation and HLF-technology. In: *Proc. CEAS/DragNet European Drag Reduction Conf.* Potsdam, 2000, p. 675–680.
22. Abegg C., Bippes H., Janke E. Stabilization of boundary-layer flows subject to crossflow instability with the aid of suction. In: Fasel H. F., Saric W. S. (eds.) *Laminar-Turbulent Transition*. IUTAM Symposium. Berlin, Springer-Verlag, 2000, p. 607–612.
23. Abu-Ghanamm B. J., Shaw R. Natural transition of boundary layers – the effects of turbulence, pressure gradient, and flow history. *J. Mech. Eng. Sci.*, 1980, vol. 22, p. 213–228.
24. Козлов В. В., Левченко В. Я., Щербаков В. А. Развитие возмущений в пограничном слое при щелевом отсасывании // *Учен. зап. ЦАГИ*. 1978. Т. 9, № 2. С. 99–105.
25. Бойко А. В., Козлов В. В., Сызранцев В. В., Щербаков В. А. Активное управление вторичной неустойчивостью в трехмерном пограничном слое // *Теплофизика и аэромеханика*. 1999. Т. 6, № 2. С. 181–192.

26. Литвиненко Ю. А., Козлов В. В., Чернорай В. Г., Грек Г. Р., Лефдаль Л. Л. Управление неустойчивостью поперечного течения скользящего крыла с помощью отсоса // Теплофизика и аэромеханика. 2003. Т. 10, № 4. С. 559–567.

References

1. **Kachanov Yu. S., Kozlov V. V., Levchenko V. Ya.** Occurrence of turbulence in the boundary layer. Novosibirsk: Nauka, 1982, 151 p. (in Russ.)
2. **Boiko A. V., Grek G. R., Dovgal A. V., Kozlov V. V.** Physical mechanisms of transition to turbulence in open flows. SIC "Regular and chaotic dynamics", Institute of computer research. Moscow, Izhevsk, 2005, 304 p. (in Russ.)
3. **Schubauer G. B., Skramstad H. K.** Laminar-boundary layer oscillations and transition on a flat plate. NACA TN 909, 1948.
4. **Klebanoff P. S., Tidstrom K. D., Sargent I. M.** The three-dimensional nature of boundary layer instability. *J. Fluid Mech.*, 1962, vol. 12, pt. 1, p. 1–34.
5. **Kozlov V. V., Levchenko V. Ya., Sarik U. S.** Formation of three-dimensional structures during transition in the boundary layer. Novosibirsk, 1983, 34 p. (Preprint / ITAM SB as USSR, no. 10-83) (in Russ.)
6. **Kazakov A. V., Kogan M. N., Kuparev V. A.** On increasing the stability of a subsonic boundary layer when the surface is heated near the leading edge. *Docl. USSR Academy of Sciences*, 1985, vol. 283, no. 2, p. 333–335. (in Russ.)
7. **Lebedev Yu. V., Fomichev V. M.** Stability of the boundary layer on an unevenly heated and cooled surface. In: Aerophysics and Geocosmic Research. Moscow, 1985, p. 35–41. (in Russ.)
8. **Struminsky V. V., Lebedev Yu. B., Fomichev V. M.** Influence of the temperature gradient along the surface on the extent of the laminar boundary layer of gas. *Docl. USSR Academy of Sciences*, 1986, vol. 289, no. 4, p. 813–816. (in Russ.)
9. **Dovgal A. V., Levchenko V. Y., Timofeev V. A.** Boundary layer control by a local heating of the wall. In: Arnal D., Michel R. (eds.) Laminar-Turbulent Transition. IUTAM Symposium. Berlin, Springer-Verlag, 1990, p. 113–121.
10. **Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V.** Effects of riblets on vortex development in the wake behind a single roughness element in the laminar boundary layer on a flat plate. *Rech. Aerospac.*, 1996, vol. 1996, no. 1, p. 1–9.
11. **Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V.** An experimental study on the influence of riblets on transition. *J. Fluid Mech.*, 1996, vol. 315, p. 31–49.
12. **Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V., Klingmann B. G. B.** The influence of riblets on a boundary layer with embedded streamwise vortices. *Phys. Fluids A.*, 1995, vol. 7, no. 10, p. 2504–2506.
13. **Luchini P.** Asymptotic analysis of laminar boundary-layer flow over finely grooved surfaces. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 1995, vol. 14, no. 2, p. 169–195.
14. **Luchini P., Manzo M., Pozzi A.** Resistance of a grooved surface to parallel flow and cross-flow. *J. Fluid Mech.*, 1991, vol. 228, p. 87–109.
15. **Grek G. R., Kozlov V. V., Titarenko S. V.** Investigation of the influence of surface finning on the development of a solitary wave packet (Λ -vortex) in a laminar boundary layer. *Sib. Phys.-Tech. Journal*, 1993, vol. 35, no. 2, p. 29–36. (in Russ.)
16. **Bippes H., Wiegel M., Bertolotti F.** Experiments on the control of crossflow instability with the aid of suction through perforated walls. In: Meier G. E. A., Viswanath P. R. (eds.). Mechanics of Passive and Active Flow Control. Dordrecht, Kluwer, 1999, p. 165–170.
17. **Michel R., Arnal D., Coustols E.** Stability calculations and transition criteria on two and three-dimensional flows. In: Kozlov V. V. (ed.) Laminar-Turbulent Transition. IUTAM Symposium. Berlin, Springer-Verlag, 1985, p. 455–461.

18. **Arnal D., Juillen J. C., Reneaux J., Gasparian G.** Effect of wall suction on leading edge contamination. *Aerosp. Sci. Technol.*, 1997, vol. 8, p. 505–517.
19. **Forest A. E.** Engineering predictions of transitional boundary-layers: CP 224: AGARD, 1977.
20. **Evert F., Ronneberger D., Grosche F.-R.** Application of linear and nonlinear adaptive filters for the compensation of disturbances in the laminar boundary layer. *Z. Angew. Math. Mech.*, 2000, vol. 80, no. 1, p. 85–88.
21. **Abegg C., Bippes H., Boiko A., Krishnan V., Lerche T., Pothke A., Wu Y., Dallmann U.** Transitional flow physics and flow control for swept wings: Experiments on boundary-layer receptivity, instability excitation and HLF-technology. In: Proc. CEAS/DragNet European Drag Reduction Conf. Potsdam, 2000, p. 675–680.
22. **Abegg C., Bippes H., Janke E.** Stabilization of boundary-layer flows subject to crossflow instability with the aid of suction. In: Fasel H. F., Saric W. S. (eds.) *Laminar-Turbulent Transition*. IUTAM Symposium. Berlin, Springer-Verlag, 2000, p. 607–612.
23. **Abu-Ghanamm B. J., Shaw R.** Natural transition of boundary layers – the effects of turbulence, pressure gradient, and flow history. *J. Mech. Eng. Sci.*, 1980, vol. 22, p. 213–228.
24. **Kozlov V. V., Levchenko V. Ya., Scherbakov V. A.** Development of perturbations in the boundary layer during slit suction. *Scientist Zap. TSAGI*, 1978, vol. 9, no. 2, p. 99–105. (in Russ.)
25. **Boiko A. V., Kozlov V. V., Syzrantsev V. V., Scherbakov V. A.** Active control of secondary instability in a three-dimensional boundary layer. *Thermophysics and Aeromechanics*, 1999, vol. 6, no. 2, p. 181–192. (in Russ.)
26. **Litvinenko Yu. A., Kozlov V. V., Chernoray V. G., Grek G. R., Lefdal L. L.** Controlling the instability of the cross flow of a sliding wing using suction. *Thermophysics and Aeromechanics*, 2003, vol. 10, no. 4, p. 559–567. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию

Received
13.12.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Грек Генрих Рувимович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия)

Genrich R. Grek, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (4/1 Institutskaya Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

grek@itam.nsc.ru

Козлов Виктор Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия); профессор, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия)

Viktor V. Kozlov, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Professor, Principal Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (4/1 Institutskaya Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation); Professor, Novosibirsk State University (2 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

kozlov@itam.nsc.ru

Катасонов Михаил Михайлович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия)

Mikhail M. Katasonov, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (4/1 Institutskaya Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

mikhail@itam.nsc.ru

Корнилов Владимир Иванович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия)

Kornilov Vladimir Ivanovich, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Chief Scientist, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (4/1 Institutskaya Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

kornilov@itam.nsc.ru

Крюков Алексей Владимирович, кандидат технических наук, доцент, научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия)

Alexey V. Kryukov, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (4/1 Institutskaya Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

Садовский Иван Алексеевич, магистрант 2-го курса физического факультета, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия)

Ivan A. Sadovsky, 2nd year master's student, Novosibirsk State University (2 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

sadovski.ivan@yandex.ru

**Влияние переходных режимов
на нестационарные вихревые явления
в модели отсасывающей трубы гидротурбины**

Д. А. Суслов^{1,2}, И. В. Литвинов^{1,2}, С. И. Шторк¹, Е. Ю. Гореликов^{1,2}

¹ *Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН
Новосибирск, Россия*

² *Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия*

Аннотация

Изучается закрученный поток с формированием прецессирующего вихревого ядра (ПВЯ) в конусе модели отсасывающей трубы гидротурбины. Эксперименты проводились на аэродинамическом стенде как в стационарных, так и в переходных режимах работы гидротурбины. Условия работы гидротурбины варьировались с помощью непрерывного изменения расхода при неизменной частоте вращения ротора. Выявлено формирование в потоке ПВЯ и максимального уровня пульсаций давления в режиме, моделирующем режим частичной нагрузки гидротурбины. Определены границы возникновения эффекта ПВЯ при варьировании частоты вращения ротора и расхода воздуха. Обнаружено, что зависимость времени жизни ПВЯ в переходном режиме коррелирует с временем перехода. Показано, что профили скорости в переходных режимах меняются квазистатически между режимом работы с частичной загрузкой турбины и режимом наивысшего КПД турбины.

Ключевые слова

закрученный поток, прецессирующее вихревое ядро, отсасывающая труба, переходные режимы работы гидротурбины

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-08-01467

Для цитирования

Суслов Д. А., Литвинов И. В., Шторк С. И., Гореликов Е. Ю. Влияние переходных режимов на нестационарные вихревые явления в модели отсасывающей трубы гидротурбины // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 55–68. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-55-68

**The Influence of Transient Regimes on Unsteady Vortex Phenomena
in the Model of the Draft Tube of the Hydraulic Turbine**

D. A. Suslov^{1,2}, I. V. Litvinov^{1,2}, S. I. Shtork¹, E. U. Gorelikov^{1,2}

¹ *Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation*

² *Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation*

Abstract

This article is devoted to study the swirling flow with the formation of the precessing vortex core (PVC) in the cone of the model of the draft tube of the hydraulic turbine. The experiments were carried out on the aerodynamic set-up both in stationary and in transient regimes of operation of the hydraulic turbine. The hydraulic turbine operating conditions were varied by continuously changing the flow rate at a constant rotor speed. The formation of the PVC in the flow and the maximum level of pressure pulsations in the regime modeling the partial load regime of a turbine are revealed. The boundaries of the occurrence of the PVC effect are determined with varying rotor speed and air flow rate. It was found that the dependence of the PVC lifetime in transition regimes correlate with the transition time. It was

shown that the velocity profiles in transient conditions change quasistatically between the operation regime with partial loading of the turbine and the regime of the highest efficiency of the turbine.

Keywords

swirling flow, precessing vortex core, draft tube, transient regime of the hydraulic turbine

Acknowledgements

The study was funded by RFBR according to research project No. 18-08-01467 A.

For citation

Suslov D. A., Litvinov I. V., Shtork S. I., Gorelikov E. Yu. The Influence of Transient Regimes on Unsteady Vortex Phenomena in the Model of the Draft Tube of the Hydraulic Turbine. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 55–68. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-55-68

Введение

Актуальной проблемой гидроэнергетики является расширение диапазона стабильной и надежной эксплуатации ГЭС, в том числе на области нерасчетных режимов работы гидротурбин [1]. Систематические переходы через не рекомендованную зону работы турбины приводят к возникновению дополнительных нагрузок переменного характера. Например, образование и развитие усталостных повреждений узлов крепления гидроагрегата, крышки турбины вследствие дополнительных переменных нагрузок привели к аварии в 2009 г. на Саяно-Шушенской ГЭС¹.

При нерасчетных и неоптимальных режимах работы гидротурбины за рабочим колесом могут возникать опасные гидродинамические неустойчивости в виде распада вихря и прецессии вихревого ядра (ПВЯ) [2]. Эффект ПВЯ приводит к сильным периодическим пульсациям давления в аксиальном направлении вдоль столба воды из-за наличия поворотного колена в отсасывающей трубе ГЭС. Также частота вращения вихря может совпадать с собственными частотами составляющих частей конструкций ГЭС [3], вызывая резонанс. Резкое возрастание амплитуды вибраций может повредить гидроагрегат за счет накопления усталостных явлений, а также снижает КПД гидротурбины. Все это позволяет сделать вывод, что контроль и подавление ПВЯ, в том числе в условиях смены режимов, являются востребованными и актуальными задачами гидроэнергетики. Здесь следует отметить, что в литературе почти не содержатся данные о влиянии вихревых явлений на переходные режимы работы гидротурбины (старт и остановка турбины, регулирование мощности).

Теоретическое описание явления ПВЯ в отсасывающей трубе затруднено из-за сложной структуры течения, которое проходит через гидротурбину со сложной геометрической формой. В этой связи отмечается серия эффектов, связанных с формированием ПВЯ: развитая область возвратного течения [4], сильные пульсации давления на стенках трубы [5–7], генерируемые ПВЯ волны давления, идущие вдоль и поперек проточной части отсасывающей трубы [8], а также флуктуации мощности гидротурбины, возрастание уровня акустического шума и вибрации конструкции турбины [9]. Для адекватного математического моделирования данных явлений необходима детальная эмпирическая информация, которая может быть получена из лабораторного эксперимента. Поскольку наибольшее распространение имеют турбины Френсиса [1], которые используются при среднем и высоком напорах, то в рамках настоящей работы все эксперименты проводились на модели отсасывающей трубы Francis-99 [10; 11].

Как уже отмечалось, в неоптимальных и нерасчетных режимах течения с недогрузкой гидротурбины формируется ПВЯ, которое снижает эффективность работы гидротурбины и оказывает негативное влияние на коэффициент восстановления давления [12; 13]. Для моделирования условий генерации ПВЯ можно не воспроизводить весь тракт гидротурбины, включающий спиральную камеру, направляющий аппарат и рабочее колесо [14], а использо-

¹ Федеральная служба по экологическому техническому и атомному надзору. Акт технического расследования причин аварии, произошедшей 17 августа 2009 года в филиале открытого акционерного общества «Русгидро» – «Саяно-Шушенская ГЭС имени П. С. Непорожного», 2009.

вать упрощенную геометрию в виде пары последовательно расположенных завихрителей – покоящегося и вращающегося. Это позволяет воссоздать распределение скорости на входе в модель отсасывающей трубы, совпадающее с распределением скорости на входе в отсасывающую трубу натурной гидротурбины. Проведенные эксперименты по проверке этого подхода показали совпадение распределений скоростей в обоих случаях [14].

В [7] представлена упрощенная модель прецессии вихревого ядра. В статье [15] продемонстрированы физические основы формирования ПВЯ, базирующиеся на уравнениях Навье – Стокса, осредненных по Рейнольдсу (RANS). Работа [16] содержит измерения мгновенных полей давления, которые использовались для проведения верификации численного моделирования. В работе [17] исследуются распределения осредненных аксиальной и тангенциальной компонент скорости в упрощенной модели отсасывающей трубы в режимах с ПВЯ. Используется бесконтактный метод измерения скоростей в потоке: лазерный доплеровский анемометр (ЛДА). Наряду с этим в статье [17] дается сравнение экспериментальных результатов с численными расчетами, где показано, что упрощенное численное моделирование в двумерной постановке может адекватно воспроизводить распределение скоростей, хотя для анализа более сложных нестационарных эффектов его недостаточно. В работе [18] выполнялось изучение потока методом ЛДА и верификация численного расчета на основе полученных экспериментальных данных. Эксперименты проводились на натурной модели турбины Френсиса, где использовалось специальное рабочее колесо. Отмечено, что данная конфигурация колеса разрешает увеличить расход в центре конуса отсасывающей трубы, уменьшая область возвратного течения и препятствуя таким образом формированию ПВЯ.

Переходные режимы обусловлены регулировкой открытия направляющего аппарата при переводе гидротурбины из одного установившегося режима работы в другой или изменении полезной нагрузки на рабочем колесе. Большинство из них являются сильно нестационарными и связаны с резким изменением параметров течения и нагрузок на элементы гидротурбины во времени. Значительные изменения расхода приводят к динамическому изменению давления в проточном тракте, проявляющемуся в форме гидравлического удара. Переходные режимы могут реализовываться в областях с генерацией ПВЯ, поэтому представляет интерес задача о закономерностях формирования ПВЯ в различных переходных режимах.

Влияние переходных режимов на функционирование гидротурбин изучается экспериментально и моделируется численно. В работе [11] измерения нестационарного давления на модели турбины Френсиса были выполнены во время торможения турбины от точки наивысшей эффективности. Исследовался отличный от стандартного торможения способ, когда направляющие лопатки были полностью закрыты перед отключением генератора, чтобы избежать непредвиденного превышения скорости рабочего колеса, которое наблюдается при стандартном торможении гидротурбин. В этом случае анализ временных эволюций реализаций давления выявил более низкоамплитудные флуктуации давления по сравнению со стандартным отключением. В отсасывающей трубе амплитуда пульсаций давления имела те же величины, что и у рабочего колеса. Более низкая амплитуда колебаний давления у рабочего колеса указывает на то, что этот тип торможения может снизить усталость материала лопастей по сравнению с обычной схемой торможения.

Цель настоящей работы – идентифицировать режимы с возникновением ПВЯ в воздушной модели отсасывающей трубы гидротурбины Francis-99 в условиях стационарной нагрузки и выявить влияние переходных режимов на ПВЯ.

Достоверность полученных результатов обеспечена применением апробированных экспериментальных методик, подробным описанием условий проведения опытов, а также методов анализа и интерпретации полученных результатов. Так, ранее показано, что для измерения пульсаций давления в потоке можно использовать микрофоны с отборниками давления [19–23]. Также для получения достоверных результатов при моделировании переходных режимов каждый режим повторялся не менее 50 раз, после чего данные усреднялись.

Экспериментальная техника

Экспериментальная установка

Экспериментальное моделирование течения в отсасывающей трубе гидротурбины проводится с использованием воздуха в качестве рабочей среды [24]. Замена воды воздухом упрощает проблему герметизации соединений, а также позволяет оперативно изменять геометрию отсасывающей трубы, использовать для монтажа аэродинамического контура недорогие пластиковые трубы, которые способны выдерживать переменные нагрузки. Некоторые части установки созданы с помощью 3D-принтера, который позволяет быстро и точно воспроизводить геометрически сложные граничные условия в рабочем участке. Аэродинамический

стенд, на котором проводились эксперименты в рамках настоящей работы, позволяет изучать потоки с числами Рейнольдса от 3 500 до 35 000. Такой способ моделирования имеет также известные ограничения. В частности, на воздухе можно моделировать только докавитационные режимы течения, нельзя учесть гидроакустические эффекты, есть разница скоростей звука в воздухе и в воде. Невозможно рассмотреть влияние эффекта кавитации на вихревой жгут, однако это влияние вторично, поскольку вихревой жгут формируется и для докавитационных режимов течения.

В работах [3; 25] показано, что для изучения ПВЯ необязательно полностью повторять конструкцию всего тракта гидротурбины, что облегчает задачу моделирования потока. Задание распределения скорости, подобного распределению скорости за натурной турбиной, производится с использованием системы двух лопаточных решеток (рис. 1). Первая решетка стоит неподвижно (статор). Ее задача – имитировать спиральную камеру и направляющий аппарат гидротурбины. На нее равномерно подается поток с объемным расходом Q . Вторая решетка (ротор) вращается с частотой n и выполняет функцию рабочего колеса гидротурбины. Этих двух параметров достаточно [25], чтобы обеспечить распределение скорости, характерное для определенного режима работы турбины.

Подробное описание аэродинамического стенда, использованного в данных экспериментах, представлено в работе [3]. Для измерения скорости потока в локальных точках рабочего участка был использован ЛДА «ЛАД-06и»². Засев потока производится с помощью атомайзера, заполненного парафиновым маслом и подключенного к компрессору. Для модели отсасывающей трубы Francis-99 был изготовлен с помощью 3D-печати конус, в котором по всей длине проходит вырез шириной 3 см, закрытый прозрачным стеклом. По бокам конуса также предусмотрены два отверстия (P_1 и P_2), куда помещаются отборники микрофонов.

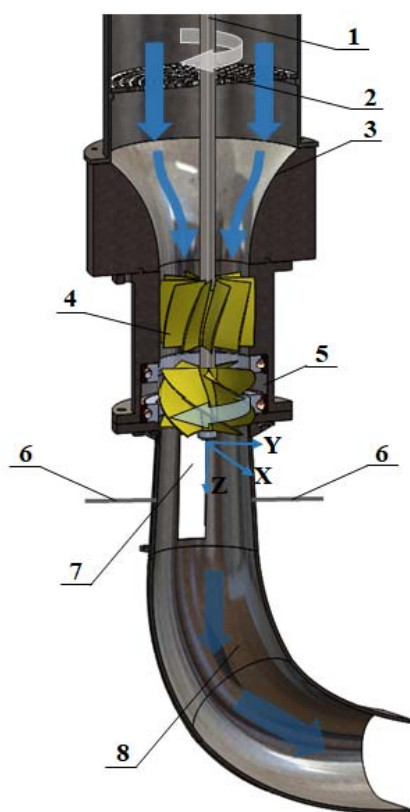


Рис. 1. Экспериментальная установка: 1 – вал; 2 – выравнивающая решетка; 3 – выпрямляющее сопло; 4 – покоящийся завихритель (статор); 5 – вращающийся завихритель (ротор); 6 – микрофоны; 7 – прозрачное измерительное окно; 8 – отсасывающая труба

Fig. 1. Experimental setup: 1 – shaft; 2 – leveling grid; 3 – profiled nozzle; 4 – guide vanes; 5 – runner; 6 – microphones; 7 – transparent measuring window; 8 – draft tube

² ОАО «Институт оптико-электронных информационных технологий». Лазерная доплеровская измерительная система (ЛДИС) для диагностики газожидкостных потоков ЛАД076 И, техническое описание и инструкция по эксплуатации, 2008. 126 с.

При помощи специальной программы задавался необходимый для измерений режим расхода и частоты вращения рабочего колеса. Кроме того, программа использовалась для изменения режимов и регистрации сигналов акустических датчиков. Программа позволяет проводить эксперименты как при постоянном, так и при переменном во времени расходе (переходные режимы). В переходных режимах выставляется нижняя частота на частотном преобразователе, который управляет двигателем воздуходувки [3], верхняя частота, частота вращения ротора (постоянна), число циклов перехода. Поскольку переходной процесс занимает порядка нескольких секунд, то было решено отказаться от ПИД (пропорционально-интегрально-дифференцирующего) регулирования расхода, поскольку установление расхода при выходе на стационарный режим занимает порядка нескольких минут, даже при оптимально подобранных коэффициентах ПИД-регулятора.

Постановка экспериментов с ЛДА

Измерения с помощью системы ЛДА проводились через прозрачное окно в конусе отсасывающей трубы. Точка пересечения лучей ЛДА (измерительный объем) с помощью координатно-перемещающего устройства передвигалась в радиальном направлении вдоль горизонтального сечения, находящегося на 55 мм ниже по потоку от тела обтекания.

Измерения скорости потока производились в следующем порядке. Запускался и переводился в автоматический режим частотный преобразователь, управляющий воздуходувкой. Запускался блок питания сервопривода, от которого вращается ротор, включался компрессор, подающий сжатый воздух в атомайзер. Давление на редукторе компрессора устанавливалось в пределах 2–3 атм., а расход воздуха – около 0,3 л/с. Эта величина выбрана таким образом, чтобы количество частиц парафинового масла, регистрируемое системой ЛДА, было достаточно для быстрого набора статистики, а вытяжная система справлялась с удалением аэрозоля из помещения. Компьютерная программа управления системой ЛДА записывает все данные в файлы, после чего эти данные обрабатывались в программах, написанных в среде Matlab.

Постановка экспериментов с акустическими датчиками

Для акустических измерений использовались микрофоны Behringer ECM 8000. В [3] представлено описание отборника для измерений пульсаций давления в локальной точке. Сигналы с микрофонов оцифровывались с помощью АЦП L-Card E-440 и были усилены с помощью предусилителей Tube Microgain M200. В программе управления стендом выставляются параметры: постоянный расход или переменный, частота вращения завихрителя и др. Программа параллельно записывала сигнал с АЦП. Затем файлы с записанными данными обрабатывались в программах, написанных в среде Matlab.

Анализ погрешностей

Основными источниками ошибок являются погрешность выставления расхода, частоты вращения сервопривода, точность измерения системой «ЛАД-06И», точность измерения Behringer ECM 8000.

Задание расхода контролировалось расходомером ИРВИС-РС4М-УЛЬТРА. В соответствии с его паспортом точность измерения расхода составляет не менее 1,5 %. Точность задания частоты вращения сервопривода составляет 0,5 %. Точность измерений микрофонами Behringer ECM 8000 составляет порядка 1 %. Система ЛАД-06И измеряет скорость отдельно взятой пролетающей частицы с точностью 0,2 %, что следует из паспорта прибора. Для каждого измерения набиралась статистика в локальной точке пространства не менее 12 500 вспышек, что позволяет определять скорость потока в данной точке с доверительным интер-

валом 99,7 %, поскольку для каждой компоненты скорости усреднение идет более чем по 6 000 измерениям.

Результаты

Стационарные режимы: карта пульсаций давления

Перед изучением пульсаций давления в переходном режиме пульсации давления сначала рассматривались в стационарных режимах. Это необходимо для того, чтобы можно было выбрать наиболее интересный переходный режим и в будущем рассмотреть только этот режим. В стационарных режимах расход менялся от нуля до 73,5 л/с, а частота вращения завихрителя от 1 200 до 2 900 об./мин. С помощью системы двух акустических датчиков, стоящих друг напротив друга, получен разностный сигнал. Такой сигнал позволяет устранить синфазные внешние помехи. Далее выполняется преобразование Фурье для разностного сигнала. Таким образом была построена карта пульсаций давления, содержащая примерно 1 000 точек (рис. 2). В каждой точке скорость воздушного потока и скорость вращения завихрителя поддерживались постоянными. Амплитуда ПВЯ, найденная как амплитуда гармоники с частотой ПВЯ, растет с ростом частоты вращения завихрителя, а с ростом расхода увеличивается ширина области.

Оптимальный режим достигается в точке наивысшего КПД турбины (ВЕР) при частоте вращения $n_c = 2432$ об./мин = 40,5 Гц и расходе $Q_c = 49$ л/с. В этом режиме закрутка потока за вращающимся завихрителем минимальна, а профиль аксиальной компоненты скорости близок к ударному. Введем приведенную частоту вращения n/n_c и приведенный расход Q/Q_c . Все результаты, представленные ниже, будем описывать в этих терминах.

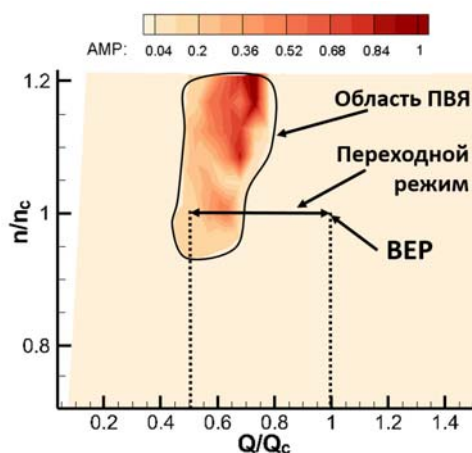


Рис. 2. Карта пульсаций давления для стационарных режимов (в отн. ед.)

Fig. 2. Pressure pulsation map for stationary regimes (in a.u.)

Переходные режимы

Эксперименты с акустическими датчиками

На основании полученной карты пульсаций давления (см. рис. 2) для детального исследования был выбран переход от точки с частичной загрузкой турбины ($Q/Q_c = 0,51$) к точке с наибольшим КПД турбины ($Q/Q_c = 1$) и обратно. В точке частичной загрузки турбины с $Q/Q_c = 0,51$, как мы видим на карте, происходит образование ПВЯ. В точке с наивысшей эффективностью ПВЯ не исчезает. Пример процесса перехода показан на рис. 3, а. Во время экспериментов были установлены разные значения

времени стационарных участков, а также ускорения и замедления (изменения расхода). Каждый цикл повторяли 50 раз, после чего полученные данные усредняли по всем циклам.

Поскольку мы имеем дело с нестационарным сигналом, было решено использовать вейвлет-преобразование. Преобразование Фурье дает только суммарный вклад гармоник на всем промежутке времени, а с помощью вейвлет-преобразования, можно локализовать их во времени. В данной работе выбор остановлен на вейвлете «мексиканская шляпа»:

$$\psi(t) = (1 - t^2) e^{-t^2/2}.$$

Операция вейвлет-преобразования позволяет отчетливо увидеть начало и окончание процесса формирования ПВЯ, а также определить частоту и амплитуду пульсаций давления. При-

мер спектрограммы, полученной с помощью акустических датчиков в переходном режиме, показан на рис. 3, в.

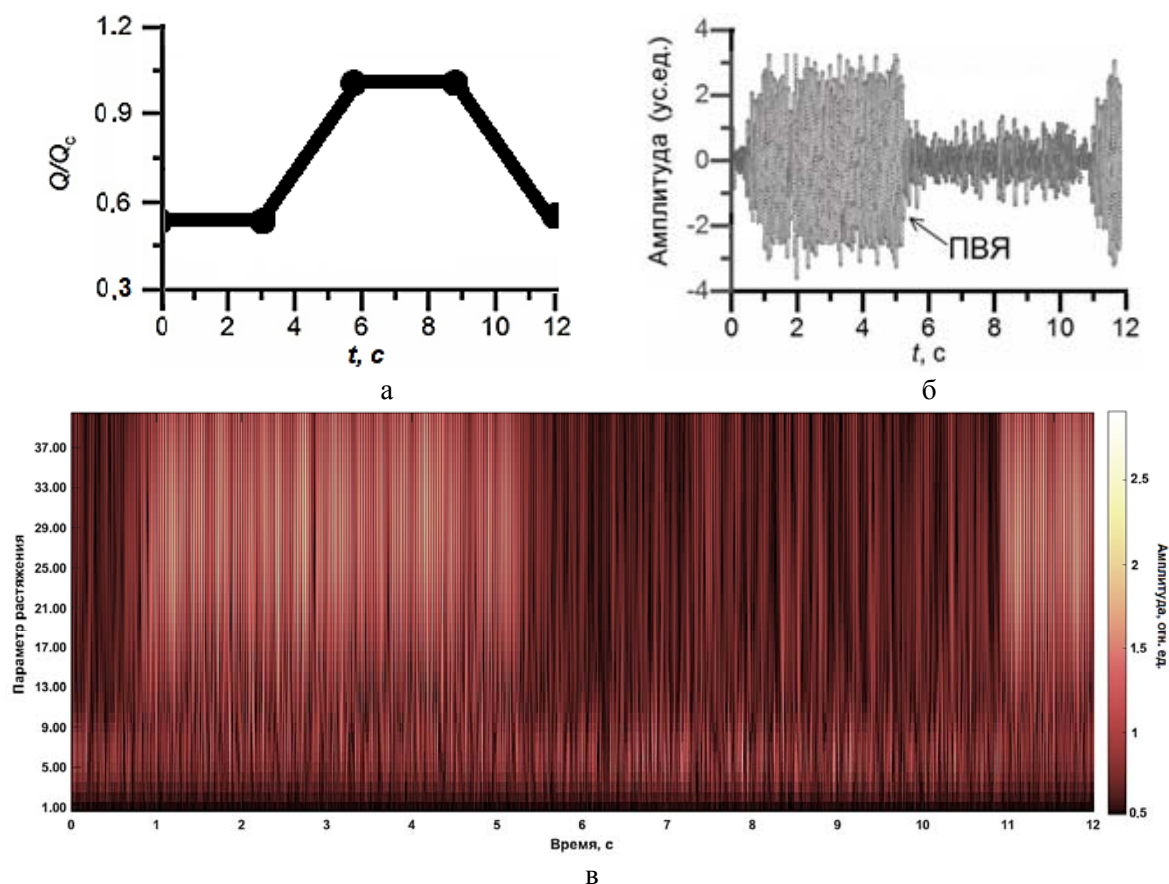


Рис. 3. Данные измерений в переходных режимах: а – график зависимости расхода от времени для одного цикла; б – график зависимости амплитуды сигнала при заданном параметре растяжения от времени; в – типичная вейвлет-диаграмма для переходного процесса от расхода $Q/Q_c = 0,51$ до $Q/Q_c = 1$ и обратно с постоянной скоростью вращения завихрителя (показана часть полной вейвлет-диаграммы общей продолжительностью 10 мин)

Fig. 3. Measurement data in transient regime: а – graph of the flow rate versus time for one cycle; б – graph of the signal amplitude at a given stretching parameter versus time; в – typical wavelet diagram for a transient process from a flow rate of $Q/Q_c = 0.51$ to $Q/Q_c = 1$ and vice versa with a constant swirl speed (a part of the complete wavelet diagram with a total duration of 10 minutes is shown)

Всего было исследовано порядка 50 различных переходных режимов с разными значениями времени перехода и времени стационарного состояния. Для каждого режима вейвлет-преобразование выполнялось для разностного сигнала от двух микрофонов. В результате вейвлет-преобразования сигнала были получены двумерные массивы, каждый из которых содержит 40 строк и приблизительно 500 тысяч столбцов. Строка (параметр масштаба) имеет смысл величины, обратной частоте сигнала. Для каждого массива искалась строка с максимальной суммой абсолютных значений амплитуд разностного сигнала, полученного от микрофонов (рис. 3, б). Иными словами, проводился поиск частоты, на которой амплитуда пульсаций максимальна. Предполагалось, что эта частота соответствует частоте ПВЯ.

Для найденной строки строилась функция плотности вероятности нахождения той или иной величины амплитуды в этой строке. Примеры функций плотности вероятности показаны на рис. 4. Полагается, что ПВЯ отсутствует, если функция имеет один четко определен-

ный пик, как на рис. 4, а. Этот пик соответствует вероятности нахождения собственных частот установки. Если функция плотности вероятности имеет два четко определяемых пика, как на рис. 4, б, то ПВЯ присутствует. Первый пик соответствует собственным частотам установки, второй – ПВЯ.

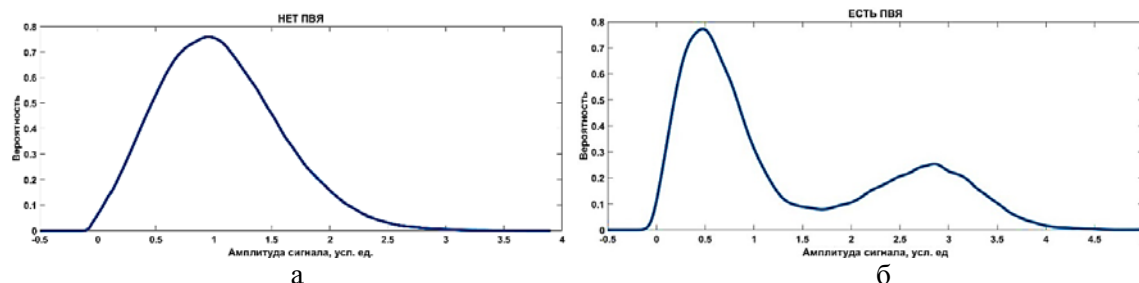


Рис. 4. Функция плотности вероятности: а – при отсутствии ПВЯ; б – при наличии ПВЯ
Fig. 4. The probability density function: а – at the absence of PVC; б – at the presence of PVC

Время жизни ПВЯ определяется как длина протяженности во времени участка с пульсациями, которые превышают фоновые (см. рис. 3, б). Для каждого режима подсчитываются эти значения времени, затем усредняются по 50 повторениям одного и того же цикла. На рис. 5 приведены графики зависимости времени жизни ПВЯ от времени перехода и времени стационарного режима. Показано, что зависимость времени жизни ПВЯ в переходном режиме прямо пропорциональна времени перехода от одного стационарного состояния к другому.

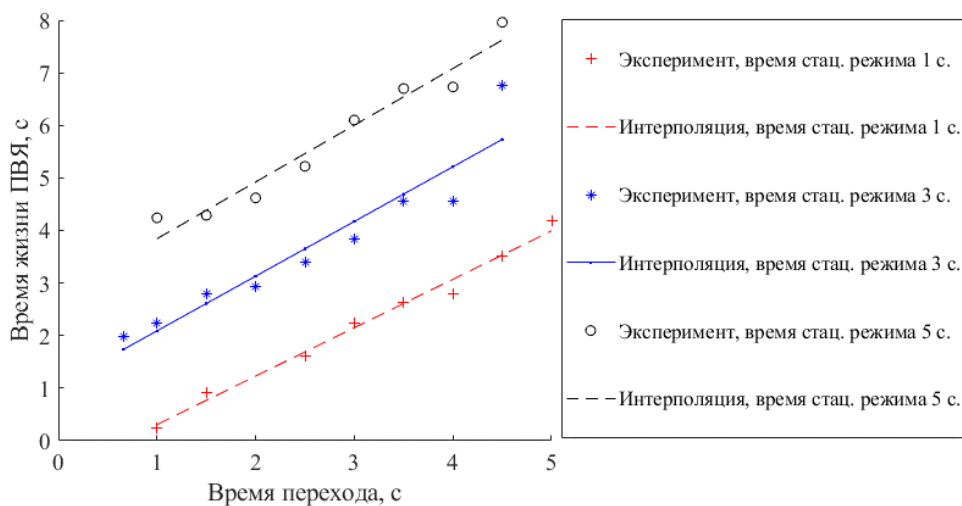


Рис. 5. Графики зависимости времени жизни ПВЯ от времени перехода. Время стационарного режима t составляет 1, 3 и 5 секунд соответственно. Штриховые линии проведены методом наименьших квадратов для каждого времени стационарных режимов

Fig. 5. Time dependence of PVC lifetime for different transition times ($t = 1, 3$ and 5 s, respectively). The dashed lines are drawn by the least squares method for each time of stationary regimes

Эксперименты с ЛДА

В переходных режимах был проведен анализ профилей двух компонент скоростей. Из данного анализа можно определить моменты появления и исчезновения ПВЯ. Также можно заключить, при каких условиях переходной режим – это последовательность стационарных режимов.

На полученной карте пульсаций давления (см. рис. 2) можно видеть, что ПВЯ существует при $Q/Q_c = 0,51$. Для анализа профилей скорости в эксперименте изучался переходной режим от $Q/Q_c = 0,51$ до $Q/Q_c = 1$ и обратно. Такой режим соответствует переходу от сильной недогрузки турбины до точки наивысшей эффективности.

Профили скоростей в данном переходном режиме измерялись на расстоянии 55 мм от вращающегося завихрителя с шагом 2 мм от ближней к ЛДА стенки до оси конуса. В каждой точке переходной режим повторялся не менее 25 раз. Компьютерная программа выделяет из массива данных значения аксиальной и тангенциальной скоростей с шагом по расходу в $Q/Q_c = 0,002$. Далее проводится усреднение скоростей по циклам в каждой точке и строится профиль аксиальной и тангенциальной скоростей. Для каждой фазы и одной точки пространства приходилось не менее 200 измерений каждой компоненты скорости, а затем проводилось усреднение по компонентам скорости в данной фазе для данной пространственной точки.

На рис. 6 показаны профили тангенциальной и аксиальной скорости для различных фаз в единицах фазового угла, с учетом полного перехода в 360° . Сначала наблюдается обширная зона рециркуляции, затем она начинает вырождаться, и профили скорости приближаются к виду, характерному для режима с наивысшей эффективностью турбины. Интенсивность закрутки при увеличении фазы уменьшается, как видно из профилей тангенциальной скорости. Сравнивая полученные профили с аналогичными профилями для стационарных режимов [3] и наблюдая их схожесть, можно заключить, что профили скорости в переходных режимах меняются квазистатически, т. е. представляют собой последовательность стационарных режимов.

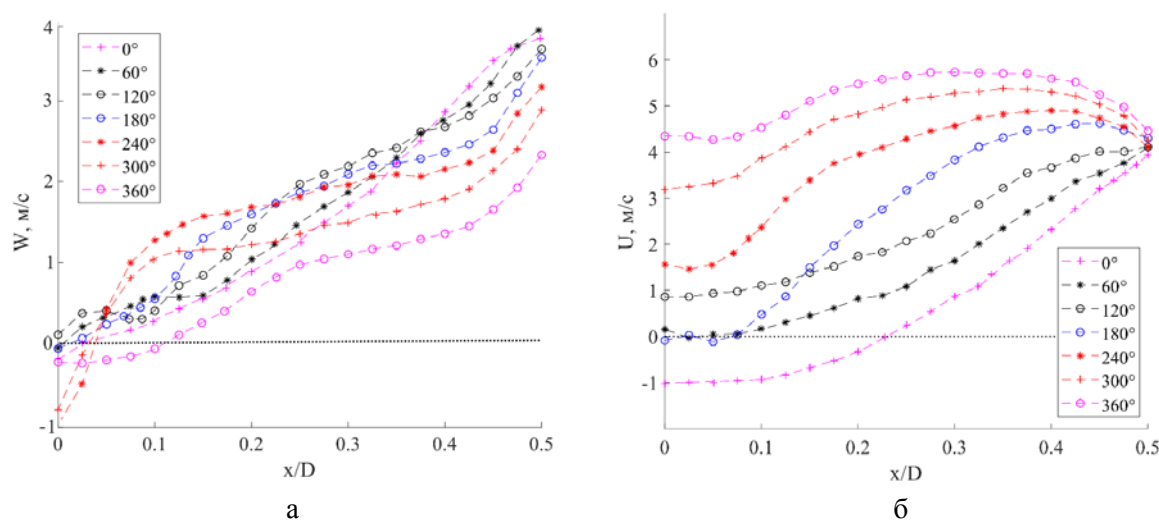


Рис. 6. Профили тангенциальной (а) и аксиальной (б) скорости для переходного режима
Fig. 6. Tangential (a) and axial (b) velocity profiles in the transient regime

Заключение

В ходе работы были изучены режимы с возникновением ПВЯ в воздушной модели отсасывающей трубы гидротурбины Francis 99 в условиях стационарных режимов, а также в переходных режимах между условиями частичной нагрузки и точки с наивысшим КПД гидротурбины.

Для стационарных режимов построена карта пульсаций давления с помощью акустических датчиков. При помощи карты найдены значения частоты вращения завихрителя и расхода, при которых возникает ПВЯ. На основе данных, представленных параметрическими зависимостями, были выбраны начальные и конечные параметры переходного процесса. Рассмотрен переход от частичной загрузки турбины ($Q/Q_c = 0,51$) до точки наивысшей эффективности турбины ($Q/Q_c = 1$) и обратно.

Используя непрерывное вейвлет-преобразование, найдены характерные значения времени образования ПВЯ и установления режима течения при изменении управляющих параметров работы установки. Для анализа измеренных сигналов акустических датчиков и ЛДА проведено условное осреднение реализаций, полученных при многократном повторении переходных режимов. Было установлено, что время жизни ПВЯ в переходном режиме прямо пропорционально времени разгона / торможения. С помощью условного осреднения показано, что профили скорости в переходных режимах меняются квазистатически, т. е. представляют собой последовательность стационарных режимов между режимом работы с частичной загрузкой турбины и режимом наивысшего КПД турбины.

Список литературы

1. **Губин М. Ф.** Отсасывающие трубы гидроэлектростанций: Учебник для вузов. М.: Энергия, 1970.
2. **Куйбин П. А., Литвинов И. В., Сонин В. И., Устименко А. С., Шторк С. И.** Моделирование условий закрученного потока на входе в отсасывающую трубу для различных режимов работы гидротурбины // Сибирский физический журнал. 2016. Т. 11, № 1. С. 56–65.
3. **Litvinov I., Shtork S., Gorelikov E., Mitryakov A., Hanjalic K.** Unsteady regimes and pressure pulsations in draft tube of a model hydro turbine in a range of off-design conditions. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2018, vol. 91, p. 410–422.
4. **Алексеев С. В., Куйбин П. А., Окулов В. Л.** Введение в теорию концентрированных вихрей / Ин-т теплофизики СО РАН. Новосибирск, 2003.
5. **Arpe J., Avellan F.** Pressure wall measurements in the whole draft tube: steady and unsteady analysis. In: Proc. of the 21st IAHR symposium on hydraulic machinery and systems. Lausanne, Switzerland, 2002, vol. 1, p. 593–602.
6. **Casanova García F., Mantilla Viveros C. A.** Experimental analysis of the vibration on the draft tube of a Francis hydraulic turbine during operation at different power levels. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 2010, vol. 55, p. 90–98.
7. **Cervantes M., Lövgren M.** Radial velocity at the inlet of the Turbine-99 draft tube. In: IAHR International Meeting of the Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems. October 24–26, 2007, p. 137–144.
8. **Сентябов А. В.** Численное исследование гидродинамических пульсаций в отсасывающей трубе гидротурбины, вызванных прецессирующим вихревым жгутом // Тез. Всерос. конф. «XXXI Сибирский теплофизический семинар». Новосибирск, 2014. С. 48.
9. **Wahl T.** Draft Tube Surging Times Two: The Twin Vortex Phenomenon. *Hydro Review*, 1994, vol. 13 (1), p. 60–69.

10. **Cervantes M. J., Trivedi C., Dahlhaug O. G., Nielsen T.** Francis-99 Workshop 1: steady operation of Francis turbines. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2015, vol. 579, no. 1, p. 011001.
11. **Trivedi C., Bhupendra K., Gandhia M., Cervantes J., Dahlhaug O.** Experimental investigations of a model Francis turbine during shutdown at synchronous speed. *Renewable Energy*, 2015, vol. 83, p. 828–836.
12. **Mulu B. G., Jonsson P. P., Cervantes M. J.** Experimental investigation of a Kaplan draft tube. Part I: Best efficiency point. *Applied Energy*, 2012, vol. 93, p. 695–706.
13. **Fanelli M.** On the precession rate of the vortex rope in francis turbines operating at partial loads. In: 10th International Meeting of the work group on the behaviour of hydraulic machinery under steady oscillatory conditions, 2001.
14. **Susan-Resiga R., Muntean S., Bosioc A.** Hydrodynamic Design and Analysis of a Swirling Flow Generator. In: 4th German-Romanian Workshop on Turbomachinery Hydrodynamics, 2008.
15. **Zhang R.-K., Cai Q.-D., Wu J.-Z., Wu Y.-L., Liu S.-H., Zhang L.** The Physical Origin of Severe Low-Frequency Pressure Fluctuations in Giant Francis Turbines. *Modern Physics Letters B*, 2005, vol. 19 (28n29), p. 1527–1530.
16. **Lövgren M.** Time Dependent Pressure Phenomena in Hydropower Applications. Doctoral dissertation. Luleå tekniska universitet, 2006.
17. **Bosioc A., Tanasa C., Muntean-S., Susan-Resiga-R. F.** 2D LDV measurements and comparison with axisymmetric flow analysis of swirling flow in a simplified draft tube. In: Proceedings of the 3rd IAHR International Meeting of Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems. Brno, Czech Republic, 2009, p. 551–560.
18. **Bergan C. W.** Transient LDV-measurements in the draft tube of a high head Francis turbine. Norwegian University of Science and Technology, 2014, 46 p.
19. **Moisy F., Petitjeans P.** Pressure measurements in a stretched vortex. *Vortex Structure and Dynamics*, 2000, p. 252–262.
20. **Fernandes E. C., Heitor M. V., Shtork S. I.** An analysis of unsteady highly turbulent swirling flow in a model vortex combustor. *Experiments in Fluids*, 2006, p. 177–187.
21. **Shtork S. I., Vieira N. F., Fernandes E. C.** On the identification of helical instabilities in a reacting swirling flow. *Fuel*, 2007, vol. 87 (10–11), p. 2314–2321.
22. **Cala C. E., Fernandes E. C., Heitor M. V., Shtork S. I.** Coherent structures in unsteady swirling jet flow. *Experiments in Fluids*, 2006, vol. 40 (2), p. 267–276.
23. **Bergh H., Tijdeman H.** Theoretical and experimental results for the dynamic response of pressure measuring systems. National Aero and Aeronautical Research Institute, 1965.
24. **Nishi M., Yoshida K., Yano M., Okamoru M., Miyagawa K., Liu S.** A preliminary Study on the swirling flow in a conical diffuser with jet issued at the center of the inlet. In: Proceedings of the 2nd IAHR International Meeting of the Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems. Timisoara, Romania, 2007, p. 197–202.
25. **Sonin V. I., Ustimenko A. S., Kuibin P. A., Litvinov I. V., Shtork S. I.** Study of the velocity distribution influence upon the pressure pulsations in draft tube model of hydro-turbine. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 2016, vol. 49 (8), p. 82020.

References

1. **Gubin M. F.** Draft tubes of hydro-electric stations, Moscow, Energiya Press, 1970. (in Russ.)
2. **Kuibin P., Litvinov I., Sonin V., Ustimenko A., Shtork S.** Modelling inlet flow in draft tube for different regimes of hydroturbine operation. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 11, no. 1, p. 56–65. (in Russ.)

3. **Litvinov I., Shtork S., Gorelikov E., Mitryakov A., Hanjalic K.** Unsteady regimes and pressure pulsations in draft tube of a model hydro turbine in a range of off-design conditions. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2018, vol. 91, p. 410–422.
4. **Alekseenko S. V., Kuibin P. A., Okulov V. L.** Theory of concentrated vortices: an introduction. Springer Science & Business Media, 2007.
5. **Arpe J., Avellan F.** Pressure wall measurements in the whole draft tube: steady and unsteady analysis. In: Proc. of the 21st IAHR symposium on hydraulic machinery and systems. Lausanne, Switzerland, 2002, vol. 1, p. 593–602.
6. **Casanova García F., Mantilla Viveros C. A.** Experimental analysis of the vibration on the draft tube of a Francis hydraulic turbine during operation at different power levels. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 2010, vol. 55, p. 90–98.
7. **Cervantes M., Lövgren M.** Radial velocity at the inlet of the Turbine-99 draft tube. In: IAHR International Meeting of the Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems. October 24–26, 2007, p. 137–144.
8. Sentyabov A. Numerical study of hydrodynamic pulsations in a suction pipe of a turbine caused by a precessing vortex bundle. In: Theses of the All-Russian Conference “XXXI Siberian Thermophysical Seminar”. Novosibirsk, 2014, p. 48. (in Russ.)
9. **Wahl T.** Draft Tube Surging Times Two: The Twin Vortex Phenomenon. *Hydro Review*, 1994, vol. 8 (1), p. 60–69.
10. **Cervantes M. J., Trivedi C., Dahlhaug O. G., Nielsen T.** Francis-99 Workshop 1: steady operation of Francis turbines. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2015, vol. 579, no. 1, p. 011001.
11. **Trivedi C., Bhupendra K., Gandhia M., Cervantes J., Dahlhaug O.** Experimental investigations of a model Francis turbine during shutdown at synchronous speed. *Renewable Energy*, 2015, vol. 83, p. 828–836.
12. **Mulu B. G., Jonsson P. P., Cervantes M. J.** Experimental investigation of a Kaplan draft tube. Part I: Best efficiency point. *Applied Energy*, 2012, vol. 93, p. 695–706.
13. **Fanelli M.** On the precession rate of the vortex rope in francis turbines operating at partial loads. In: 10th International Meeting of the work group on the behaviour of hydraulic machinery under steady oscillatory conditions, 2001.
14. **Susan-Resiga R., Muntean S., Bosioc A.** Hydrodynamic Design and Analysis of a Swirling Flow Generator. In: 4th German-Romanian Workshop on Turbomachinery Hydrodynamics, 2008.
15. **Zhang R.-K., Cai Q.-D., Wu J.-Z., Wu Y.-L., Liu S.-H., Zhang L.** The Physical Origin of Severe Low-Frequency Pressure Fluctuations in Giant Francis Turbines. *Modern Physics Letters B*, 2005, vol. 19 (28n29), p. 1527–1530.
16. **Lövgren M.** Time Dependent Pressure Phenomena in Hydropower Applications. Doctoral dissertation. Luleå tekniska universitet, 2006.
17. **Bosioc A., Tanasa C., Muntean-S., Susan-Resiga-R. F.** 2D LDV measurements and comparison with axisymmetric flow analysis of swirling flow in a simplified draft tube. In: Proceedings of the 3rd IAHR International Meeting of Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems. Brno, Czech Republic, 2009, p. 551–560.
18. **Bergan C. W.** Transient LDV-measurements in the draft tube of a high head Francis turbine. Norwegian University of Science and Technology, 2014, 46 p.
19. **Moisy F., Petitjeans P.** Pressure measurements in a stretched vortex. *Vortex Structure and Dynamics*, 2000, p. 252–262.
20. **Fernandes E. C., Heitor M. V., Shtork S. I.** An analysis of unsteady highly turbulent swirling flow in a model vortex combustor. *Experiments in Fluids*, 2006, p. 177–187.
21. **Shtork S. I., Vieira N. F., Fernandes E. C.** On the identification of helical instabilities in a reacting swirling flow. *Fuel*, 2007, vol. 87 (10–11), p. 2314–2321.

22. **Cala C. E., Fernandes E. C., Heitor M. V., Shtork S. I.** Coherent structures in unsteady swirling jet flow. *Experiments in Fluids*, 2006, vol. 40 (2), p. 267–276.
23. **Bergh H., Tijdeman H.** Theoretical and experimental results for the dynamic response of pressure measuring systems. National Aero and Aeronautical Research Institute, 1965.
24. **Nishi M., Yoshida K., Yano M., Okamoru M., Miyagawa K., Liu S.** A preliminary Study on the swirling flow in a conical diffuser with jet issued at the center of the inlet. In: *Proceedings of the 2nd IAHR International Meeting of the Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems*. Timisoara, Romania, 2007, p. 197–202.
25. **Sonin V. I., Ustimenko A. S., Kuibin P. A., Litvinov I. V., Shtork S. I.** Study of the velocity distribution influence upon the pressure pulsations in draft tube model of hydro-turbine. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 2016, vol. 49 (8), p. 82020.

Материал поступил в редакцию

Received
26.11.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Суслов Даниил Андреевич, студент, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 1, Новосибирск, 630090, Россия); инженер, Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия)

Daniil A. Suslov, student, Novosibirsk State University (1 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation), Engineer, Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS (1 Academician Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

d.suslov@g.nsu.ru

Литвинов Иван Викторович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия); старший преподаватель, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 1, Новосибирск, 630090, Россия)

Ivan V. Litvinov, Candidate of Science (Physics and Mathematics), Researcher, Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS (1 Academician Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation); senior lecturer, Novosibirsk State University (1 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

litvinov@itp.nsc.ru

ScopusID 55625102000

ResearcherID A-7914-2014

ORCID 0000-0001-9026-2730

Шторк Сергей Иванович, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией 7.1, Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия);

Sergey I. Shtork, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory 7.1, Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS (1 Academician Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

shtork@itp.nsc.ru

ResearcherID N-2634-2013

ORCID 0000-0002-9198-3705

Гореликов Евгений Юрьевич, ассистент, Новосибирский государственный университет (ул. Пирогова, 1, Новосибирск, 630090, Россия), аспирант, инженер-исследователь, Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия)

Evgeny Yu. Gorelikov, assistant, Novosibirsk State University (1 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation), post-graduate student, Research Engineer, Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS (1 Academician Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

e.gorelikov@g.nsu.ru

УДК 621.43.019

DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-28-69-73

**Влияние интенсивности турбулентности на ширину зоны
химических реакций и скорость распространения
метановодородного пламени**

А. П. Шайкин, И. Р. Галиев

*Тольяттинский государственный университет
Тольятти, Россия*

Аннотация

Показана перспективность использования метановодородного топлива в энергетических установках. Исследовано влияние интенсивности турбулентности на скорость распространения и ширину зоны химических реакций метановодородного пламени в камере сгорания переменного объема. В статье показано, что влияние интенсивности турбулентности на скорость распространения и ширину пламени зависит от коэффициента избытка топлива. При сжигании стехиометрических топливовоздушных смесей увеличение турбулентности приводит к более заметному росту скорости пламени, чем при сжигании бедных и богатых смесей. В свою очередь, экспериментально выявлено, что увеличение интенсивности турбулентности приводит к заметному изменению ширины пламени только при сжигании бедных и богатых топливовоздушных смесей. Обработка результатов зарубежных и отечественных ученых показала справедливость полученных нами закономерностей для камер сгораний разных конструкций, использующих разное углеводородное топливо. Результаты работы могут быть использованы при проектировании и доводке энергоэффективных и малоэмиссионных камер сгораний.

Ключевые слова

пламя, скорость распространения пламени, ширина зоны химических реакций, интенсивность турбулентности, водород, hythane, камера сгорания

Источник финансирования

Статья публикуется при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках программы назначения стипендии Президента РФ для молодых ученых СП-3204.2018.1

Для цитирования

Шайкин А. П., Галиев И. Р. Влияние интенсивности турбулентности на ширину зоны химических реакций и скорость распространения метановодородного пламени // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 69–73. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-69-73

**Influence Intensity Turbulence on the Width
of the Zone Chemical Reactions and Speed Distribution
of Methane-Hydrogen Flame**

A. P. Shaykin, I. R. Galiev

*Tolyatti State University
Tolyatti, Russian Federation*

Abstract

The prospects using methane-hydrogen fuel in power plants are shown. The effect of turbulence intensity on propagation velocity and width of the zone of chemical reactions methane-hydrogen flame in combustion chamber of variable volume is investigated. The article shows that effect of turbulence intensity on propagation velocity and flame width depends on fuel excess coefficient. During combustion of stoichiometric fuel-air mixtures, an increase in turbulence leads to a more noticeable increase in flame velocity than when burning poor and rich mixtures. It was experimentally

found that increase in intensity of turbulence leads to a noticeable change in width of the flame only when burning poor and rich fuel-air mixtures. Processing of the results of foreign and domestic scientists has shown validity of our laws for combustion chambers of different designs using different hydrocarbon fuels. The results of the work can be used in design and debugging of energy-efficient and low-emission combustion chambers.

Keywords

flame propagation velocity, width of chemical reaction zone, intensity of turbulence, hydrogen, hythane, combustion chamber, flame

Funding

The article is published with the support of the Ministry of science and higher education of the Russian Federation as part of the Russian President's scholarship program for young scientists SP-3204.2018.1

For citation

Shaykin A. P., Galiev I. R. Influence Intensity Turbulence on the Width of the Zone Chemical Reactions and Speed Distribution of Methane-Hydrogen Flame. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 69–73. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-69-73

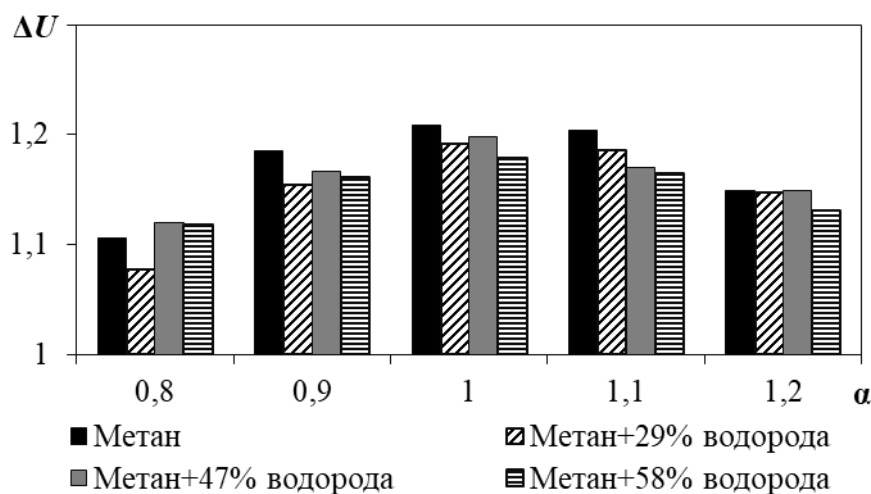
В последние два десятилетия ученые и инженеры ведущих стран мира (США, Англия, Россия, Китай) уделяют большое внимание новому топливу hythane – смеси метана с водородом [1]. В ПАО «Газпром» создана экспериментальная установка для получения в промышленных масштабах hythane с содержанием водорода до 48 % [2]. Интерес промышленности и науки к hythane обусловлен тем, что использование hythane способствует значительному снижению токсичности выхлопа энергоустановки и повышению ее тягово-динамических показателей [1; 3]. Для создания новых малоэмиссионных и энергоэффективных камер сгорания (КС), использующих hythane, необходимо глубокое изучение процесса сгорания комбинированного топлива. В настоящее время остается малоизученным влияние интенсивности турбулентности на скорость распространения и ширину зоны химических реакций метано-водородного пламени в условиях КС переменного объема. Результаты исследования позволяют сократить время и средства при создании новых энергетических установок, использующих hythane и соответствующих современным требованиям по мощности, экономичности и токсичности отработавших газов.

Цель работы – изучить влияние интенсивности турбулентности на скорость распространения и ширину зоны химических реакций метано-водородного пламени в камере сгорания переменного объема.

Эксперименты проводились в КС переменного объема с искровым зажиганием [4]. В качестве топлива использовался hythane с содержанием водорода $r_H = 29, 47$ и 58 % (по объему). Изменение интенсивности турбулентности осуществлялось изменением частоты вращения коленчатого вала энергоустановки с 600 до 900 мин^{-1} . Скорость распространения и ширина пламени исследовались во второй (основной) фазе, в которой происходит сгорание основной массы горючей смеси вследствие развития турбулентного фронта пламени на больший объем КС.

В результате анализа экспериментальных данных выявлено, что увеличение интенсивности турбулентности в $1,5$ раза приводит к росту скорости пламени. Особенно ярко данная тенденция проявляется при сжигании топливовоздушной смеси с коэффициентом избытка воздуха от $0,9$ до $1,1$, так как в данном случае горение в КС описывается моделью микроламинарного пламени, т. е. число Карловица меньше единицы, а число Дамкелера больше единицы. Турбулентные вихри не проникают в зону химических реакций пламени, а только меняют ее конфигурацию, поэтому увеличение интенсивности турбулентности приводит к увеличению площади поверхности фронта пламени и, как следствие, к росту скорости распространения пламени. На рисунке (см. далее) видно, что при сжигании бедных и богатых смесей увеличение скорости пламени за счет роста интенсивности турбулентности уменьшается. Это связано с тем, что при сжигании бедных смесей ($\alpha > 1,1$) ширина ламинарного пламени увеличивается, турбулентные вихри проникают в зону химических реакций пламени и влияют на кинетику химических реакций, т. е. числа Карловица и Дамкелера больше еди-

ницы. Турбулентность потока приводит к разрыву зоны химических реакций и снижению скорости распространения пламени.



Изменение скорости распространения пламени
при увеличении интенсивности турбулентности в 1,5 раза
Change rate of flame propagation
with an increase intensity of turbulence by 1.5 times

Отметим, что схожие результаты были получены при анализе данных голландских ученых [5], изучавших влияние частоты вращения коленчатого вала поршневой энергоустановки на скорость распространения пламени в КС переменного объема. А также в работе [6], в которой экспериментально показано влияние пульсационной скорости на скорость распространения пламени в разные моменты сгорания топлива в КС постоянного объема.

Исследование влияния интенсивности турбулентности на ширину зоны химических реакций пламени показало, что при коэффициентах избытка воздуха от 0,9 до 1,1 увеличение интенсивности турбулентности в 1,5 раза не приводит к заметному изменению ширины пламени. Так, изменение δ при $\alpha = 1$ составило всего 2 %. При $\alpha = 1,2$ рост интенсивности турбулентности привел к увеличению ширины пламени уже на 8 %, а при $\alpha = 0,8$ ширина пламени увеличилась на 7 %. Это объясняется тем, что при сжигании бедных и богатых смесей ширина ламинарного пламени увеличивается, турбулентные вихри проникают в зону химических реакций пламени и влияют на кинетику химических реакций, т. е. числа Карловица и Дамкелера больше единицы. Турбулентность потока приводит к разрыву и растяжению зоны химических реакций пламени, поэтому δ увеличивается. Отметим, что обработка экспериментальных данных, полученных на бензопоршневой энергоустановке [7], выявила схожее поведение ширины пламени при увеличении интенсивности турбулентности. В частности, при $\alpha = 1$ ширина пламени увеличилась на 4 %, а при $\alpha = 1,2$ прирост δ составил 9 %.

Заключение

1. Влияние интенсивности турбулентности на скорость распространения пламени зависит от коэффициента избытка топлива (при α от 0,9 до 1,1 увеличение турбулентности приводит к более заметному росту скорости пламени, чем при $\alpha > 1,1$ и $\alpha < 0,9$) и не зависит от концентрации водорода в топливе.

2. Исследование влияния интенсивности турбулентности на ширину зоны химических реакций пламени показало, что при α от 0,9 до 1,1 увеличение интенсивности турбулентности

в 1,5 раза не приводит к заметному изменению ширины пламени. При сжигании бедных и богатых топливовоздушных смесей интенсивность турбулентности способствует увеличению ширины зоны химических реакций.

3. Обработка результатов зарубежных и отечественных ученых показала справедливость полученных нами закономерностей для камер сгорания разных конструкций, использующих разное углеводородное топливо.

Список литературы

1. Sandalcı T., Galata S., Karagöz Y. Effect of hythane enrichment on performance, emission and combustion characteristics of an SI engine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, iss. 5, p. 3208–3220.
2. Аксютин О. Е., Ишков А. Г., Романов К. В. Вклад газовой отрасли в формирование энергетической модели на основе водорода // Вести газовой науки. 2017. С. 12–20.
3. Tangoz S., Kahraman N., Akansu S. The effect of hydrogen on the performance and emissions of an SI engine having a high compression ratio fuelled by compressed natural gas. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, iss. 40, p-2. 257665780.
4. Шайкин А. П., Ивашин П. В., Галиев И. Р., Дерячев А. Д. Характеристики распространения пламени и их влияние на образование несгоревших углеводородов и оксида азота в отработавших газах при добавке водорода в топливно-воздушную смесь энергетических установок с искровым зажиганием. Самара: Изд-во Самар. науч. центра РАН, 2016. 259 с.
5. Doosje E. Limits of mixture dilution in gas engines. Doctoral thesis. Eindhoven, 2010, 370 p.
6. Ting D., Checkel M., Johansson B. The Importance of High-Frequency, Small-Eddy Turbulence in Spark Ignited, Premixed Engine Combustion. *SAE*, 1995, no. 952409, p. 1–15.
7. Дерячев А. Д. Эмпирическая модель оценки концентрации оксидов азота при добавке водорода в ТВС двигателей с искровым зажиганием: Дис. ... канд. техн. наук. Тольятти, 2015. 150 с.

References

1. Sandalcı T., Galata S., Karagöz Y. Effect of hythane enrichment on performance, emission and combustion characteristics of an SI engine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, iss. 5, p. 3208–3220.
2. Aksyutin O. E., Ishkov A. G., Romanov K. V. Vakuumnaya gazovaya otrasl' na osnove vodoroda. *Vesti gazovoy nauki*, 2017, p. 12–20. (in Russ.)
3. Tangoz S., Kahraman N., Akansu S. The effect of hydrogen on the performance and emissions of an SI engine having a high compression ratio fuelled by compressed natural gas. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, iss. 40, p-2. 257665780.
4. Shaykin A. P., Ivashin P. V., Galiyev I. R., Deryachev A. D. Kharakteristiki rasprostraneniya plameni i ikh vliyaniye na obrazovaniye nesgorevshikh uglevodorodov i oksida azota v rabochikh gazakh pri dobavlenii vodoroda v toplivno-vozdushnuyu smes' energeticheskikh ustanovok s iskrovym zazhiganiyem. Samara, 2016, 259 p. (in Russ.)
5. Doosje E. Limits of mixture dilution in gas engines. Doctoral thesis. Eindhoven, 2010, 370 p.
6. Ting D., Checkel M., Johansson B. The Importance of High-Frequency, Small-Eddy Turbulence in Spark Ignited, Premixed Engine Combustion. *SAE*, 1995, no. 952409, p. 1–15.
7. Deryachev A. D. Empiricheskaya model' otsenki kontsentratsii oksidov azota pri dobavke vodoroda v TVS dvigateley s iskrovym zazhiganiyem. Dis. kand. tekhn. nauk. Toliyatti, 2015. 150 с. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию
Received
27.10.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Шайкин Александр Петрович, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Энергетические машины и системы управления», Тольяттинский государственный университет (Тольятти, Россия)

Aleksandr P. Shaykin, Doctor of Science, Professor, Professor of the Department of Energy Machines and Control Systems, Tolyatti State University (Tolyatti, Russian Federation)

a_shajkin@mail.ru

Галиев Ильдар Ринатович, кандидат технических наук, доцент кафедры «Проектирование и эксплуатация автомобилей», Тольяттинский государственный университет (Тольятти, Россия)

Ildar R. Galiev, candidate of science, Associate Professor of the Department of Vehicle Design and Operation, Tolyatti State University (Tolyatti, Russian Federation)

sbs777@yandex.ru

УДК 536.71:544.34
DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-74-81

К расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеводородов при недостатке кислорода

Е. С. Прохоров

*Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН
Новосибирск, Россия*

Аннотация

Предложен унифицированный подход к расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеводородов при недостатке кислорода, когда среди компонентов химической реакции возможно появление одновременно газообразной и конденсированной фаз углерода. Одним из принципов, заложенных в его основу, есть положение о том, что частицы конденсированного вещества являются «большими молекулами», состоящими из большого числа обычных молекул. Для иллюстрации возможностей сформулированного подхода численно решена задача о взрыве реагирующей газовой смеси в объеме. Расчеты проведены для ацетиленокислородных и ацетиленовоздушных смесей.

Ключевые слова

продукты сгорания, химическое равновесие, конденсация углерода

Для цитирования

Прохоров Е. С. К расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеводородов при недостатке кислорода // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 74–81. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-74-81

To the Computation of Equilibrium States of Hydrocarbon Combustion Products under the Lack of Oxygen

E. S. Prokhorov

*Lavrentiev Institute of Hydrodynamics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation*

Abstract

In this paper, we propose a unified approach to the computation of equilibrium states of hydrocarbon combustion products under the lack of oxygen when both gaseous and condensed carbon phases can appear simultaneously among the components of chemical reaction. One of the principles forming the basis of the approach is that the particles of a condensed substance are “large molecules” consisting of a great number of normal molecules. To illustrate the feasibility of the formulated approach, the problem of explosion of reacting gas mixture in a volume has been numerically solved. The computations have been performed for oxy-acetylene and air-acetylene mixtures.

Keywords

combustion products, chemical equilibrium, carbon condensation

For citation

Prokhorov E. S. To the Computation of Equilibrium States of Hydrocarbon Combustion Products under the Lack of Oxygen. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 74–81. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-74-81

© Е. С. Прохоров, 2019

Введение

Расчет равновесия при горении или детонации газовых смесей состоит в определении химического состава продуктов реакции при фиксированных двух внешних параметрах, обычно это давление и температура. Такой расчет предполагает, что скорость установления химического равновесия намного превышает скорость изменения внешних параметров, т. е. химическую реакцию можно считать мгновенной. При варьировании хотя бы одного внешнего параметра будет происходить сдвиг равновесия и изменение химического состава. Продукты реакции представляют собой смесь молекул различных веществ. Зная химический состав такой смеси, можно определить для нее среднюю молярную массу, плотность, удельную (на единицу массы) внутреннюю энергию, тепловой эффект химической реакции и т. п., что является необходимым при теоретическом описании многих стационарных и нестационарных газодинамических процессов.

Для решения задач при моделировании равновесных течений продуктов сгорания смесей на основе углеводородного топлива и окислителя (кислорода или воздуха) можно воспользоваться методикой расчетов, предложенной в [1; 2]. Среди основных предположений, на которых формулируется эта методика, есть утверждение, что все продукты химической реакции являются газообразными. Однако на практике часто встречается ситуация, когда при сгорании переобогащенных топливом смесей кислорода не хватает до полного окисления углерода. И, как следствие, в продуктах сгорания может в заметных количествах появляться свободный углерод не только в газообразной, но и конденсированной фазе. Другими словами, к описанию химического равновесия в таких гетерогенных термодинамических системах нужен уже особый подход, отличный от описанного в работах [1; 2]. Стимулирующим фактором для этого также является возросший за последнее время интерес к производству углеводородного конденсата при сжигании углеводородного топлива в условиях нехватки кислорода, поскольку данный способ позволяет получать особые формы наноразмерных частиц углерода [3; 4], которые востребованы во многих отраслях промышленности.

В настоящей работе предложен унифицированный подход к расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеводородов при недостатке кислорода, когда среди компонентов химической реакции возможно появление одновременно газообразной и конденсированной фаз углерода. Он сформулирован на анализе закономерностей, установленных в [5; 6].

Так, с одной стороны, согласно [5] при недостатке кислорода в продуктах сгорания его почти полностью «забирает на себя» углерод, образуя молекулы оксида углерода CO, которые при температуре до 5 000 К (характерной для процессов горения) практически не диссоциируют на атомы. Концентрациями других соединений с кислородом можно пренебречь. В продуктах сгорания допускается протекание лишь двух химических реакций: $\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{H}$ (диссоциация водорода) и $\text{C} \rightleftharpoons \text{C}^*$ (конденсация углерода), где символом C^* обозначен конденсат углерода (графит).

С другой стороны, в [6] показана высокая эффективность метода «больших молекул» для расчета равновесия в сложных гетерогенных системах. Этот метод позволяет определять компонентный состав таких систем по схеме, принятой для гомогенных рабочих тел. Так, в расчетах предполагается, что частицы конденсированного вещества являются «большими молекулами», состоящими из k обычных молекул (как правило, $k = 100 \div 1000$). Тогда реакцию образования частицы конденсированной фазы (в нашем случае графита) можно условно представить как $k \text{C} \rightleftharpoons \text{C}_k^*$. Уравнение равновесия для этой реакции имеет следующий вид:

$$p_{\text{C}} = p_{\text{C}}^{\text{нас}} \left(p_{\text{C}_k^*} \right)^{1/k},$$

где p_C^{nac} – давление насыщенного пара углерода над плоской поверхностью, $p_{C_k^*}$ – парциальное давление «больших молекул». При $k \rightarrow \infty$ парциальное давление p_C газовой фазы конденсированного вещества стремится к давлению его насыщенного пара.

Анонсированный подход к расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеводов при недостатке кислорода может быть описан следующей математической моделью.

Математическая модель

Атомарный состав реагирующей термодинамической системы, состоящей из продуктов сгорания углеводородного топлива, будем характеризовать относительными концентрациями атомов кислорода z_O , углерода z_C , водорода z_H , азота z_N и любых других одноатомных инертных веществ A – z_A , которые связаны соотношением

$$z_O + z_C + z_H + z_N + z_A = 1. \quad (1)$$

Это соотношение получено с учетом того, что в качестве окислителя может служить не только чистый кислород, но и воздух (Air), например, со следующим химическим составом: Air = 0,21O₂+0,78N₂+0,01Ar.

В соответствии с [5; 6] полагаем, что компоненты химической реакции, протекающей в такой системе при недостатке кислорода, могут иметь только нижеприведенный равновесный состав (доля остальных веществ незначительна):

$$b_{CO}CO + b_C C + b_{C_k^*} C_k^* + b_{H_2} H_2 + b_H H + b_{N_2} N_2 + b_A A, \quad (2)$$

где b_s – стехиометрический коэффициент вещества $s = \{CO, C, C_k^*, H_2, H, N_2, A\}$. Все вещества являются газообразными и могут быть описаны моделью идеального газа.

Сопоставляя (1) и (2), можно получить пять уравнений атомарного баланса:

для кислорода

$$z_O = b_{CO}, \quad (3)$$

углерода

$$z_C = b_{CO} + b_C + kb_{C_k^*}, \quad (4)$$

водорода

$$z_H = 2b_{H_2} + b_H, \quad (5)$$

азота

$$z_N = 2b_{N_2}, \quad (6)$$

газа A

$$z_A = b_A. \quad (7)$$

Обозначим общее число молей веществ, участвующих в химической реакции в точке равновесия,

$$b = b_{CO} + b_C + b_{C_k^*} + b_{H_2} + b_H + b_{N_2} + b_A. \quad (8)$$

Тогда уравнения (3)–(8) можно представить в следующем виде:

$$z_O/b = y_{CO}, \quad (9)$$

$$z_C/b = y_{CO} + y_C + ky_{C_k^*}, \quad (10)$$

$$z_H/b = 2y_{H_2} + y_H, \quad (11)$$

$$z_N/b = 2y_{N_2}, \quad (12)$$

$$z_A/b = y_A, \quad (13)$$

$$y_{CO} + y_C + y_{C_k^*} + y_{H_2} + y_H + y_{N_2} + y_A = 1. \quad (14)$$

где $y_s = b_s/b$ – молярная доля компонента s , парциальное давление которого теперь можно определить как $p_s = py_s$.

Дополним эти соотношения двумя уравнениями химического равновесия

$$(y_{C_k^*})^{1/k} p_C^{nac} = y_C p^{1-1/k}, \quad K_{H_2} y_{H_2} = y_H^2 p, \quad (15)$$

где переменные $p_C^{nac} = p_C^{nac}(T)$, $K_{H_2} = K_{H_2}(T)$ являются известными функциями от температуры [7].

При заданных значениях давления p , температуры T , относительных концентраций атомов веществ (z_O , z_C , z_H , z_N , z_A) и параметра k для «больших молекул», система уравнений (9)–(15) является замкнутой. Решая ее численно, например методом Ньютона [8], находим искомые переменные (b , y_{CO} , y_C , $y_{C_k^*}$, y_{H_2} , y_H , y_{N_2} , y_A), которые в дальнейшем можно использовать для расчета других параметров, характеризующих термодинамическую систему в состоянии химического равновесия. Например, для продуктов сгорания найти среднюю молярную массу $\mu = \sum_s y_s \mu_s$, удельную внутреннюю (с учетом потенциальной химической) энергию $U = (\sum_s y_s U_s) / \mu$ и плотность $\rho = p\mu/RT$ (R – газовая постоянная). Это позволяет также оценивать и объемную плотность углеродного конденсата (вещества, сосредоточенного в «больших молекулах») в смеси – $\rho_{C_k^*} = \rho(y_{C_k^*} \mu_{C_k^*} / \mu)$. Отметим, что согласно [6] для «больших молекул» полагаем $\mu_{C_k^*} = k\mu_{C^*}$ и $U_{C_k^*} = kU_{C^*}$. Для определения U_s могут быть использованы справочные данные [7].

Задача о взрыве в объеме

Для иллюстрации возможностей сформулированного подхода, решена задача расчета равновесных параметров продуктов сгорания при взрыве ацетиленокислородной смеси $nC_2H_2 + (1-n)O_2$ в замкнутом объеме для значений молярной доли топлива $n \geq 0.5$, т. е. при недостатке O_2 . Соответственно для этой смеси имеем следующие значения относительных концентраций атомов в продуктах сгорания:

$$z_C = z_H = \frac{n}{1+n}, \quad z_O = \frac{1-n}{1+n}.$$

При протекании химической реакции при постоянном объеме выполняются условия, по сути, выражающие законы сохранения массы и энергии:

$$\rho = \rho_0 = \text{const}, \quad U = U_0 = \text{const}, \quad (16)$$

где значения для плотности ρ_0 и внутренней энергии U_0 смеси перед взрывом задавали при начальных давлении $p_0 = 1$ атм и температуре $T_0 = 298.15$ К. Решая систему (9)–(15) совместно с (16), можно одновременно с определением химического состава находить давление p и температуру T продуктов сгорания после взрыва.

Некоторые результаты таких расчетов при $k = 100$ представлены в табл. 1, где прочерк означает, что рассчитанное значение для молярной доли вещества $y_s < 10^{-4}$ (менее 0,01 %). При использовании в качестве окислителя чистого кислорода всегда имеем $y_{N_2} = 0$ и $y_A = 0$.

Расчеты равновесного состава продуктов сгорания
после взрыва ацетиленокислородной смеси $nC_2H_2 + (1-n)O_2$ в замкнутом объеме

Calculations of the equilibrium composition of combustion products
after an explosion of an acetylene oxygen mixture $nC_2H_2 + (1-n)O_2$ in a closed volume

n	p , атм	T , К	y_{CO}	y_C	$y_{C_k^*}$	y_{H_2}	y_H
0,5	23,24	4167	0,6015	—	—	0,2029	0,1956
0,55	21,46	4007	0,5637	0,0028	0,0013	0,2567	0,1755
0,6	20,04	3899	0,5220	0,0017	0,0026	0,3094	0,1643
0,65	18,72	3798	0,4762	0,0010	0,0041	0,3658	0,1529
0,7	17,50	3704	0,4259	0,0006	0,0057	0,4261	0,1417
0,75	16,35	3615	0,3707	0,0004	0,0074	0,4907	0,1308
0,8	15,28	3531	0,3101	0,0002	0,0093	0,5601	0,1203
0,85	14,26	3450	0,2435	0,0001	0,0114	0,6348	0,1102
0,9	13,30	3372	0,1702	—	0,0137	0,7154	0,1007
0,95	12,38	3297	0,0893	—	0,0162	0,8027	0,0918

Видно, что с ростом n возрастает молярная доля «больших молекул» $y_{C_k^*}$, но при этом она все равно остается весьма незначительной – менее 1,9 % даже в случае $n = 1$. Однако массовая доля вещества (углерода) $\rho_{C_k^*}/\rho$, которая сосредоточена в этих молекулах, будет достаточно большой, достигая при $n \rightarrow 1$ величины $\rho_{C_k^*}/\rho = 0.921$. Межмолекулярный диаметр атома углерода в различных соединениях составляет около 0,154 нм (см., например, [9]). Это позволяет предположить, что при $k = 100$ размер «больших молекул» будет порядка 154 нм, т. е. их можно представлять в виде наноразмерных конденсированных частиц с незначительным парциальным давлением $p_{C_k^*}$.

Для предельного значения молярной доли ацетилена в смеси $n_m = 0.5$, когда кислорода еще хватает для окисления С до СО, получены следующие значения равновесных параметров продуктов сгорания: $p_m = 23.24$ атм, $T_m = 4167$ К, $\mu_m = 17.45$ г/моль, $\rho_m = 1.186$ кг/м³. Эти величины можно использовать для обезразмеривания аналогичных параметров, полученных в расчетах при варьировании n в диапазоне $n_m < n < 1$.

Безразмерные параметры имели следующие обозначения: для давления – $\tilde{p} = p/p_m$, температуры – $\tilde{T} = T/T_m$, средней молярной массы – $\tilde{\mu} = \mu/\mu_m$ и плотности – $\tilde{\rho} = \rho/\rho_m$. Результаты расчетов таких параметров при $k = 100$ представлены на рис. 1 (сплошные линии).

Здесь же пунктирной линией показано возрастание массовой доли конденсированной фазы $\rho_{C_k^*}/\rho$ в продуктах сгорания при увеличении n .

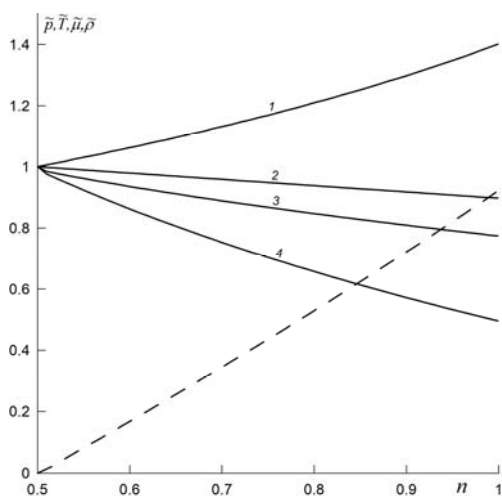


Рис. 1. Безразмерные значения равновесных параметров продуктов сгорания смеси $nC_2H_2 + (1-n)O_2$ в зависимости от молярной доли топлива n : $\tilde{\mu}$ (кривая 1), $\tilde{p}$ (2), $\tilde{T}$ (3), $\tilde{\rho}$ (4); пунктирная линия – $\rho_{C_k^*}/\rho$

Fig. 1. Dimensionless values of the equilibrium parameters of the combustion products of the mixture $nC_2H_2 + (1-n)O_2$ depending on the molar fraction of fuel n : $\tilde{\mu}$ (curve 1), $\tilde{p}$ (2), $\tilde{T}$ (3), $\tilde{\rho}$ (4); dotted line – $\rho_{C_k^*}/\rho$

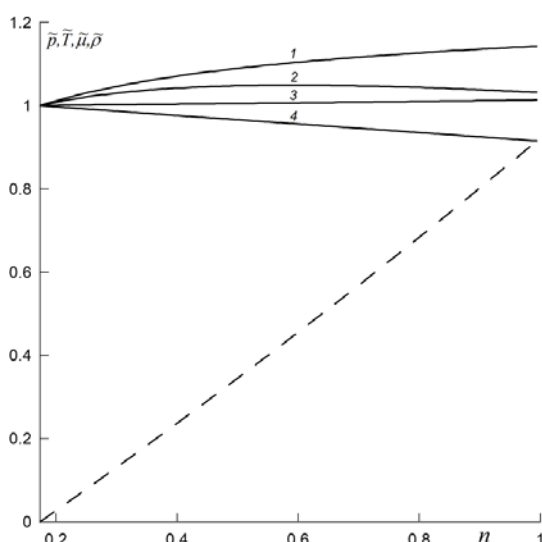


Рис. 2. Безразмерные значения равновесных параметров продуктов сгорания смеси $nC_2H_2 + (1-n)Air$ в зависимости от молярной доли топлива n : $\tilde{T}$ (кривая 1), $\tilde{p}$ (2), $\tilde{\mu}$ (3), $\tilde{\rho}$ (4); пунктирная линия – $\rho_{C_k^*}/\rho$

Fig. 2. Dimensionless values of the equilibrium parameters of the combustion products of the mixture $nC_2H_2 + (1-n)Air$ depending on the molar fraction of fuel n : $\tilde{T}$ (curve 1), $\tilde{p}$ (2), $\tilde{\mu}$ (3), $\tilde{\rho}$ (4); dotted line – $\rho_{C_k^*}/\rho$

Аналогичные расчеты (рис. 2) были выполнены и для смеси ацетилена с воздухом $nC_2H_2 + (1-n)Air$, для которой относительные концентрации атомов в продуктах сгорания имели следующие значения:

$$z_C = z_H = \frac{2n}{1.99 + 2.01n}, \quad z_O = \frac{0.42(1-n)}{1.99 + 2.01n}, \quad z_N = \frac{1.56(1-n)}{1.99 + 2.01n}, \quad z_{Ar} = \frac{0.01(1-n)}{1.99 + 2.01n}.$$

Приравнявая выражения для z_C и z_O , находим предельную величину молярной доли ацетилена в смеси $n_m = 0.1736$, которой соответствуют следующие значения равновесных параметров продуктов сгорания: $p_m = 11.16$ атм, $T_m = 2821$ К, $\mu_m = 24.13$ г/моль, $\rho_m = 1.163$ кг/м³. При $n \rightarrow 1$ для ацетиленовоздушной (как, впрочем, и для ацетиленокислородной) смеси из расчетов для продуктов сгорания получаем: $p = 11.53$ атм, $T = 3226$ К, $\mu = 24.45$ г/моль, $\rho = 1.064$ кг/м³. Видно, что отличие этих значений от представленных выше параметров

p_m, T_m, μ_m, ρ_m для ацетиленовоздушной смеси незначительное. Это позволяет объяснить некоторые различия в поведении кривых для $\tilde{p}, \tilde{T}, \tilde{\mu}, \tilde{\rho}$ на рис. 1 и 2.

Для оценки влияния числа частиц в составе «больших молекул» были проведены дополнительные расчеты при $k = 1000$. Установлено, что они практически не отличаются (расхождение не более 2 %) от результатов, представленных на рис. 1 и 2. Это означает, что при значениях $k > 100$ парциальным давлением $p_{c_k}^*$, которое оказывают «большие молекулы» в смеси продуктов сгорания, можно пренебречь, т. е. их влияние аналогично присутствию в газообразной среде конденсированных ультрадисперсных частиц.

Отметим, что описанное решение задачи о взрыве в объеме может быть полезным при численном моделировании нестационарных процессов в реагирующих средах в качестве массовой вычислительной процедуры. Поскольку часто реализуемые на практике численные алгоритмы [10] предполагают восстановление в ячейках «верхнего» временного слоя разностной сетки давления p и температуры T для определенных из законов сохранения плотности ρ и удельной внутренней энергии газа U .

Заключение

Сформулирован подход для расчета равновесных состояний продуктов сгорания углеводородов при недостатке кислорода. В его основе заложены два принципа: 1) при превышении концентрации атомов углерода над атомами кислорода возможно появление в продуктах химической реакции одновременно газообразной и конденсированной фаз углерода; 2) частицы конденсированного вещества являются «большими молекулами», состоящими из большого числа обычных молекул. Для описания теплофизических свойств конденсированной фазы использованы справочные данные для графита. Этот подход обладает простотой и универсальностью, так как пригоден для широкого диапазона углеводородных топлив. Его легко можно обобщить на случай, когда вместо кислорода используется воздух. Он предоставляет возможность оценки массы конденсированного углерода при детонационном сжигании углеводородного топлива.

Список литературы

1. Эйзен С., Гросс Р., Ривлин Т. Теоретический расчет газовой детонации // Вопросы ракетной техники. 1961. № 1. С. 20–32.
2. Николаев Ю. А., Топчий М. Е. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13, № 3. С. 393–404.
3. Васильев А. А., Пинаев А. В. Образование углеродных кластеров в волнах горения и детонации // Физика горения и взрыва. 2008. Т. 44, № 3. С. 81–94.
4. Штерцер А. А., Ульяницкий В. Ю., Батраев И. С., Громилов С. А. и др. Диагностика структуры и состава ультрадисперсного углерода, получаемого детонационным способом // Журнал структурной химии. 2014. Т. 55, № 5. С. 1031–1034.
5. Прохоров Е. С. Расчет равновесных состояний реагирующей углеродокислородной термодинамической системы // Сибирский физический журнал. 2018. Т. 13, № 1. С. 95–101.
6. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: Справочник / Под ред. В. П. Глушко. М.: ВИНТИ, 1973. Т. 3. 624 с.
7. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4 т. / Под ред. В. П. Глушко. М.: Наука, 1978.
8. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. 512 с.
9. Гуляев А. П. Металловедение. М.: Metallurgy, 1986. 544 с.

10. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976. 400 с.

References

1. Eisen S., Gross R., Rivlin T. Theoretical calculation of gas detonation. *Combustion and Flame*, 1960, vol. 4, no. 2, p.137–147.
2. Nikolaev Yu. A., Topchian M. E. Calculation of equilibrium flows in detonation waves in gases. *Fiz. Goreniya Vzryva*, 1977, vol. 13, no. 3, p. 393–404.
3. Vasiliev A. A., Pinaev, A. V. Formation of carbon clusters in the waves of combustion and detonation. *Fiz. Goreniya Vzryva*, 2008, vol. 44, no. 3, p. 81–94.
4. Shterzer A. A., Ulyanitsky V. Yu., Batraev I. S., Gromilov S. A. et al. Diagnostics of the structure and composition of ultradispersed carbon obtained by detonation method. *Journal of Structural Chemistry*, 2014, vol. 55, no. 5, p. 1031–1034. (in Russ.)
5. Prokhorov E. S. Computation of equilibrium states of a reacting carbon-oxygen thermodynamic system. *Siberian Journal of Physics*, 2018, vol. 13, no. 1, p. 95–101. (in Russ.)
6. Glushko V. P. (ed.) Thermodynamic and thermophysical properties of combustion products: A Reference Book. Moscow, VINITI, 1973, iss. 3, 624 p. (in Russ.)
7. Glushko V. P. (ed.) Thermodynamic properties of individual substances: A Reference Book. In 4 vols. Moscow, Nauka, 1978. (in Russ.)
8. Kalitkin N. N. Numerical methods, Moscow, Nauka, 1978, 512 p. (in Russ.)
9. Gulyaev A. P. Physical Metallurgy. Moscow, Metallurgy, 1986, 544 p. (in Russ.)
10. Godunov S. K., Zabrodin A. V., Ivanov M. Ya., Kraiko A. N., Prokopov G. P. Numerical solution of multidimensional gas dynamics problems. Moscow, Nauka, 1976, 400 p. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию

Received
27.11.2019

Сведения об авторе / Information about the Author

Прохоров Евгений Степанович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН (пр. Академика Лаврентьева, 15, Новосибирск, 630090, Россия)

Evgeniy S. Prokhorov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, Lavrentiev Institute of hydrodynamics SB RAS (15 Academician Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

prokh@hydro.nsc.ru

УДК 535: 621.373.826: 539

DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-82-90

Исследование двухфотонного поглощения фемтосекундного ИК излучения методом «накачка – зондирование» в отражении от пластинки GaAs (001)

Н. Н. Рубцова¹, Г. М. Борисов^{1,2}, Д. В. Ледовских¹

¹ Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН
Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия

Аннотация

Исследовано отражение от подложки арсенида галлия ориентации (001) инфракрасного пробного фемтосекундного излучения в присутствии более мощных импульсов накачки того же излучения с пиковой мощностью до 1 ГВт/см². Лазер Yb³⁺:KY(WO₄)₂ с центральной длиной волны 1035 нм, с частотой повторения 70 МГц, длительностью импульсов 130 фс и средней мощностью не более 0,9 Вт работал в области прозрачности GaAs. Экспериментальная зависимость регистрируемого сигнала от интенсивности излучения накачки на качественном уровне совпадает с модельной зависимостью для двухфотонного поглощения. Результаты важны для правильной интерпретации кинетики отражения от слоя квантовых ям.

Ключевые слова

двухфотонное поглощение, накачка – зондирование, фемтосекундные импульсы излучения

Источник финансирования

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-29-20007 и гранта РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 18-42-543001

Для цитирования

Рубцова Н. Н., Борисов Г. М., Ледовских Д. В. Исследование двухфотонного поглощения фемтосекундного ИК излучения методом «накачка – зондирование» в отражении от пластинки GaAs (001) // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 82–90. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-82-90

Investigation of Femtosecond IR Radiation Two-Photon Absorption by Pump-Probe Method in GaAs (001) Plate Reflection

N. N. Rubtsova¹, G. M. Borisov^{1,2}, D. V. Ledovskikh¹

¹ Rzhanov Institute of Semiconductor Physics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

² Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

Abstract

The reflection of probe infrared femtosecond radiation pulses from a gallium arsenide substrate of the (001) orientation in the presence of more powerful pump pulses of the same radiation with a peak power of up to 1 GW/cm² was investigated. A Yb³⁺:KY(WO₄)₂ laser with a central wavelength of 1035 nm, a repetition rate of 70 MHz, a pulse duration of 130 fs, and an average power of not more than 0.9 W worked in the GaAs transparency region. The experimental dependence of the recorded signal on the pump radiation intensity is in qualitative agreement with the model

© Н. Н. Рубцова, Г. М. Борисов, Д. В. Ледовских, 2019

ISSN 2541-9447

Сибирский физический журнал. 2019. Том 14, № 4
Siberian Journal of Physics, 2019, vol. 14, no. 4

dependence for two-photon absorption. The results are important for the correct interpretation of reflectivity kinetics of quantum wells.

Keywords

two-photon absorption, pump-probe, femtosecond radiation pulses

Funding

The study was financially supported by the RFBR grant No. 18-29-20007 and the RFBR grant and the Law-agencies of the Novosibirsk region in the framework of the scientific project no. 18-42-543001

For citation

Rubtsova N. N., Borisov G. M., Ledovskikh D. V. Investigation of Femtosecond IR Radiation Two-Photon Absorption by Pump-Probe Method in GaAs (001) Plate Reflection. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 82–90. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-82-90

Введение

Двухфотонное поглощение в монокристаллических полупроводниках и в квантовых ямах давно является предметом изучения в силу большой роли этого явления в понимании нелинейных процессов в полупроводниковых устройствах, в том числе с использованием наноразмерных структур. В этой области науки сделано уже многое. Теоретически [1] установлена зависимость коэффициента двухфотонного поглощения β от ширины запрещенной зоны E_g полупроводника $\beta \sim (E_g)^{-1/3}$ для излучения в области прозрачности полупроводников, получено доказательство безынерционности процесса [2] для поглощения связанными носителями заряда, исследована анизотропия двухфотонного поглощения в полупроводниках [3]; рассчитана анизотропия двухфотонного поглощения в квантовых ямах [4] и т. д.

Интерес авторов к явлению двухфотонного поглощения обусловлен необходимостью учитывать его в некоторых экспериментах типа «накачка – зондирование» при исследовании элементов зеркал с насыщающимся поглощением [5–9]. Цель данной работы – обосновать условия, при которых возможно исследование кинетики квантовых ям, в особенности участка кинетики, связанного с формированием и гибелью экситонов, локализованных в квантовых ямах.

Теория

Общий случай двухфотонного поглощения в полупроводниках со структурой цинковой обманки ZnSe, ZnS, GaAs, CdTe, ZnTe рассмотрен в [10] для двух излучений разных частот (невыврожденное двухфотонное поглощение); рассмотрение включает вырожденное двухфотонное поглощение как частный случай. Применительно к одночастотным экспериментам типа «накачка – зондирование» система дифференциальных уравнений (4) из [10] может быть записана для интенсивности насыщающего излучения накачки I_s и пробного излучения I_{pr} в следующем виде:

$$\begin{aligned} dI_s/dz &= -\beta_{11} \cdot I_s^2 - 2 \cdot \beta_{12} \cdot I_s \cdot I_{pr}, \\ dI_{pr}/dz &= -\beta_{22} \cdot I_{pr}^2 - 2 \cdot \beta_{21} \cdot I_s \cdot I_{pr}. \end{aligned} \quad (1)$$

В формуле (1) I_{pr} – пробное излучение, I_s – излучение накачки, z – расстояние от входной поверхности образца; коэффициенты двухфотонного поглощения β_{ij} соответствуют поглощению двух фотонов излучения накачки либо двух фотонов пробного излучения, либо поглощению по одному фотону из каждого из этих двух пучков излучения. Граничные условия фиксируют значения интенсивности излучений накачки $I_s(0) = I_{s0}$ и пробного $I_{pr}(0) = I_{pr0}$ на входе в образец.

Аналитическое решение системы уравнений (1) можно получить лишь при условии, что пробное излучение имеет низкую интенсивность, т. е. $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$ на всем протяжении образца. Несущие частоты излучений накачки и пробного одинаковы, поэтому значения всех коэффициентов двухфотонного поглощения считались одинаковыми (далее обозначены как β). Пренебрегая в уравнении для $I_s(z)$ вторым слагаемым правой части, для интенсивности накачки получаем выражение

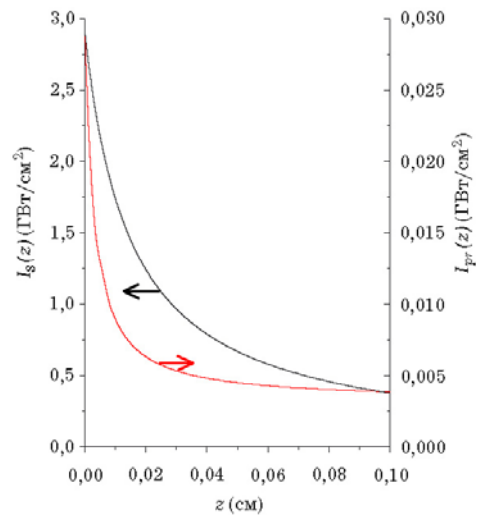
$$I_s(z) = I_{s0} / (1 + \beta \cdot I_{s0} \cdot z). \quad (2)$$

Из второго уравнения системы (1), пренебрегая квадратичным слагаемым правой части, для интенсивности пробного излучения получаем

$$I_{pr}(z) = I_{pr0} / (1 + \beta \cdot z \cdot I_{s0})^2. \quad (3)$$

Рис. 1. Расчетные зависимости интенсивностей излучения накачки и пробного излучения от длины пути в образце z в случае $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$

Fig. 1. Estimated dependences of radiation intensities pump I_s and probe I_{pr} radiation versus the path length z in sample in the case $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$

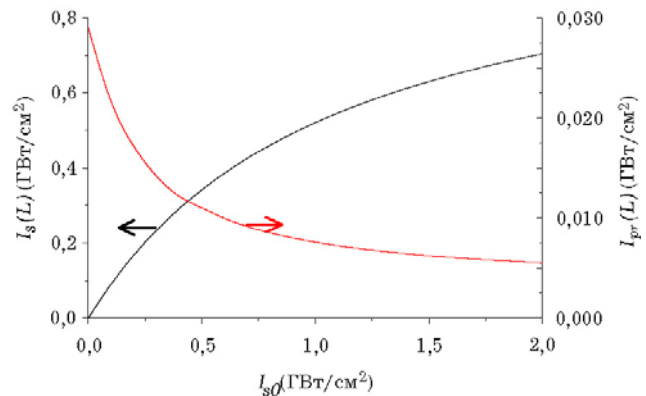


На рис. 1 показано поведение интенсивности излучения накачки и пробного излучения в зависимости от пути z , пройденного в образце. Излучение накачки ослабевает с ростом толщины образца не столь значительно, как интенсивность пробного излучения.

Из упрощенного аналитического решения видна разница в поведении накачки и пробного излучения на выходе из образца с длиной L (в расчетах использовано $L = 400$ мкм) в зависимости от входной интенсивности накачки. Результат показан на рис. 2.

Рис. 2. Расчетные зависимости интенсивностей накачки и пробного излучения на выходе образца длины L от интенсивности накачки на входе в образец (случай $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$)

Fig. 2. Estimated intensities of pump and probe radiation at the output of the sample of length L versus the pump intensity at the sample entrance ($I_{pr}(z) \ll I_s(z)$)



С ростом входной интенсивности накачки ее интенсивность на выходе образца нарастает. В то же время интенсивность пробного излучения на выходе образца уменьшается с ростом входной интенсивности накачки. Это может быть интерпретировано как повышение чувствительности пробного излучения к двухфотонному поглощению за счет процессов с одновременным поглощением одного фотона пробного излучения и одного фотона накачки. С ростом интенсивности накачки вероятность такого процесса растет, и выходное пробное излучение ослабляется значительно сильнее, чем в отсутствие излучения накачки.

В случае регистрации сигнала двухфотонного поглощения методом двойной модуляции [11] пробное излучение и излучение накачки прерываются на некратных частотах, а сигнал регистрируется на суммарной частоте. В результате регистрируемый сигнал оказывается пропорциональным произведению $I_{pr}(L) \cdot I_s(L)$, где L – длина образца. Для предельного случая $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$ можно получить аналитическое выражение для регистрируемого сигнала:

$$S \sim I_{pr0} \cdot I_{s0} / (1 + \beta \cdot z \cdot I_{s0})^3. \quad (1)$$

Ожидаемая зависимость регистрируемого сигнала от интенсивности излучения накачки на входе в образец $S(I_{s0})$ показана на рис. 3; видно нарастание с насыщением и с последующим уменьшением сигнала при высокой интенсивности накачки.

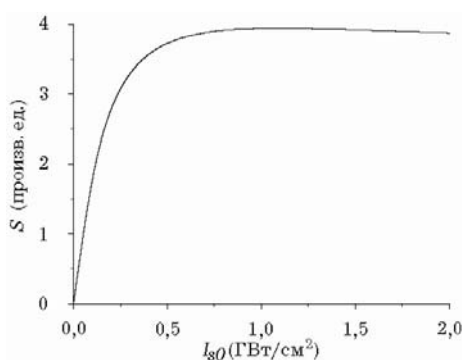


Рис. 3. Амплитуда регистрируемого сигнала как функция интенсивности накачки на входе в образец для случая $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$ (аналитическое решение)

Fig. 3. The amplitude of the recorded signal as a function of the pump intensity at the sample entrance for the case $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$ (analytical solution)

В экспериментах типа «накачка – зондирование» приходится изменять интенсивность накачки от максимально возможных значений в сторону уменьшения, и тогда условие $I_{pr}(z) \ll I_s(z)$ будет выполняться не всегда. В этом случае необходимо решать систему уравнений (1) численно. Характер зависимости от длины образца и от значений входной интенсивности накачки качественно остается таким же, как в упрощенном случае. Нахождение численных решений не представляет труда. Численные решения системы уравнений (1) использованы для сравнения с результатами эксперимента.

Метод измерения

Техника двойной модуляции, используемая нами для исследования кинетики просветления и восстановления зеркал или их элементов, подробно представлена в [11]. Используется излучение фемтосекундного лазера FL-1000 (фирма «Солар», Беларусь) с центральной частотой излучения 1035 нм, длительностью импульсов 130 фс, частотой следования около 70 МГц и средней мощностью излучения не более 0,9 Вт. Излучение делится стеклянной пластинкой на два пучка – насыщающий и пробный. Оптическая линия задержки, управляемая от компьютера, позволяет изменять время задержки пробного импульса относительно

импульса накачки в пределах от -10 до $+40$ пс с точностью около половины длительности импульсов. Каждый из пучков прерывался механически на своей частоте (частоты некратные), фокусировался на образец под малым углом падения и под небольшим углом к другому пучку в пятно радиусом 30 микрон, а нелинейный отклик регистрировался на суммарной частоте прерывания. Все указанные углы не превышали $10\text{--}15^\circ$, а поляризации пробного излучения и излучения накачки были одинаковыми. Предельная чувствительность регистрации относительного изменения отражения составила $5 \cdot 10^{-6}$ [11].

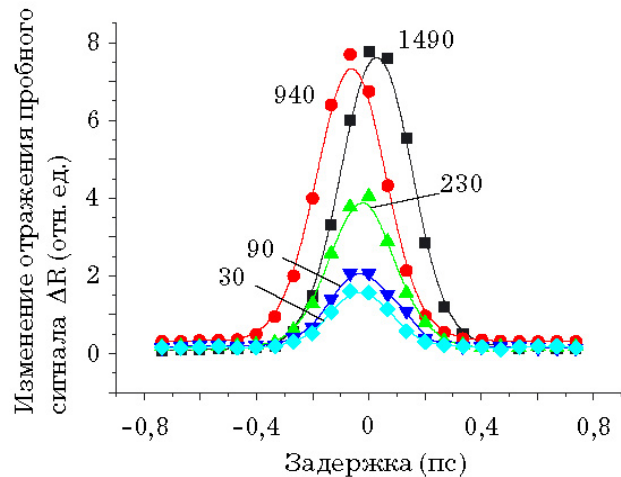
Результаты измерений и сравнение с расчетом

Измерения отражения от образца арсенида галлия ориентации (001) толщиной 400 микрон проведены при близком к нормали падении обоих пучков излучения (насыщающего и пробного) на образец. В экспериментах регистрировалось пробное излучение как функция времени задержки между пробным излучением и излучением накачки. Зависимость изменения интенсивности пробного излучения в зависимости от времени задержки пробного импульса относительно импульса накачки (насыщающего излучения) показаны на рис. 4.

Рис. 4. Зависимость изменения отражения пробного излучения ΔR как функция задержки пробного импульса относительно импульса накачки (значения интенсивности насыщающего излучения обозначены цифрами у кривых в МВт/см²)

Fig. 4. The change in probe radiation reflection ΔR as a function of the probe pulse delay

relative to the pump pulse (the intensities of saturating radiation are indicated by numbers near the curves in MW/cm²)



Некоторые сдвиги максимумов кривых по задержкам происходят из-за применения нейтральных фильтров для ослабления интенсивности насыщающего излучения, толщина которых несколько отличалась. Небольшой стационарный сигнал, на фоне которого регистрируются кривые для высокой интенсивности насыщающего излучения, соответствует вкладу свободных носителей, сформированных в результате двухфотонного поглощения. Этот вклад выглядит как стационарный из-за большого времени электронно-дырочной рекомбинации в монокристаллическом арсениде галлия, с характерным временем, превышающим период следования фемтосекундных импульсов – в нашем случае 14 нс.

Для расчетов использованы значения коэффициента двухфотонного поглощения $\beta = 0,010; 0,015$ и $0,020$ см/МВт; длина образца $L = 0,04$ см; интерференция пучков в образце не учитывалась. Решение системы уравнений (1) выполнено с применением программы Mathcad. Попытка учесть трехфотонное поглощение с коэффициентом, экстраполированным к использованной длине волны излучения, показала, что вклад этого процесса не превышает 20 % в условиях эксперимента.

Экспериментальные данные, соответствующие максимумам кривых на рис. 4, пересчитаны в относительное изменение отражения $\Delta R/R$, где R – отражение пробного излучения в линейном режиме без насыщающего излучения. Экспериментальные точки на рис. 5 соединены тонкой штриховой линией (сплайновая интерполяция). Ординаты точек соответствуют максимумам кривых рис. 4, пересчитанных в относительное изменение отражения $\Delta R/R$. Абс-

циссы поправлены на отражение от образца (для этого использованы измерения средней мощности накачки, падающей на образец и отраженной от него, а также размер пучка на образце). Ошибка измерений на рис. 5 примерно соответствует размеру экспериментальных точек.

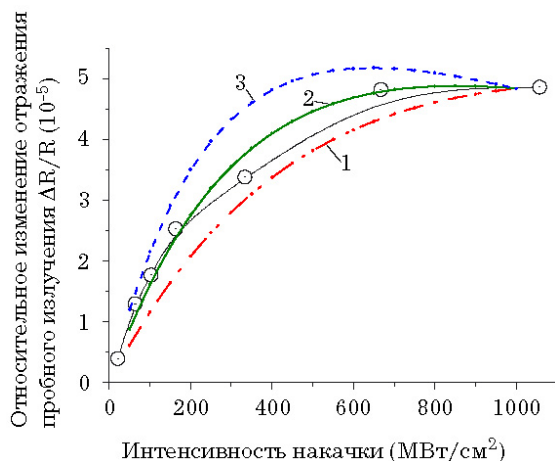


Рис. 5. Зависимость относительного изменения отражения пробного излучения $\Delta R/R$ от интенсивности накачки. Экспериментальные точки соединены штриховой тонкой линией методом сплайновой интерполяции. Сплошные кривые представляют расчет для коэффициентов двухфотонного поглощения $\beta = 10$ (кривая 1), $\beta = 15$ (кривая 2) и $\beta = 20$ (кривая 3) в см/ГВт

Fig. 5. The dependence of the relative probe radiation change $\Delta R/R$ versus the pump intensity. The experimental points are connected by a dashed thin line by B-spline interpolation method.

The solid curves represent the calculation for the coefficient of two-photon absorption $\beta = 10$ (curve 1), $\beta = 15$ (curve 2) and $\beta = 20$ (curve 3) in cm/GW

На рис. 5 показаны также расчетные кривые, соответствующие коэффициентам двухфотонного поглощения $\beta = 0,010$; $0,015$; $0,020$ см/МВт. К экспериментальным точкам ближе всего кривая 2. Для сравнения с экспериментом расчетные значения сигнала нормированы на величину $\Delta R/R$ относительного изменения пробного излучения в точке, соответствующей интенсивности накачки 1 ГВт/см^2 .

Обсуждение

В данной работе отражение от подложки GaAs ориентации (001) импульсов пробного инфракрасного фемтосекундного излучения исследовано в присутствии более мощных импульсов накачки того же излучения с пиковой мощностью до 1 ГВт/см^2 . Фемтосекундный лазер $\text{Yb}^{3+}:\text{KY}(\text{WO}_4)_2$ с центральной длиной волны 1030 нм работал в области прозрачности GaAs; энергия импульсов лазера не превышала 2 нДж . Сигналы, соответствующие нелинейному взаимодействию пробного излучения и излучения накачки в образце, оказались большими – на рис. 4 видно, что отношение сигнал / шум высокое. Измеренная зависимость относительного изменения отражения пробного излучения $\Delta R/R$ от интенсивности накачки нарастает в области малых значений интенсивности накачки, насыщается и далее затухает с ростом интенсивности накачки. Затухание хорошо видно на модельной кривой 3 на рис. 5. Видно также, что расчетные кривые чувствительны к величине коэффициента двухфотонного поглощения β .

В литературе можно найти различные значения β для GaAs в области ближнего ИК диапазона. В [3] с помощью пикосекундного излучения с длиной волны излучения $1,06 \text{ микрон}$ при комнатной температуре измерены в арсениде галлия значения $\beta = 0,023\text{--}0,030 \text{ см/МВт}$. В [12] можно встретить для той же спектральной области значения $\beta = 0,026 \text{ см/МВт}$ и $\beta = 0,023 \text{ см/МВт}$.

Экспериментальные результаты данной работы не противоречат данным [12] и могли бы представлять интерес как полученные при использовании более коротких импульсов. Их вряд ли можно использовать для измерения (уточнения) коэффициентов двухфотонного поглощения β из-за применения сфокусированных лазерных пучков. В таких условиях неоднородности полей излучения, факторы пространственного совмещения пробного излучения и излучения накачки могут быть существенными. Для измерений β было бы правильнее

использовать более широкие пучки излучений, что невозможно в наших условиях малой энергии импульса фемтосекундного лазера. Поэтому мы считаем удовлетворительным совпадение формы экспериментальной зависимости на рис. 5 с одной из расчетных кривых с разумным значением β .

Полученные результаты дополняют данные работы [8], посвященной исследованию кинетики отражения слоя квантовых ям InGaAs, выращенных непосредственно на подложке GaAs. В [8] было показано, что кинетика такого образца усложнена влиянием процессов, происходящих в подложке: мощный сигнал двухфотонного поглощения в подложке арсенида галлия маскирует наиболее интересный начальный участок сигнала нелинейного отражения от квантовых ям, обусловленный вкладом фотогенерированных экситонов. Исследование процессов в подложке GaAs (001) в данной работе показало, что в области прозрачности арсенида галлия интенсивное излучение накачки оказывает заметное влияние на поведение пробного излучения – из-за двухфотонного поглощения. Очевидно, что при исследовании кинетики отражения фемтосекундного ИК излучения от слоя квантовых ям, выращенных на подложке GaAs (001), необходимо учитывать двухфотонное поглощение в подложке, несмотря на то, что пробное излучение находится в области прозрачности материала подложки. Из результатов данной работы следует, что вклад двухфотонного поглощения в начальный участок кинетической кривой для слоя квантовых ям на подложке GaAs вряд ли возможно удалить путем вычитания расчетной кривой типа рис. 4. Поэтому мы делаем вывод, что при исследовании нелинейных эффектов в квантовых ямах лучше по возможности устранять проявления двухфотонного поглощения в подложке, например, путем изоляции слоя квантовых ям от подложки слоями диэлектрического или полупроводникового зеркала. Это особенно важно для участка кинетической кривой в области малых задержек пробного импульса излучения относительно импульса излучения накачки. Появление этого участка кривой связано с формированием и ионизацией экситонов [13], а наличие именно этого участка обеспечивает старт процесса синхронизации мод при малых плотностях энергии в резонаторе лазера – при использовании зеркала с насыщающимся поглощением в слое квантовых ям.

Заключение

Полученная в работе экспериментальная зависимость регистрируемого сигнала двухфотонного поглощения от падающей на образец интенсивности излучения накачки на качественном уровне совпадает с модельной зависимостью. Поскольку в расчетах использованы уравнения для плоских волн, а в эксперименте применялась фокусировка излучения в образец, качественное согласие модели с экспериментом можно считать удовлетворительным. Наиболее важный вывод из полученных результатов заключается в том, что для подробного исследования кинетики слоя квантовых ям, предназначенных для пассивной синхронизации мод лазера ближнего ИК диапазона, необходимо изолировать этот слой от подложки арсенида галлия. Только это позволит получить надежные данные о кинетике отражения квантовых ям при воздействии импульса излучения накачки. В особенности это касается наиболее важного участка кинетической кривой, соответствующего формированию и ионизации экситонов, локализованных в квантовых ямах.

Список литературы

1. **Van Stryland Eric W., Woodall M. A., Vanherzeele H., and Soileau M. J.** Energy band-gap dependence of two-photon absorption. *Optics Letters*, 1985, vol. 10, no. 10, p. 490–492.
2. **Tomita Yasuo, Shibata Masa-aki, and Bergquist Johan.** Pulsewidth dependence of time-resolved two-photon absorption with picosecond pump–probe excitation. *J. Appl. Phys.*, 1992, vol. 71, p. 2102–2105.

3. **Bechtel J. H. and Smith W. L.** Two-photon absorption in semiconductors with picosecond laser pulses. *Phys. Rev. B.*, 1976, vol. 13, no. 8, p. 3515–3522.
4. **Pattanaik Himansu S., Reichert Matthew, Khurgin Jacob B., Hagan David J., and Van Stryland Eric W.** Enhancement of Two-photon Absorption in Quantum Wells for Extremely Nondegenerate Photon Pairs. *IEEE J. Quantum Electronics*, 2015, vol. 52, p. 2566611.
5. **Рубцова Н. Н., Борисов Г. М., Гольдорт В. Г., Ледовских Д. В., Ковалев А. А., Преображенский В. В., Путятю М. А., Семагин Б. Р.** Полупроводниковые зеркала для синхронизации мод: новое в диагностике и конструкции // Прикладная фотоника. 2018. Т. 5, № 3. С. 211–216.
6. **Kisel' V. E., Rudenkov A. S., Pavlyuk A. A., Kovalyov A. A., Preobrazhenskii V. V., Putyato M. A., Rubtsova N. N., Semyagin B. R., and Kuleshov N. V.** High power efficient SESAM-mode-locked Yb:KGW bulk laser. *Optics Letters*, 2015, vol. 40, no. 12, p. 2707–2710.
7. **Kovalyov A. A., Preobrazhenskii V. V., Putyato M. A., Rubtsova N. N., Semyagin B. R., Kisel' V. E., Rudenkov A. S., Kuleshov N. V., Pavlyuk A. A.** Efficient high power femtosecond Yb³⁺:KY(WO₄)₂ laser. *Laser Physics Letters*, 2015, vol. 12, p. 075801.
8. **Rubtsova N. N., Borisov G. M., Gol'dort V. G., Kovalyov A. A., Ledovskikh D. V.** Reflectivity kinetics of saturable absorbers for laser mirrors. *Laser Physics*, 2016, vol. 26, p. 025001.
9. **Борисов Г. М., Гольдорт В. Г., Ковалёв А. А., Ледовских Д. В., Рубцова Н. Н.** Фемтосекундная кинетика отражения зеркал с насыщающимся поглощением // Автометрия. 2016. Т. 52, № 2. С. 52–56.
10. **Hutchings D. C. and Van Stryland E. W.** Nondegenerate two-photon absorption in zinc blende semiconductors. *JOSA B*, 1992, vol. 9, p. 2065–2074.
11. **Борисов Г. М., Гольдорт В. Г., Ковалёв А. А., Ледовских Д. В., Рубцова Н. Н.** Техника регистрации субпикосекундной кинетики отражения или пропускания // ПТЭ. 2018. № 1. С. 87–91.
12. **Van Stryland E. W., Vanherzeele H., Woodall M. A., Soileau M. J., Smirl A. L., Guha Sh., Boddess T. W.** Two photon absorption, nonlinear refraction, and optical limiting in semiconductors. *Optical Engineering*, 1985, vol. 24 (4), p. 613–623.
13. **Борисов Г. М., Гольдорт В. Г., Ковалёв А. А., Ледовских Д. В., Рубцова Н. Н.** Кинетика отражения полупроводникового быстродействующего зеркала // Сибирский физический журнал. 2017. Т. 12, № 3. С. 109–115.

References

1. **Van Stryland Eric W., Woodall M. A., Vanherzeele H., and Soileau M. J.** Energy band-gap dependence of two-photon absorption. *Optics Letters*, 1985, vol. 10, no. 10, p. 490–492.
2. **Tomita Yasuo, Shibata Masa-aki, and Bergquist Johan.** Pulsewidth dependence of time-resolved two-photon absorption with picosecond pump–probe excitation. *J. Appl. Phys.*, 1992, vol. 71, p. 2102–2105.
3. **Bechtel J. H. and Smith W. L.** Two-photon absorption in semiconductors with picosecond laser pulses. *Phys. Rev. B.*, 1976, vol. 13, no. 8, p. 3515–3522.
4. **Pattanaik Himansu S., Reichert Matthew, Khurgin Jacob B., Hagan David J., and Van Stryland Eric W.** Enhancement of Two-photon Absorption in Quantum Wells for Extremely Nondegenerate Photon Pairs. *IEEE J. Quantum Electronics*, 2015, vol. 52, p. 2566611.
5. **Rubtsova N. N., Borisov G. M., Goldort V. G., Ledovskikh D. V., Kovalyov A. A., Preobrazhensky V. V., Putyato M. A., Semyagin B. R.** Semiconductor mirrors for mode synchronization: new in diagnostics and design. *Applied Photonics*, 2018, vol. 5, no. 3, p. 211–216. (in Russ.)
6. **Kisel' V. E., Rudenkov A. S., Pavlyuk A. A., Kovalyov A. A., Preobrazhenskii V. V., Putyato M. A., Rubtsova N. N., Semyagin B. R., and Kuleshov N. V.** High power efficient

- SESAM-mode-locked Yb:KGW bulk laser. *Optics Letters*, 2015, vol. 40, no. 12, p. 2707–2710.
7. **Kovalyov A. A., Preobrazhenskii V. V., Putyato M. A., Rubtsova N. N., Semyagin B. R., Kisel' V. E., Rudenkov A. S., Kuleshov N. V., Pavlyuk A. A.** Efficient high power femto-second Yb³⁺:KY(WO₄)₂ laser. *Laser Physics Letters*, 2015, vol. 12, p. 075801.
 8. **Rubtsova N. N., Borisov G. M., Gol'dort V. G., Kovalyov A. A., Ledovskikh D. V.** Reflectivity kinetics of saturable absorbers for laser mirrors. *Laser Physics*, 2016, vol. 26, p. 025001.
 9. **Borisov G. M., Goldort V. G., Kovalyov A. A., Ledovskikh D. V., Rubtsova N. N.** Femto-second Kinetics of Reflection of Mirrors with Saturable Absorption. *Optoelectronics Instrumentation and Data Processing*, 2016, vol. 52, iss. 2, p. 148–152.
 10. **Hutchings D. C. and Van Stryland E. W.** Nondegenerate two-photon absorption in zinc blende semiconductors. *JOSA B*, 1992, vol. 9, p. 2065–2074.
 11. **Borisov G. M., Goldort V. G., Kovalyov A. A., Ledovskikh D. V., Rubtsova N. N.** A Technique for Detecting Subpicosecond Reflection or Transmission Kinetics *Instruments and Experimental Techniques*, 2018, Vol. 61, No. 1, p. 94–98.
 12. **Van Stryland E. W., Vanherzeele H., Woodall M. A., Soileau M. J., Smirl A. L., Guha Sh., Boddess T. W.** Two photon absorption, nonlinear refraction, and optical limiting in semiconductors. *Optical Engineering*, 1985, vol. 24 (4), p. 613–623.
 13. **Borisov G. M., Goldort V. G., Kovalyov A. A., Ledovskikh D. V., Rubtsova N. N.** Reflectivity Kinetics of the Fast Semiconductor Mirror. *Siberian Journal of Physics*, 2017, vol. 12, no. 3, p. 109–115. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию

Received
24.10.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Борисов Геннадий Михайлович, инженер, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (Новосибирск, Россия); преподаватель-совместитель, Новосибирский государственный университет (Новосибирск, Россия)

Gennady M. Borisov, Engineer, Rzhhanov Institute of Semiconductor Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation); part-time teacher, Novosibirsk State University (Novosibirsk, Russian Federation)

gennadiy.m.borisov@gmail.com

Ледовских Дмитрий Васильевич, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (Новосибирск, Россия)

Dmitry V. Ledovskikh, PhD in Physics and Mathematics, Researcher, Rzhhanov Institute of Semiconductor Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

dvledovskikh@isp.nsc.ru

Рубцова Наталия Николаевна, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующая лабораторией, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (Новосибирск, Россия)

Natalia N. Rubtsova, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Laboratory Head, Rzhhanov Institute of Semiconductor Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

rubtsova@isp.nsc.ru

Кристаллическая структура редкоземельных примесных центров R^{3+} в CaF_2 : *ab initio* расчет

В. А. Чернышев, А. В. Архипов

Уральский федеральный университет
Екатеринбург, Россия

Аннотация

В рамках теории функционала плотности с использованием гибридного функционала, учитывающего вклад нелокального обмена в формализме Хартри – Фока, исследована кристаллическая структура редкоземельных примесных центров R^{3+} ($R = \text{La} - \text{Lu}$) во флюорите. Определено расстояние «редкоземельный ион – лиганд», радиальные и угловые координаты ионов нескольких координационных сфер вблизи примесного иона.

Ключевые слова

редкоземельные примесные центры, *ab initio* расчеты, фториды

Источник финансирования

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, проект № 3.9534.2017/8.9. При расчетах был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН

Для цитирования

Чернышев В. А., Архипов А. В. Кристаллическая структура редкоземельных примесных центров R^{3+} в CaF_2 : *ab initio* расчет // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 91–102. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-91-102

The Crystal Structure of Rare-Earth Impurity Centers R^{3+} in MeF_2 : *ab initio* Calculation

V. A. Chernyshev, A. V. Arkhipov

Ural Federal University
Ekaterinburg, Russian Federation

Abstract

Ab initio calculations of the impurity centers R^{3+} ($R = \text{La} - \text{Lu}$) in CaF_2 were carried out. The calculations were performed by using hybrid functional which takes into account both local and nonlocal (at the Hartree – Fock formalism) exchange. The crystal structure of impurity centers was investigated.

The distance “rare-earth ion – ligand”, the radial and angular coordinates of the ions at several coordination spheres near to the impurity ion are determined. Calculations were carried out in the program CRYSTAL17, designed to simulate periodic structures within the MO LCAO approach.

Keywords

rare-earth impurity centers, *ab initio* calculations, fluorides

Funding

This study was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (project no. 3.9534.2017/8.9). Supercomputer “Uran” of IMM UB RAS was used in the calculations

For citation

Chernyshev V. A., Arkhipov A. V. The Crystal Structure of Rare-Earth Impurity Centers R^{3+} in MeF_2 : *ab initio* Calculation. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 91–102. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-91-102

Фториды со структурой флюорита, активированные редкоземельными ионами, используются в качестве сцинтилляционных материалов, лазерных сред, детекторов ионизирующего излучения [1–3]. Свойства этих материалов обусловлены электронной структурой редкоземельных примесных центров, в существенной степени определяемой кристаллическим полем на редкоземельном ионе. При допировании редкоземельный ион R^{3+} замещает катион Me^{2+} в структуре флюорита, что вызывает искажение кристаллической решетки вблизи примеси. Представляется актуальным исследовать кристаллическую структуру редкоземельных примесных центров, поскольку основной вклад в кристаллическое поле на редкоземельном ионе дает именно его ближайшее окружение. Редкоземельные ионы также используются в качестве люминесцентных зондов [4; 5], что делает актуальным исследование изменения упругих свойств решетки вблизи редкоземельного примесного центра. В данной работе рассмотрены примесные центры R^{3+} ($R = La, Ce, Pr, Nd, Pm, Gd, Yb, Lu$) во флюорите CaF_2 (рис. 1). Ранее локальная структура некоторых из них была исследована в оболочечной модели [6–8], в настоящее время имеется возможность провести *ab initio* расчет.

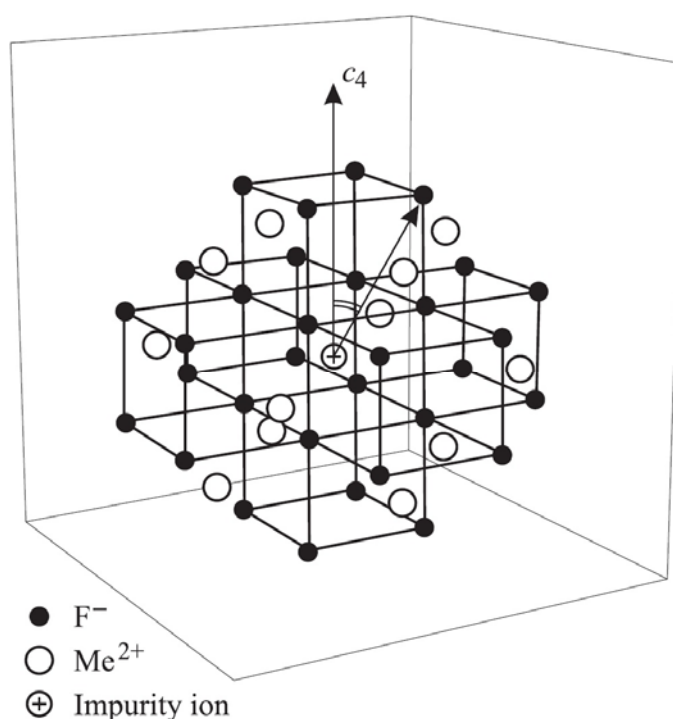


Рис. 1. Редкоземельный примесный центр в структуре флюорита CaF_2 . Рисунок из работы [6]

Fig. 1. The rare-earth impurity center in the structure of fluorite CaF_2 . The figure taken from [6]

В работе проведены *ab initio* расчеты кристаллической структуры данных примесных центров в рамках теории функционала плотности с гибридным функционалом PBE0 (Пердью – Бурке – Эйзернхофф (Perdew – Burke – Ernzerhof)) [9], учитывающим вклад нелокального обмена в формализме Хартри – Фока. Ранее было показано, что гибридные функционалы, учитывающие вклад нелокального обмена, позволяют хорошо описывать структуру и упругие свойства соединений с ионной и ионно-ковалентной связью [10; 11]. Расчеты проводились в программе CRYSTAL17¹, предназначенной для моделирования периодических структур.

¹ URL: <http://www.crystal.unito.it/index.php>

тур в рамках подхода МО ЛКАО (молекулярная орбиталь – линейная комбинация атомных орбиталей).

Для описания внутренних оболочек редкоземельных ионов были использованы квазирелятивистские псевдопотенциалы ECP n MWB (ECP – “effective core potential”; WB – “quasi-relativistic”, n – число внутренних электронов, замещаемых на псевдопотенциал) [12; 13]. Для La $n = 46$, для Ce $n = 47$ и т. д. Таким образом, внутренние оболочки редкоземельного иона, включая $4f$, были заменены на псевдопотенциал. Для описания внешних оболочек, $5s^2 5p^6$, участвующих в химической связи, были использованы валентные базисные наборы «ECP n MWB-I» [13–15], содержащие 11 радиальных функций s , p и d типа. Для Ca был использован псевдопотенциал ECP10MWB с присоединенным валентным базисным набором, что соответствует рассмотрению в качестве валентных $3s$ -, $3p$ -, $4s$ -орбиталей. Валентный базисный набор содержал 5 радиальных функций s , p и d типа. Псевдопотенциалы и валентные базисные наборы доступны на сайте Stuttgart Group². Гауссовы примитивы с показателями экспонент менее чем 0,1 были удалены из валентных базисных наборов, что характерно для периодических расчетов. Для фтора был использован полноэлектронный базисный набор [16], содержащий 4 радиальных функции s и p типа. Данный базисный набор доступен на сайте программы CRYSTAL. При расчетах проводилась оптимизация кристаллической структуры. Точность самосогласованного решения системы одноэлектронных уравнений Кона – Шэма была установлена 10^{-10} а.е. Точность расчета двухэлектронных интегралов была установлена не менее 10^{-7} а.е.

При релаксации кристаллической структуры используются следующие критерии. В стационарной точке на поверхности потенциальной энергии силы, действующие на атомы, равны нулю. Оптимизация считается завершенной, когда градиенты ниже порогового значения. В программе CRYSTAL сходимость оптимизации проверяется по среднеквадратичной величине градиента и абсолютному значению наибольшей компоненты. Среднеквадратичное значение градиента задавалось равным 0,00030 а.е., максимальное значение компоненты равным 0,00045 а.е. Кроме этого, в программе CRYSTAL оцениваются величины смещений также по среднеквадратичному значению и абсолютному значению наибольшего компонента. Для смещений они были заданы равными 0,0012 и 0,0018 а.е. Оптимизация считалась завершенной, когда все четыре условия выполнялись одновременно.

Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось по схеме Монкхорста – Пака с сеткой k -точек, равной $8 \times 8 \times 8$. Предварительно были проведены тестовые расчеты с различной частотой сетки для чистого кристалла CaF_2 , а также для кристалла, активированного редкоземельными ионами из начала и конца ряда $\text{CaF}_2 \cdot R^{3+}$ ($R = \text{La}, \text{Yb}, \text{Lu}$) (табл. 1–3). В тестовых расчетах был использован гибридный функционал PBE0. Согласно расчетам, частота сетки $8 \times 8 \times 8$ является вполне достаточной. Такая сетка была использована в данной работе. Для чистого CaF_2 результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом (табл. 4).

Программа CRYSTAL предназначена для моделирования периодических структур. При моделировании одиночных примесных центров в рамках периодического подхода постоянную решетки увеличивают, чтобы удалить примесные центры друг от друга. В данном случае при моделировании примесных центров постоянная решетки CaF_2 удваивалась (по сравнению с чистым кристаллом) во всех трех направлениях. Объем ячейки при этом возрастал в 8 раз. Наиболее важно при расчете структуры примесного центра определить расстояние «РЗ ион – лиганд», которое сложно получить из эксперимента, но именно оно является определяющим при расчете кристаллического поля на примесном ионе. Поэтому в работе были проведены тестовые расчеты с ячейкой, постоянная решетки которой была утроена по всем трем направлениям (объем ячейки при этом возрастал в 27 раз). Эти расчеты были выполнены для

² Energy-consistent Pseudopotentials of the Stuttgart / Cologne Group, 2019. URL: <http://www.tc.uni-koeln.de/PP/clickpse.en.html>

Таблица 1

CaF₂. Расчет при различной частоте сетки

Table 1

CaF₂. Calculation at various mesh densities

Частота сетки	Количество k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна	Постоянная решетки, Å	Ширина запрещенной щели, эВ
$2 \times 2 \times 2$	3	5,467170	12,0496
$4 \times 4 \times 4$	8	5,447303	12,0599
$6 \times 6 \times 6$	16	5,447320	12,0583
$8 \times 8 \times 8$	29	5,447320	12,0583
$10 \times 10 \times 10$	47	5,447320	12,0583
$12 \times 12 \times 12$	72	5,447320	12,0583

Таблица 2

CaF₂:R³⁺. Расстояние «редкоземельный ион – лиганд», Å.
Расчет при различной частоте сетки

Table 2

CaF₂:R³⁺. The distance “rare-earth ion – ligand”, Å.
The calculations at various mesh densities

Сетка	Количество k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна	La	Yb	Lu
$2 \times 2 \times 2$	4	2,404432	2,266641	2,260545
$4 \times 4 \times 4$	10	2,404433	2,266642	2,260595
$6 \times 6 \times 6$	20	2,404433	2,266642	2,260595
$8 \times 8 \times 8$	35	2,404433	2,266642	2,260595
$10 \times 10 \times 10$	56	2,404433	2,266642	2,260595
$12 \times 12 \times 12$	84	2,404433	2,266642	2,260595

Таблица 3

CaF₂:R³⁺. Угловые координаты ионов (в градусах) в третьей координационной сфере
(24 иона F). Приведен угол с осью OZ (C₄), обозначенный на рис. 2.
Расчет при различной частоте сетки

Table 3

CaF₂:R³⁺. The angular coordinates of the ions (degrees) in the third coordination sphere
(24 ions F). The angle with the axis OZ (C₄), it indicated in fig. 2.
The calculations at various mesh densities

Сетка	La	Yb	Lu
$2 \times 2 \times 2$	25,2921	25,3553	25,3588
$4 \times 4 \times 4$	25,2931	25,3553	25,3593
$6 \times 6 \times 6$	25,2931	25,3553	25,3593
$8 \times 8 \times 8$	25,2931	25,3553	25,3593
$10 \times 10 \times 10$	25,2931	25,3553	25,3593
$12 \times 12 \times 12$	25,2931	25,3553	25,3593

Таблица 4

CaF₂. Результаты расчета (PBE0, сетка $8 \times 8 \times 8$) и эксперимент

Table 4

CaF₂. The results of calculation (PBE0, grid is $8 \times 8 \times 8$) and the experiment

Показатель	Расчет	Эксперимент [17; 18]
Постоянная решетки, Å	5,45	5,44
Ширина запрещенной щели, Эв	12,06	12,1

Таблица 5

CaF₂:La³⁺. Расчет с удвоенной и утроенной постоянной решетки.

Расстояние «редкоземельный ион – лиганд» (Å), а также угловые координаты ионов (в градусах) в третьей координационной сфере (24 иона F). Приведен угол с осью OZ (C₄), обозначенный на рис. 2

Table 5

CaF₂:La³⁺. The calculations at double and triple lattice constant.

The “rare earth ion – ligand” (Å) distance, as well as the angular coordinates of the ions (in degrees) in the third coordination sphere (24 F ions). The angle with the axis OZ (C₄), it indicated at fig. 2

Сетка	Постоянная решетки удвоена			Постоянная решетки утроена		
	Количество k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна	«РЗ ион – лиганд»	Угол Θ	Количество k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна	«РЗ ион – лиганд»	Угол Θ
$4 \times 4 \times 4$	10	2,404433	25,2931	10	2,405609	25,3271
$6 \times 6 \times 6$	20	2,404433	25,2931	20	2,405316	25,3257
$8 \times 8 \times 8$	35	2,404433	25,2931	35	2,405447	25,3258

CaF₂:La³⁺ (табл. 5). Как показали расчеты, при утроении постоянной решетки расстояние «РЗ ион – лиганд» меняется на $\sim 0,001$ Å, угловые координаты ионов в третьей координационной сфере на $\sim 0,03^\circ$ по сравнению с результатами, полученными при удвоенной постоянной решетки (см. табл. 5). Расчет всего ряда редкоземельных примесных центров с утроенной ячейкой требует больших компьютерных затрат, поэтому расчеты в данной работе были проведены с удвоенной ячейкой.

Расчет чистого CaF₂ был проведен с различными гибридными функционалами – PBE0, B3LYP (трехпараметрический функционал Беке, Ли – Янга – Парра (Becke, Lee – Yang – Parr)), B3PW (Беке – Пердью – Ванга (Becke, Perdew, Wang)), PBESOL0 (вариант функционала Пердью – Бурке – Эйзернхоффа для периодических систем) [7; 19; 20]. Наиболее широкое применение из них имеет B3LYP. Функционалы PBE0 и PBESOL0 имеют долю нелокального обмена в формализме Хартри – Фока – 25 %, а B3LYP и B3PW – 20 %. Сравнение результатов расчета с экспериментом приведено на рис. 2. Функционалы с большей долей нелокального обмена (25 %) обеспечивают значительно лучшее согласие с экспериментом. Функционал PBE0 хорошо воспроизводит и постоянную решетки, и ширину запрещенной щели (расчеты позволили определить величину «НОМО – LUMO» («Highest Occupied Molecular Orbital – Lowest Unoccupied Molecular Orbital» – «высшая занятая молекулярная орбиталь – низшая вакантная молекулярная орбиталь»). Поэтому функционал PBE0 был использован в дальнейшем для расчетов примесных центров.

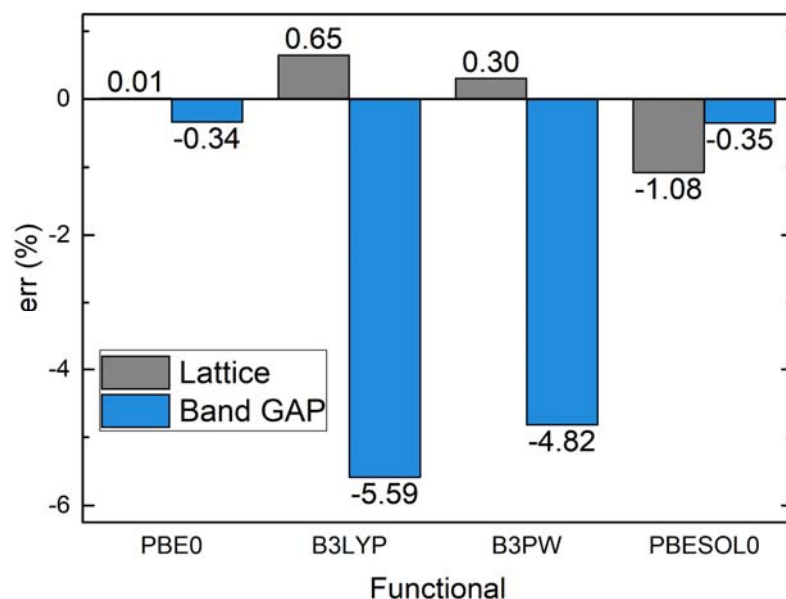


Рис. 2. Результаты расчетов постоянной решетки и ширины запрещенной зоны CaF_2 с различными гибридными функционалами. Приведено отклонение от экспериментальных величин (в %). Экспериментальное значение постоянной решетки – 5,44 Å [17], ширины запрещенной зоны – 12,1 Эв [18]

Fig. 2. The results of calculations of the lattice constant and the band gap of CaF_2 by various hybrid functionals. The deviations from the experimental values (at %) are given. The experimental value of the lattice constant is 5.44 Å [17], the band gap is 12.1 eV [18]

Редкоземельный ион R^{3+} замещает катион Ca^{2+} в структуре флюорита. Такое замещение происходит при образовании кубических примесных центров с нелокальной компенсацией избыточного заряда [6; 21; 22]. При моделировании примесных центров, как упоминалось выше, постоянная решетки была удвоена по всем направлениям, чтобы удалить примесные ионы друг от друга. Минимальное расстояние между примесными ионами при этом становится равным двум постоянным решетки чистого CaF_2 . Таким образом, к примесному иону можно отнести сферическую область с радиусом, равным половине этого расстояния, т. е. одной постоянной решетки чистого CaF_2 . Такая область содержит четыре координационных сферы. Первая координационная сфера состоит из 8 ионов F^- , вторая – из 12 ионов Ca^{2+} , третья – из 24 ионов F^- , четвертая – из 6 ионов Ca^{2+} . Ионы, принадлежащие одной координационной сфере, находятся на одном и том же расстоянии от примесного иона R^{3+} . Ионы первой координационной сферы (8 F) расположены в вершинах куба, поэтому ее можно охарактеризовать только расстоянием «РЗ ион – лиганд». Ионы второй координационной сферы (12 Ca) также характеризуются только радиальным расстоянием. Ионы третьей координационной сферы (24 F), кроме радиального расстояния, можно охарактеризовать еще и углом с осью C_4 (этот угол обозначен на рис. 1). Ионы четвертой координационной сферы (6 Ca) находятся в вершинах октаэдра, эта сфера также характеризуется только радиальным расстоянием. Радиусы координационных сфер в неискаженной решетке представлены на рис. 3. В табл. 6 приведены радиальные расстояния 1–4 координационных сфер в примесных центрах La и Lu, а также соответствующие радиальные расстояния в чистой решетке (для чистой решетки приведены результаты расчета).

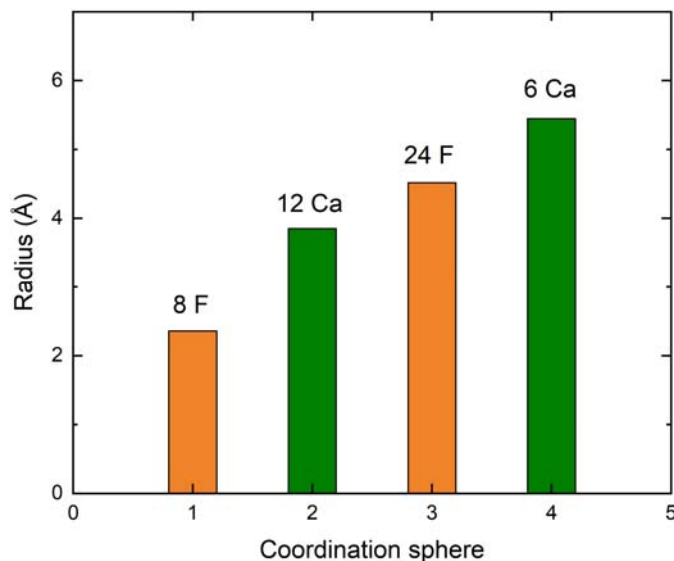


Рис. 3. Радиусы координационных сфер в неискаженной решетке CaF_2 . Для каждой сферы указано количество ионов и их тип

Fig. 3. The radii of the coordination spheres in the undistorted CaF_2 lattice. The number of ions and their type are indicated for each sphere

Радialные расстояния 1–4 координационных сфер в примесных центрах La, Lu и соответствующие радиальные расстояния в чистой решетке (Å)

Таблица 6

Table 6

The radial distances of 1–4 coordination spheres at La, Lu impurity centers and the same distances at the pure lattice (Å)

Координационная сфера	CaF_2 (чистая решетка)	$\text{CaF}_2:\text{La}^{3+}$	$\text{CaF}_2:\text{Lu}^{3+}$
1 (8 F)	2,359	2,404	2,261
2 (12 Ca)	3,852	3,923	3,874
3 (24 F)	4,517	4,509	4,480
4 (6 Ca)	5,447	5,440	5,422

Изменение расстояния от редкоземельного иона до ионов первой, второй и других координационных сфер по сравнению с чистой решеткой (радиальные смещения) для всего ряда приведено на рис. 4. Можно отметить, что в основном искажения локализованы в пределах первых трех координационных сфер. Редкоземельные ионы R^{3+} первой половины ряда вызывают расширение первой координационной сферы, состоящей из ионов фтора F^- . (Расстояние «редкоземельный ион – лиганд» увеличивается.) Ионы R^{3+} второй половины ряда вызывают сжатие первой координационной сферы, что согласуется с лантаноидным сжатием в ряду La-Lu.

Изменение угловых координат ионов в третьей координационной сфере, содержащей 24 иона F^- (черные кружки на рис. 1), приведено в табл. 7. Согласно расчетам, замещение Ca^{2+} на редкоземельный ион R^{3+} вызывает увеличение угла, которое возрастает от La к Lu.

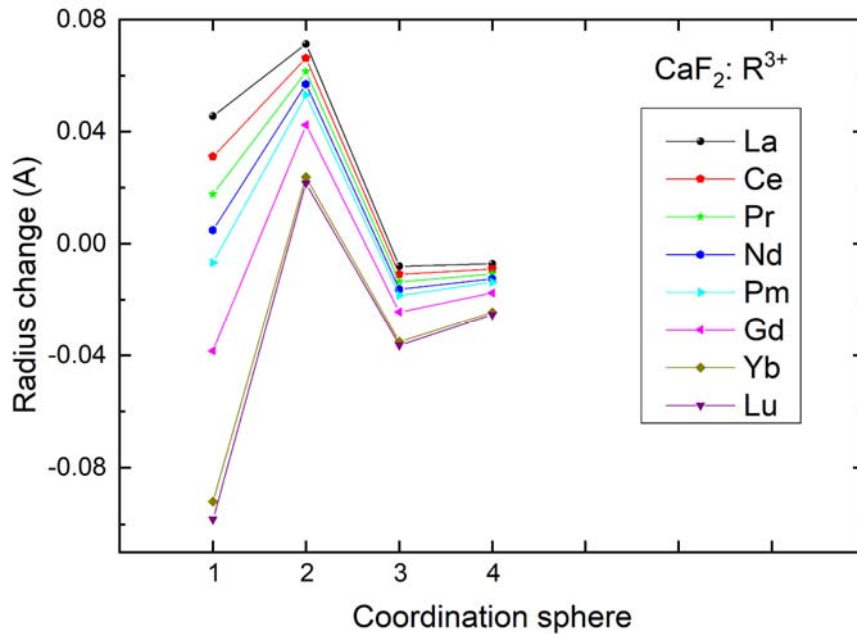


Рис. 4. Радиальные смещения ионов вблизи примесных центров R^{3+} в кристалле CaF_2 .

Показано изменение расстояния относительно чистой решетки.

Положительный знак соответствует увеличению расстояния

Fig. 4. The radial displacements of ions near to the impurity centers R^{3+} at the CaF_2 crystal.

The change of distance relative to a pure lattice is shown.

A positive sign corresponds to an increase of the distance

Таблица 7

Изменение угловых координат ионов (в градусах) в третьей координационной сфере
(24 иона F) *

Table 7

The change of angular coordinates of ions (in degrees) at the third coordination sphere
(24 F ions)

R	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Gd	Yb	Lu
$\Delta\theta$	+0,05	+0,06	+0,07	+0,07	+0,08	+0,10	+0,12	+0,12

* Положительный знак соответствует увеличению угла. Рассматривается угол с осью OZ (C_4), обозначенный на рис. 2. В чистом кристалле он равен $25,24^\circ$.

Из исследования кубических примесных центров Yb^{3+} в CaF_2 методом двойного электронно-ядерного резонанса [21] следует, что расстояние до третьей координационной сферы (ионы фтора) составляет $4,487(7) \text{ \AA}$. Согласно расчетам, это расстояние – $4,482 \text{ \AA}$. Такое согласие можно считать вполне удовлетворительным. При исследовании методом двойного электронно-ядерного резонанса примесных центров Gd^{3+} в CaF_2 [22] было установлено, что третья координационная сфера испытывает сжатие на $0,016(4) \text{ \AA}$. Расчет также предсказывает сжатие (см. рис. 4) на $0,024 \text{ \AA}$. Согласно экспериментальным данным [22], в третьей координационной сфере угол увеличивается на $0,33(4)^\circ$. Расчет (см. табл. 7) также предсказывает увеличение угла на $0,1^\circ$.

Локальную сжимаемость кристаллической решетки вблизи примесного центра можно охарактеризовать коэффициентом локальной сжимаемости [23]. Первая координационная сфера редкоземельного иона – 8 ионов F, вторая – 12 ионов Ca, третья – 24 иона F и т. д. Все ионы данной координационной сферы лежат на одной сферической поверхности. При приложении гидростатического давления объем сферы уменьшается. Можно ввести коэффициент локальной сжимаемости для данной сферы:

$$k_i = -\frac{1}{V_i(0)} \frac{V_i(P) - V_i(0)}{P},$$

где V_i – объем сферы; P – давление. Поскольку $V_i \sim r_i^3$, то

$$k_i = -\frac{1}{r_i^3(0)} \frac{r_i^3(P) - r_i^3(0)}{P}.$$

В работе был проведен расчет кристаллической структуры чистого CaF_2 при гидростатическом сжатии (1 GPa), что позволило рассчитать коэффициенты k_i для чистой решетки. Такой же расчет был проведен для допированного кристалла. Соответственно были получены коэффициенты k_i для допированного кристалла. Расчет проведен на примере примесного центра Yb^{3+} . Изменение коэффициентов k_i вблизи примеси приведено в табл. 8. Согласно расчетам, сжимаемость катионной подрешетки вблизи примесного иона меняется незначительно. Существенно уменьшается сжимаемость анионной подрешетки ($\sim 30\%$) но уже во второй фторовой сфере (это третья координационная сфера) отклонение коэффициента от чистой решетки уменьшается до $\sim 5\%$.

Таблица 8

Коэффициенты объемной сжимаемости
координационных сфер
вблизи примесного иона Yb^{3+} в кристалле CaF_2 *

Table 8

The coefficients of the volume compressibility
of coordination spheres near to an impurity Yb^{3+} ion
in the CaF_2 crystal

Координационная сфера	k
1 (F)	0,633
2 (Ca)	0,980
3 (F)	0,955
4 (Ca)	0,971

* Коэффициенты выражены в долях коэффициента объемной сжимаемости чистого CaF_2 .

Расчеты редкоземельных примесных центров R^{3+} в CaF_2 показали, что искажения кристаллической решетки локализованы в основном в пределах первых трех координационных сфер. Сжимаемость катионной подрешетки вблизи редкоземельного иона меняется незначительно ($\sim 5\%$), сжимаемость анионной подрешетки существенно уменьшается только в первой координационной сфере. Показано, что R^{3+} ионы из начала ряда ($R = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}$) вызывают расширение непосредственного окружения, а ионы из остальной части ряда ($\text{Pm}, \text{Gd}, \text{Yb}, \text{Lu}$) – сжатие. Максимальное увеличение расстояния «редкоземельный ион – лиганд» при $R = \text{La}$ составляет $\sim 0,04 \text{ \AA}$, максимальное уменьшение, при $R = \text{Lu}$, $\sim 0,09 \text{ \AA}$. Результаты

проведенных *ab initio* расчетов согласуются с экспериментальными данными и результатами, полученными ранее в оболочечной модели, что дополнительно говорит о применимости оболочечной модели для описания редкоземельных примесных центров и сложных кластеров, расчет которых из первых принципов потребовал бы очень больших затрат компьютерных ресурсов.

Список литературы

1. Vilejshikova E. V., Loiko P. A., Rachkovskay G. E., Zakharevich G. B., Yumashev K. V. Up-conversion luminescence in oxyfluoride glass-ceramics with $\text{PbF}_2\text{:}(\text{Yb}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{RE}^{3+})$ (RE = Tm, Ho, or Er) nanocrystals. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2016, vol. 83, no. 5, p. 1–7.
2. Zhang Z., Ma F., Guo X., Wang J., Qian X., Liu J., Liu J., Su L. Mid-infrared spectral properties and laser performance of Er^{3+} doped $\text{CaSr}_{1-x}\text{F}_2$ single crystals. *Optical Materials Express*, 2018, vol. 8, no. 12, p. 3820–3828.
3. Голодных Е. В. Обзор детекторов гамма-излучения для контроля положения ствола горизонтальной скважины // Вестник науки Сибири. 2013. Т. 1, вып. 7. С. 128–138.
4. Малашкевич Г. Е., Маханек А. Г., Семченко А. В., Гайшун В. Е., Мельниченко И. М., Подденежный Е. Н. Спектрально-люминесцентные свойства и структура оптических центров Eu- и Ce-Eu-содержащих кварцевых гель-стекол // ФТТ. 1999. Т. 41, вып. 2. С. 229–234.
5. Niyama E., Brito H., Cremona M., Teotonio E., Reyes R., Brito G., Felinto M. C. Synthesis and spectroscopic behavior of highly luminescent Eu^{3+} -dibenzoylmethanate (DBM) complexes with sulfoxide ligands. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and biomolecular spectroscopy*, 2005, vol. 61, no. 11, p. 2643–2649.
6. Никифоров А. Е., Захаров А. Ю., Чернышев В. А. Локальная структура примесных центров Gd^{3+} и Eu^{2+} в кристалле CdF_2 // ФТТ. 2004. Т. 46, вып. 9. С. 1588–1592.
7. Горлов А. Д., Чернышев В. А., Угрюмов М. Ю., Абросимов А. В. Локальная структура примесных центров Tm^{2+} и Yb^{3+} во фторидах MeF_2 (Me = Ca, Sr, Ba) // ФТТ. 2005. Т. 47, вып. 8. С. 1389–1391.
8. Chernyshev V. A., Gorlov A. D., Mekhonoshin A. A., Nikiforov A. E., Rokeakh A. I., Shashkin S. Yu., Zaharov A. Yu. Local structure of Gd^{3+} impurity center at cubic sites in fluorites. *Appl. Magn. Reson.*, 1998, vol. 14, no. 1, p. 37–49.
9. Perdew J. P., Ernzerhof M., Burke K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations. *J. Chem. Phys.*, 1996, vol. 105, p. 9982–9985.
10. Басалаев Ю. М., Гордиенко Н. И. Энергетическая зонная структура кристаллов Be-(C, Si, Ge, Sn)-N // Изв. вузов. Физика. 2017. Т. 60, вып. 5. С. 140–146.
11. Корабельников Д. В., Журавлев Ю. Н. Ab initio исследование упругих свойств хлоратов и перхлоратов // ФТТ. 2016. Т. 58, вып. 6. С. 1129–1134.
12. Dolg M., Stoll H., Savin A., Preuss H. Energy-adjusted pseudopotentials for the rare earth elements. *Theor. Chim. Acta*, 1989, vol. 75, no. 3, p. 173–194.
13. Dolg M., Stoll H., Preuss H. A combination of quasirelativistic pseudopotential and ligand field calculations for lanthanoid compounds. *Theor. Chim. Acta*, 1993, vol. 85, no. 6, p. 441–450.
14. Yang J., Dolg M. Valence basis sets for lanthanide 4f-in-core pseudopotentials adapted for crystal orbital ab initio calculations. *Theor. Chem. Acc.*, 2005, vol. 113, no. 4, p. 212–224.
15. Weigand A., Cao X., Yang J., Dolg M. Quasirelativistic f-in-core pseudopotentials and core-polarization potentials for trivalent actinides and lanthanides: molecular test for trifluorides. *Theor. Chem. Acc.*, 2009, vol. 126, no. 3–4, p. 117–127.
16. Nada R., Catlow C. R. A., Pisani C., Orlando R. Ab initio Hartree-Fock perturbed-cluster study of neutral defects in LiF. *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 1993, vol. 1, p. 165–187.

17. Sun X., Li Y. Size-controllable luminescent single crystal CaF_2 nanocubes. *Chem. Commun.*, 2003, vol. 14, p. 1768–1769.
18. Rubloff G. W. Far-Ultraviolet Reflectance Spectra and the Electronic Structure of Ionic Crystals. *Phys. Rev. B*, 1972, vol. 5, p. 662–683.
19. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J. Chem. Phys.*, 1993, vol. 98, p. 5648–5652.
20. Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C. M., Civalleri B., Maschio L., Rérat M., Casassa S., Baima J., Salustro S., Kirtman B. Quantum mechanical condensed matter simulations with CRYSTAL. *Comput. Mol. Science*, 2018, vol. 8, e1360.
21. Ramos C. A., Fainstein C., Tovar M. Ligand electron-nuclear double resonance of ^{19}F ions around Yb^{3+} impurities in fluorites. *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 32, p. 64–68.
22. Рокеах А. И., Мехоношин А. А., Легких Н. В., Батин А. М. Искажения кристаллической решетки в окрестности примесных центров Cd^{3+} в кристаллах CaF_2 и SrF_2 // ФТТ. 1995. Т. 37, вып. 10. С. 3135–3146.
23. Горлов А. Д., Гусева В. Б., Захаров А. Ю., Никифоров А. Е., Рокеах А. И., Чернышев В. А., Шашкин С. Ю. Локальные решеточные искажения и лигандные сверхтонкие взаимодействия во флюоритах с примесью Eu^{2+} и Gd^{3+} // ФТТ. 1998. Т. 40, вып. 12. С. 2172–2177.

References

1. Vilejshikova E. V., Loiko P. A., Rachkovskay G. E., Zakharevich G. B., Yumashev K. V. Up-conversion luminescence in oxyfluoride glass-ceramics with $\text{PbF}_2:(\text{Yb}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{RE}^{3+})$ ($\text{RE} = \text{Tm}, \text{Ho}, \text{or Er}$) nanocrystals. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2016, vol. 83, no. 5, p. 1–7.
2. Zhang Z., Ma F., Guo X., Wang J., Qian X., Liu J., Liu J., Su L. Mid-infrared spectral properties and laser performance of Er^{3+} doped $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}_2$ single crystals. *Optical Materials Express*, 2018, vol. 8, no. 12, p. 3820–3828.
3. Golodnykh E. V. Review of gamma radiation detectors for monitoring position of a horizontal bore. *Vestnik nauki Sibiri*, 2013, vol. 1, no. 7, p. 128–138. (in Russ.)
4. Malashkevich G. E., Makhanev A. G., Semchenko A. V., Gaishun V. E., Melnichenko I. M., Poddenezhnyi E. N. Luminescence-spectral properties and structure of optical centers in Eu- and Ce-Eu-containing quartz gel-glasses. *Fiz. Tverd. Tela*, 1999, vol. 41, no. 2, p. 229–234. (in Russ.)
5. Niyama E., Brito H., Cremona M., Teotonio E., Reyes R., Brito G., Felinto M. C. Synthesis and spectroscopic behavior of highly luminescent Eu^{3+} -dibenzoylmethanate (DBM) complexes with sulfoxide ligands. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and biomolecular spectroscopy*, 2005, vol. 61, no. 11, p. 2643–2649.
6. Nikiforov A. E., Zakharov A. Yu., Chernyshev V. A. Local structure of Gd^{3+} and Eu^{2+} impurity centers in a CdF_2 crystal. *Fiz. Tverd. Tela*, 2004, vol. 46, no. 9, p. 1588–1592. (in Russ.)
7. Gorlov A. D., Chernyshev V. A., Ugryumov M. Yu., Abrosimov A. V. Local structure of Tm^{2+} and Yb^{3+} impurity centers in MeF_2 ($\text{Me} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) fluoride crystals. *Fiz. Tverd. Tela*, 2005, vol. 47, no. 8, p. 1389–1391. (in Russ.)
8. Chernyshev V. A., Gorlov A. D., Mekhonoshin A. A., Nikiforov A. E., Rokeakh A. I., Shashkin S. Yu., Zaharov A. Yu. Local structure of Gd^{3+} impurity center at cubic sites in fluorites. *Appl. Magn. Reson.*, 1998, vol. 14, no. 1, p. 37–49.
9. Perdew J. P., Ernzerhof M., Burke K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations. *J. Chem. Phys.*, 1996, vol. 105, p. 9982–9985.
10. Basalaeu Yu. M., Gordienok N. I. Energy band structure of Be-(C, Si, Ge, Sn)- N_2 crystals. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Fizika*, 2017, vol. 60, no. 5, p. 140–146. (in Russ.)

11. **Korabelnikov D. V., Zhuravlev Y. N.** Ab initio investigations of the elastic properties of chlorates and perchlorates. *Fiz. Tverd. Tela*, 2016, vol. 58, no. 6, p. 1129–1134. (in Russ.)
12. **Dolg M., Stoll H., Savin A., Preuss H.** Energy-adjusted pseudopotentials for the rare earth elements. *Theor. Chim. Acta*, 1989, vol. 75, no. 3, p. 173–194.
13. **Dolg M., Stoll H., Preuss H.** A combination of quasirelativistic pseudopotential and ligand field calculations for lanthanoid compounds. *Theor. Chim. Acta*, 1993, vol. 85, no. 6, p. 441–450.
14. **Yang J., Dolg M.** Valence basis sets for lanthanide 4f-in-core pseudopotentials adapted for crystal orbital ab initio calculations. *Theor. Chem. Acc.*, 2005, vol. 113, no. 4, p. 212–224.
15. **Weigand A., Cao X., Yang J., Dolg M.** Quasirelativistic f-in-core pseudopotentials and core-polarization potentials for trivalent actinides and lanthanides: molecular test for trifluorides. *Theor. Chem. Acc.*, 2009, vol. 126, no. 3–4, p. 117–127.
16. **Nada R., Catlow C. R. A., Pisani C., Orlando R.** Ab initio Hartree-Fock perturbed-cluster study of neutral defects in LiF. *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 1993, vol. 1, p. 165–187.
17. **Sun X., Li Y.** Size-controllable luminescent single crystal CaF₂ nanocubes. *Chem. Commun.*, 2003, vol. 14, p. 1768–1769.
18. **Rubloff G. W.** Far-Ultraviolet Reflectance Spectra and the Electronic Structure of Ionic Crystals. *Phys. Rev. B*, 1972, vol. 5, p. 662–683.
19. **Becke A. D.** Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J. Chem. Phys.*, 1993, vol. 98, p. 5648–5652.
20. **Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C. M., Civalieri B., Maschio L., Rérat M., Casassa S., Baima J., Salustro S., Kirtman B.** Quantum mechanical condensed matter simulations with CRYSTAL. *Comput. Mol. Science*, 2018, vol. 8, e1360.
21. **Ramos C. A., Fainstein C., Tovar M.** Ligand electron-nuclear double resonance of 19F ions around Yb³⁺ impurities in fluorites. *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 32, p. 64–68.
22. **Rokeakh A. I., Mekhonoshin A. A., Legkikh N. V., Batin A. M.** Distortion of crystalline lattice in the vicinity of Cd³⁺ impure centers in CaF₂ and SrF₂ crystals. *Fiz. Tverd. Tela*, 1995, vol. 37, no. 10, p. 3135–3146. (in Russ.)
23. **Gorlov A. D., Guseva V. B., Zakharov A. Yu., Nikiforov A. E., Rokeakh A. I., Chernyshev V. A., Shashkin S. Yu.** Local lattice distortions and ligand hyperfine interactions in Eu²⁺ and Gd³⁺ doped fluorites. *Fiz. Tverd. Tela*, 1998, vol. 40, no. 12, p. 2172–2177. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию

Received
14.11.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Чернышев Владимир Артурович, кандидат физико-математических наук, доцент, Уральский федеральный университет (Екатеринбург, Россия)

Vladimir A. Chernyshev, Candidate of Science (Physics and Mathematics), Docent, Ural Federal University (Ekaterinburg, Russian Federation)

vchern@inbox.ru

Архипов Андрей Владимирович, студент, Уральский федеральный университет (Екатеринбург, Россия)

Andrey V. Arkhipov, Student, Ural Federal University (Ekaterinburg, Russian Federation)

hemae2468@gmail.com

УДК 543.427.41:581.192

DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-103-117

**Сравнительный анализ элементного состава
представителей рода *Dasiphora* из Приморского края
и Республики Бурятия**

**Е. В. Андышева¹, О. В. Чанкина², Е. П. Храмова³, П. В. Крестов⁴
Я. В. Ракшун⁵, Д. С. Сороколетов⁵**

¹ Амурский филиал Ботанического сада-института ДВО РАН
Благовещенск, Россия

² Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН
Новосибирск, Россия

³ Центральный сибирский ботанический сад СО РАН
Новосибирск, Россия

⁴ Ботанический сад-институт ДВО РАН
Владивосток, Россия

⁵ Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

Аннотация

Представлены результаты определения элементного состава в надземных органах растений четырех видов рода *Dasiphora* – *D. fruticosa*, *D. parvifolia*, *D. gorovoi*, *D. mandshurica* из Приморского края и Республики Бурятия. Проведен сравнительный анализ с ранее изученными представителями этого рода – *D. davurica* и *D. davurica* var. *flava*. Методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения в надземных органах и почвах из точек отбора установлено содержание 21 элемента. Впервые установлен состав и содержание элементов нового вида *D. gorovoi* из локального местообитания. Наибольшее накопление макроэлементов (К и Са) отмечено в надземных органах *D. davurica* и *D. davurica* var. *flava*, микроэлементов – в надземных органах *D. gorovoi*, *D. mandshurica*, *D. fruticosa*. Показано, что каждому виду свойственны определенные концентрации элементов.

Ключевые слова

элементный состав, синхротронное излучение, *Dasiphora*, Rosaceae, российский Дальний Восток, Восточная Сибирь

Источник финансирования

Работа выполнена в рамках реализации государственного задания Ботанического сада-института ДВО РАН «Оценка современного биологического разнообразия и ресурсного потенциала флоры Восточной Азии» АААА-А17-117021310193-7» и государственного задания Центрального сибирского ботанического сада СО РАН «Оценка морфогенетического потенциала популяций растений Северной Азии экспериментальными методами». При использовании оборудования ЦКП СЦСТИ на базе ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН, поддержанного Минобрнауки России (уникальный идентификатор проекта RFMEFI62117X0012).

Для цитирования

Андышева Е. В., Чанкина О. В., Храмова Е. П., Крестов П. В., Ракшун Я. В., Сороколетов Д. С. Сравнительный анализ элементного состава представителей рода *Dasiphora* из Приморского края и Республики Бурятия // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 103–117. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-103-117

Comparative Study of Element Composition of Species of the Genus *Dasiphora* (Rosaceae) in the Primorsky Region and Republic of Buryatia

E. V. Andysheva¹, O. V. Chankina², E. P. Khramova³, P. V. Krestov⁴
Ya. V. Rakshun⁵, D. S. Sorokoletov⁵

¹ Amur branch of Botanical Garden – Institute FEB RAS
Blagoveschensk, Russian Federation

² Institute of Chemical Kinetics & Combustion SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

³ Central Siberian Botanical Garden SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

⁴ Botanical Garden-Institute FEB RAS
Vladivostok, Russian Federation

⁵ Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

Abstract

Element composition was determined in the aboveground organs (leaves and stems) of plants of four species of the genus *Dasiphora*: *D. fruticosa*, *D. parvifolia*, *D. mandshurica*, *D. gorovoi* grown in the Primorsky Territory and Republic of Buryatia. The results were compared with two taxa (*D. davurica* and the variety *D. davurica* var. *flava*) which had been studied earlier. Content of 21 elements in the aboveground organs and samples of soil from sites of the plant collection was analysed by the method of X-ray fluorescence analysis using synchrotron radiation (SRXRF). For the first time, composition and content of the elements were determined for a new taxon *D. gorovoi*. The highest total content of the macroelements (K, Ca) was found in the aboveground organs of the two taxa: *D. davurica* and *D. davurica* var. *flava*; the highest content of the microelements was determined in the aboveground organs of *D. gorovoi*, *D. mandshurica*, and *D. fruticosa*. We found that each species had a characteristic concentration of elements.

Keywords

element composition, X-ray analysis using synchrotron radiation, *Dasiphora*, Rosaceae, Russian Far East, Eastern Siberia

Funding

The part of the work was done using the infrastructure of the Shared research facility “Siberian Synchrotron and Terahertz Radiation Center (SSTRC)” based on complex “VEPP-3” of BINP SB RAS, with the support of the Ministry of Education and Science of Russia (unique identifier of the project RFMEFI62117X0012), as well as part of the state assignment of the Botanical Garden-Institute FEB RAS “Assessment of modern biological diversity and resource potential of the flora of East Asia” № AAAA-A17-117021310193-7, and as part of the state assignment of the CSBG SB RAS “Estimation of the morphogenetic potential of plant populations of North Asia using experimental methods”

For citation

Andysheva E. V., Chankina O. V., Khramova E. P., Krestov P. V., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S. Comparative Study of Element Composition of Species of the Genus *Dasiphora* (Rosaceae) in the Primorsky Region and Republic of Buryatia. *Siberian Journal of Physics*, 2019, vol. 14, no. 4, p. 103–117. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-103-117

Род *Dasiphora* Raf. (= *Pentaphylloides* Hill.) из семейства Rosaceae в азиатской части России представлен пятью видами: *D. fruticosa* (L.) Rydb., *D. parvifolia* (Fisch. ex Lehm.) Juz., *D. mandshurica* (Maxim.) Juz., *D. gorovoi* Pshennikova, *D. davurica* (Nestler) Kom. и разновидностью – *D. davurica* var. *flava* (Vorosch.) Gorovoj, Pshenn. et S. Volkova, которая была описана в 2014 г. Л. М. Пшенниковой, и, по мнению автора, заслуживает видового ранга. Таксон *D. gorovoi* также является сравнительно новым видом, который возник в результате естественной гибридизации между *D. mandshurica* и *D. davurica* [1–3].

В литературе наиболее широко представлены исследования состава и содержания химических элементов одного вида – *D. fruticosa*, произрастающего в естественных местообитаниях и условиях интродукции [4–10]. Имеются сведения о составе и содержании химических

элементов для четырех видов рода *Dasiphora* из Западной Сибири, два из которых взяты из природных ценоотических популяций – *D. fruticosa*, *D. parvifolia*, а два других вида выращены в условиях интродукции в ЦСБС СО РАН – *D. davurica*, *D. mandshurica* [6], а также исследования по элементному составу пяти таксонов рода *Dasiphora*: *D. fruticosa* – из Амурской и Магаданской областей и Забайкалья, *D. mandshurica*, *D. davurica*, *D. x davurica* sp. – из Приморского края, *D. gorovoi* – из интродукционной популяции БСИ ДВО РАН [11].

В связи с фрагментарным изучением состава и содержания элементов у представителей рода *Dasiphora*, произрастающих в азиатской части России, исследование растений из новых местообитаний позволит уточнить и выявить новые закономерности накопления элементов разными видами растений и расширить базу данных по химическому составу растений.

Цель работы заключалась в определении состава и содержания элементов в надземных органах четырех представителей видов рода *Dasiphora* из природных популяций Приморского края и Республики Бурятия для выявления их связи с таксономическим положением видов рода *Dasiphora* и расширения базы данных.

Материалы и методы

Материалом исследования служили образцы четырех видов – *D. fruticosa*, *D. mandshurica*, *D. gorovoi* и *D. parvifolia*, собранные в 2014 г. в природных популяциях Приморского края и Республики Бурятия. Образцы *D. fruticosa* собраны в природной популяции с горы Ольховая, *D. mandshurica* – в популяции Дальнегорского района вблизи поселка Рудная Пристань, *D. gorovoi* – из локального местообитания в Ольгинском районе Приморского края, *D. parvifolia* – из природного местообитания близ поселка Калинишна в Республике Бурятия. Дополнительно для анализа взяты образцы двух таксонов – *D. davurica* и *D. davurica* var. *flava* (= *Pentaphylloides x davurica* sp.), из природных популяций, произрастающих на горе Брат Партизанского района и в мраморном карьере в Ольгинском районе Приморского края, которые были изучены нами ранее [11] (рис. 1). Для анализа брали репрезентативные пробы листьев и стеблей с 20–30 особей и почвы из каждого местообитания.

Для определения элементного состава в растительном материале используются разные методы: наиболее часто – атомно-абсорбционный анализ (ААА), масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (МС-ИСП) и атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП), реже – нейтронно-активационный анализ (НАА), рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) и конфокальная рентгеновская микроскопия (КРН). При этом методу РФА свойственен ряд преимуществ: неdestructивность, панорамность, возможность использования малых навесок, относительно несложная пробоподготовка [12; 13]. При исследовании достаточно редких и новых видов растений, по которым у исследователя имеется ограниченное количество материала, особенно важна неdestructивность, возможность использования малых навесок и повторного определения образца, в том числе для анализа другими методами. Кроме того, растительный материал является наиболее сложным объектом в плане селективности, содержание элементов варьирует в широком диапазоне (различия достигает нескольких порядков), а все эти методы подразумевают химическое или термическое воздействие на пробу, что не исключает потерю элементов при вскрытии или загрязнение материала реактивами. Метод РФА предполагает только механическое воздействие на образец (растирание и прессование), полученные при этом данные имеют минимальные погрешности [14]. Таким образом, для решения наших задач по определению элементов в образцах достаточно редких растений из локальных местообитаний наиболее приемлем метод рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения (РФА СИ). Измерения образцов проводились на оборудовании ЦКП СЦСТИ на базе ВЭПП-3 ИЯФ СО РАН (Новосибирск) при энергии возбуждающего излучения 23 кэВ. Концентрацию элементов определяли методом «внешнего стандарта». В качестве образцов сравнения исполь-

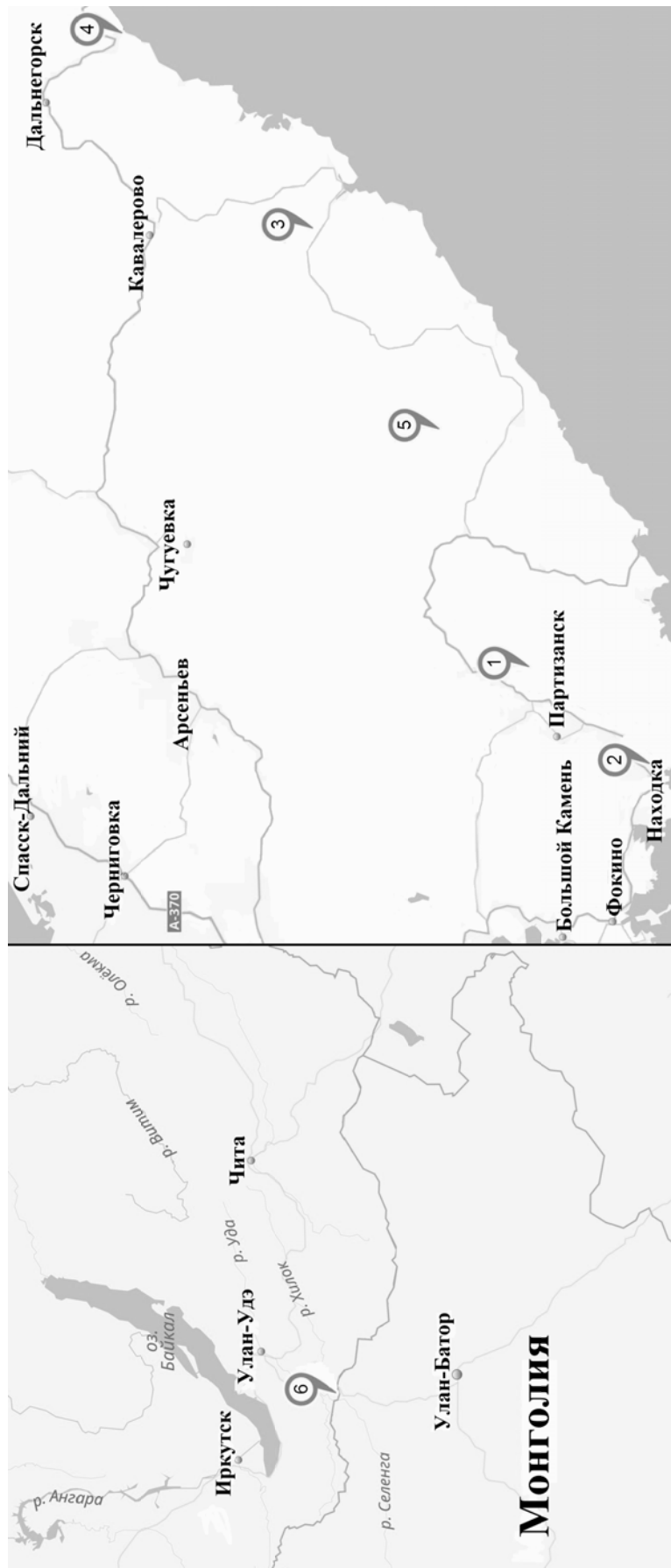


Рис. 1. Схема сбора образцов растений рода *Dasiphora* в природных популяциях из разных местообитаний:
 1 – *D. fruticosa*; 2 – *D. davurica*; 3 – *D. davurica* var. *flava*; 4 – *D. mandshurica*; 5 – *D. gorovoi*; 6 – *D. parvifolia*
 Fig. 1. The scheme of specimen collections of the genus *Dasiphora* in the nature populations of different habitats:
 1 – *D. fruticosa*; 2 – *D. davurica*; 3 – *D. davurica* var. *flava*; 4 – *D. mandshurica*; 5 – *D. gorovoi*; 6 – *D. parvifolia*

зовали российские стандарты травно-злаковой смеси ГСО СОРМ1 и байкальского ила БИЛ-1 [15]. Точность результатов анализа, полученная путем 10 параллельных измерений 5 одинаковых образцов, для большинства элементов составляла от 3 до 24 %, для Ni, Nb, Zr и Cr – 42–66 %. Возможности метода РФА СИ, конструкция станции и измерительного комплекса описаны в работах [16; 17]¹.

Результаты и обсуждение

В результате исследования в надземных органах растений четырех видов рода *Dasiphora* и почвах из точек отбора их образцов установлено содержание не менее 21 элемента (табл. 1, 2).

Для оценки изменчивости накопления элементов в почвах из точек отбора рассчитан геохимический диапазон (ГД) элементов, предложенный Н. С. Касимовым и Д. В. Власовым (2015), равный отношению максимального и минимального значения содержания элемента. В соответствии с методическими указаниями авторов [18] изменчивость содержания элементов в почвах разделяется на три группы – элементы с минимальным уровнем ГД ($\leq 2,5$), со средним уровнем (2,5–5,0) и с высоким уровнем ГД ($> 5,0$).

Сравнительный анализ образцов почвы из разных мест обитания показал, что содержание большинства элементов – Ca, V, Ni, Mn, Fe, Br, Zr, Co, Rb, Mo, Nb, Y, Sr и Zn – изменяется в широком диапазоне (ГД $> 5,0$). Средний диапазон изменчивости (2,5–5,0) характерен для элементов Ti, V, As, Cu, и только для K отмечена наименьшая изменчивость (ГД $\leq 2,5$), что свидетельствует о схождении содержания данного элемента в почвах из всех точек отбора (рис. 2). Установлено, что образцы почв из местообитаний *D. davurica* и *D. davurica* var. *flava* выделяются по высокому содержанию Ca (534 086–783 047 ppm). Почвы из местообитаний *D. fruticosa* отличаются повышенным содержанием Ti, Fe, Cr, Ni, Co, *D. gorovoi* – Mn, Pb, Zn, Rb, Br, Nb, *D. parvifolia* – Zr, *D. mandshurica* – Mo (см. табл. 1).

Анализ данных показал, что наибольшее суммарное содержание макроэлементов (K, Ca) свойственно листьям и стеблям *D. davurica* и ее разновидности *D. davurica* var. *flava* (23 167–31 349 ppm) в основном за счет повышенного содержания Ca (15 095–23 878 ppm), что согласуется с его сравнительно высоким содержанием в почвах из точек отбора образцов (534 086–783 047 ppm) [11]. При этом накопление K остается практически на одном уровне (см. табл. 1, рис. 3). Наименьшее суммарное содержание макроэлементов установлено в листьях *D. mandshurica* из окрестностей поселка Рудная Пристань (13 576 ppm), что также согласуется с минимальным содержанием K и Ca в почвах (19 126 ppm) отбора образцов данного вида, а также в стеблях *D. fruticosa* с горы Ольховая Приморского края (15 195 ppm). В листьях и стеблях растений *D. gorovoi* (23 701–16 999 ppm), *D. parvifolia* (18 267–20 268 ppm) и листьях *D. fruticosa* (21 159 ppm) сумма макроэлементов варьирует на среднем уровне. Следует отметить, что в листьях и стеблях *D. gorovoi* на фоне значительного содержания Ca (14 884 и 14 323 ppm соответственно), концентрация данного элемента в почвах (4 398 ppm) является минимальной по сравнению с точками отбора из остальных местообитаний растений (см. табл. 1, рис. 3).

Наибольшее суммарное содержание микроэлементов установлено в стеблях по сравнению с листьями (рис. 4). Выявлены различия в суммарном накоплении микроэлементов в растениях разных видов. Максимум отмечен в стеблях растений *D. mandshurica* (2 435 ppm), *D. gorovoi* (2 009 ppm) и *D. fruticosa* (1 937 ppm), что в 2,3–3 раза выше по сравнению с их содержанием в стеблях *D. parvifolia* (830 ppm) и на порядок выше, чем в стеблях *D. davurica* var. *flava* (233 ppm) (см. рис. 4). Максимум суммы микроэлементов в листьях установлен для образцов *D. gorovoi* из локального местообитания (1 222 ppm), что в 1,8–2,5 раза выше, чем в листьях образцов *D. fruticosa* (465 ppm), *D. mandshurica* (507 ppm) и *D. parvifolia* (645 ppm), и в 3–6 раз больше, чем в листьях *D. davurica* (398 ppm) и *D. davurica* var. *flava* (215 ppm).

¹ См. также: <http://ssrc.inp.nsk.su/CKP/stations/passport/3/>.

Таблица 1

Содержание химических элементов в почвах из разных точек отбора образцов (С, ppm)

Table 1

Content of the chemical elements in the soil from different the sampling sites (C, ppm)

Элемент	<i>D. fruticosa</i>	<i>D. parvifolia</i>	<i>D. mandshurica</i>	<i>D. gorovoi</i>	<i>D. davurica</i> *	<i>D. davurica</i> var. <i>flava</i>
K	8522 ± 767 ¹	16687 ± 1502	13031 ± 1173	18585 ± 1673	13746 ± 1237	11110 ± 1000
Ca	24983 ± 2748	22946 ± 2524	6095 ± 670	4398 ± 484	534086 ± 58749	783047 ± 86135
Ti	2683 ± 429	2387 ± 382	2457 ± 393	1830 ± 293	877 ± 140	502 ± 80
Fe	81584 ± 4079	16760 ± 838	25033 ± 1252	17334 ± 867	7665 ± 383	4334 ± 217
V	69 ± 12	59 ± 11	69 ± 12	70 ± 13	21 ± 4	13 ± 2
Cr	559 ± 369	20 ± 13	42 ± 28	36 ± 24	7 ± 5	6 ± 4
Mn	1758 ± 141	326 ± 26	392 ± 31	3006 ± 241	243 ± 19	109 ± 9
Co	37 ± 12	8 ± 3	11 ± 3	8 ± 3	4,2 ± 1,3	2,8 ± 0,8
Ni	600 ± 360	13 ± 8	17 ± 10	7 ± 4	14 ± 8	12 ± 7
Cu	16 ± 1	16 ± 1	21 ± 2	15 ± 1	13 ± 1	6,0 ± 0,5
Zn	106 ± 8	46 ± 4	130 ± 10	191 ± 15	70 ± 6	22 ± 2
As	6,6 ± 1,4	1,8 ± 0,4	4,3 ± 0,9	4 ± 1	6,9 ± 1,4	н. о.
Se	–	–	–	–	0,03 ± 0,01	н. о.
Br	21 ± 2	1,1 ± 0,1	13 ± 1	50 ± 5	5,0 ± 0,5	1,4 ± 0,1
Rb	62 ± 4	84 ± 5	75 ± 5	118 ± 7	19 ± 1	9,1 ± 0,5
Sr	62 ± 5	483 ± 39	84 ± 7	105 ± 8	179 ± 14	560 ± 45
Y	11 ± 1	21 ± 2	110 ± 8	109 ± 8	11,3 ± 0,8	12,7 ± 0,9
Zr	96 ± 9	479 ± 43	127 ± 11	252 ± 23	46 ± 4	28 ± 3
Nb	9 ± 4	11 ± 5	16 ± 7	18 ± 8	3,4 ± 15	1,8 ± 0,8
Mo	н. о.	1,2 ± 0,1	18 ± 0,2	0,54 ± 0,06	0,16 ± 0,02	н. о.
Pb	41 ± 13	39 ± 12	111 ± 34	221 ± 69	17 ± 5	17,6 ± 5,4

Примечание: * – по Храмовой и др., 2015 г.; ¹ – среднее значение ± стандартное отклонение; прочерк означает, что элемент не определяли; н. о. – концентрация элемента ниже предела обнаружения (0,01 ppm).

Таблица 2

Содержание элементов в наземных органах видов рода *Dasiphora* из природных местообитаний (С, ppm)

Table 2

Content of the elements in the aboveground organs of species of the genus *Dasiphora* from natural habitats (C, ppm)

Элемент	Орган растения	<i>D. fruticosa</i>	<i>D. parvifolia</i>	<i>D. mandshurica</i>	<i>D. gorovoi</i>	<i>D. davurica</i> *	<i>D. davurica</i> var. <i>flava</i> *
К	листья	9903 ± 891	7815 ± 703	6393 ± 575	8817 ± 794	7471 ± 672	9537 ± 858
	стебли	3936 ± 354	9344 ± 841	5380 ± 484	2676 ± 241	8072 ± 727	9462 ± 852
Ca	листья	11257 ± 1238	10453 ± 1150	7183 ± 790	14884 ± 1637	23878 ± 2627	17949 ± 1974
	стебли	11259 ± 1239	10924 ± 1202	12727 ± 1400	14323 ± 1575	15095 ± 1660	16039 ± 1764
Ti	листья	18 ± 3	41 ± 7	8 ± 1	15 ± 2	19 ± 3	–
	стебли	129 ± 21	76 ± 12	125 ± 20	123 ± 20	73 ± 12	2,6 ± 0,4
Fe	листья	162 ± 8	294 ± 15	100 ± 5	165 ± 8	256 ± 13	48 ± 2
	стебли	1325 ± 66	391 ± 20	1409 ± 70	676 ± 34	643 ± 32	65 ± 3
V	листья	0,5 ± 0,1	0,41 ± 0,07	0,36 ± 0,07	0,50 ± 0,09	0,6 ± 0,1	0,22 ± 0,04
	стебли	2,1 ± 0,4	0,96 ± 0,17	1,6 ± 0,3	2,0 ± 0,4	1,3 ± 0,2	0,32 ± 0,06
Cr	листья	22 ± 14	–	2,2 ± 1,4	20 ± 13	–	0,6 ± 0,4
	стебли	30 ± 20	99 ± 66	16 ± 11	241 ± 159	2,9 ± 1,9	0,7 ± 0,5
Mn	листья	142 ± 11	100 ± 8	255 ± 20	623 ± 50	52 ± 4	67 ± 5
	стебли	196 ± 16	74 ± 6	411 ± 33	385 ± 31	62 ± 5	65 ± 5
Co	листья	0,12 ± 0,04	0,08 ± 0,02	0,02 ± 0,01	0,08 ± 0,03	0,09 ± 0,03	0,05 ± 0,01
	стебли	0,6 ± 0,2	0,11 ± 0,03	0,5 ± 0,2	0,15 ± 0,05	0,14 ± 0,04	0,06 ± 0,02
Ni	листья	25 ± 15	1,3 ± 0,8	0,18 ± 0,11	1,7 ± 1,0	0,8 ± 0,5	0,7 ± 0,4
	стебли	46 ± 28	2,02 ± 1,21	4,7 ± 2,8	3,3 ± 2,0	1,3 ± 0,8	0,7 ± 0,4
Cu	листья	5,3 ± 0,5	3,8 ± 0,3	4,4 ± 0,4	4,5 ± 0,4	3,6 ± 0,3	6,4 ± 0,6
	стебли	7,5 ± 0,7	4,6 ± 0,4	11 ± 1	6,2 ± 0,6	6,3 ± 0,6	8,2 ± 0,7
Zn	листья	43 ± 3	14 ± 1	32 ± 3	226 ± 18	19 ± 2	38 ± 3
	стебли	82 ± 7	26 ± 2	141 ± 11	257 ± 21	37 ± 3	36 ± 3
As	листья	0,03 ± 0,01	–	0,09 ± 0,02	–	0,15 ± 0,03	н. о.
	стебли	0,05 ± 0,01	–	0,36 ± 0,07	–	0,14 ± 0,03	0,03 ± 0,01
Se	листья	н. о.	–	–	–	0,06 ± 0,02	–
	стебли	0,07 ± 0,02	–	н. о.	–	0,08 ± 0,02	н. о.
Br	листья	3,3 ± 0,3	0,49 ± 0,05	17,9 ± 1,8	6,6 ± 0,7	1,9 ± 0,2	1,0 ± 0,1
	стебли	2,9 ± 0,3	1,0 ± 0,1	17,0 ± 1,7	2,9 ± 0,3	1,5 ± 0,2	0,72 ± 0,07

Элемент	Орган растения	<i>D. fruticosa</i>	<i>D. parvifolia</i>	<i>D. mandshurica</i>	<i>D. gorovoi</i>	<i>D. davurica</i> *	<i>D. davurica</i> var. <i>flava</i> *
Rb	листья	7,9 ± 0,5	4,0 ± 0,2	2,1 ± 0,1	22,1 ± 1,3	3,8 ± 0,2	7,5 ± 0,5
	стебли	5,7 ± 0,3	5,6 ± 0,3	4,0 ± 0,2	10,3 ± 0,6	5,9 ± 0,4	7,5 ± 0,5
Sr	листья	31 ± 2	94 ± 8	72 ± 6	48 ± 4	28 ± 2	42 ± 3
	стебли	61 ± 5	132 ± 11	153 ± 12	73 ± 6	39 ± 3	43 ± 3
Y	листья	0,08 ± 0,01	3,7 ± 0,3	9,8 ± 0,7	80 ± 6	1,17 ± 0,08	0,30 ± 0,02
	стебли	2,7 ± 0,2	1,4 ± 0,1	10,8 ± 0,8	155 ± 11	3,9 ± 0,3	0,09 ± 0,01
Zr	листья	1,2 ± 0,1	83 ± 7	1,2 ± 0,1	1,2 ± 0,1	1,7 ± 0,1	0,40 ± 0,04
	стебли	20 ± 2	9,7 ± 8,7	58 ± 5	18,2 ± 1,6	10,6 ± 0,9	0,41 ± 0,04
Nb	листья	3,5 ± 1,5	1,6 ± 0,7	—	0,5 ± 0,2	1,5 ± 0,6	0,9 ± 0,4
	стебли	10,4 ± 4,4	2,08 ± 0,90	10,3 ± 4,4	1,96 ± 0,84	5,0 ± 2,2	1,21 ± 0,52
Mo	листья	н. о.	0,20 ± 0,02	0,09 ± 0,01	0,14 ± 0,02	0,27 ± 0,03	0,70 ± 0,08
	стебли	0,17 ± 0,02	0,15 ± 0,02	0,040 ± 0,004	0,09 ± 0,01	0,20 ± 0,02	0,19 ± 0,02
Pb	листья	0,6 ± 0,2	2,4 ± 0,7	0,8 ± 0,2	5,9 ± 1,9	8,2 ± 2,5	0,5 ± 0,2
	стебли	15,2 ± 4,7	3,7 ± 1,1	61 ± 19	54 ± 17	2,6 ± 0,8	1,1 ± 0,3

Примечание: * — по Храмовой и др., 2015 г.; ¹ — среднее значение ± стандартное отклонение; прочерк означает, что элемент не определяли; н. о. — концентрация элемента ниже предела обнаружения (0,01 ppm).

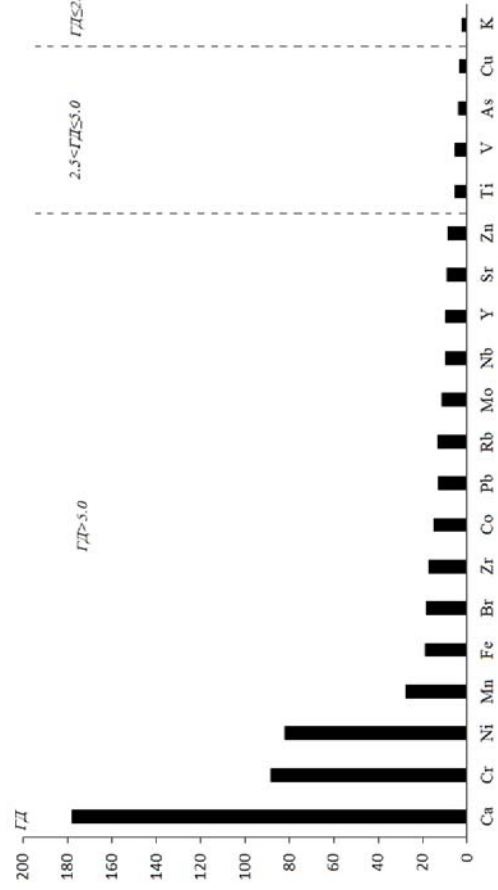


Рис. 2. Геохимический диапазон (ГД) содержания химических элементов в образцах почвы из разных точек отбора

Fig. 2. The geochemical range (GR) content of the chemical elements in the soil from different the sampling sites

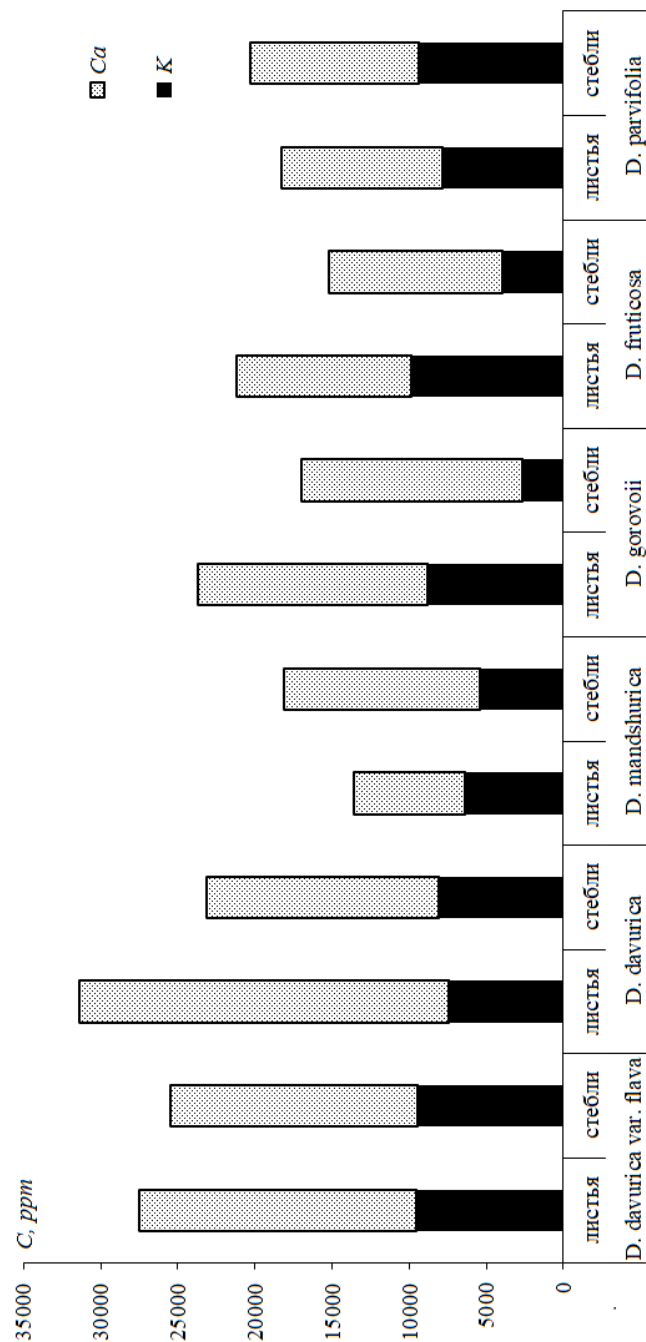


Рис. 3. Содержание макроэлементов (Ca и K) в надземных органах растений рода *Dasiphora*.

По оси ординат – содержание элементов, ppm; по оси абсцисс – виды

Fig. 3. Content of macroelements (Ca and K) in the aboveground organs of plants of the genus *Dasiphora*.

Y-axis – content of elements, ppm; X-axis – species plants

Отмечено, что каждому виду свойственны определенные концентрации элементов (см. табл. 2). По наибольшему содержанию Ti, Ni, Nb, V в стеблях выделяются растения *D. fruticosa* (129, 46, 10 и 2 ppm соответственно). В листьях *D. parvifolia* отмечено повышенное содержание Ti (41 ppm) и Zr (83 ppm), а в стеблях Cr (99 ppm) и Sr (132 ppm). В надземных органах *D. mandshurica* выявлен высокий уровень накопления Br (18 и 17 ppm), кроме того, в стеблях – Mn, Sr, Pb, Zr, Cu и As (411, 153, 61, 58, 11 и 0,4 ppm соответственно). В стеблях растений *D. mandshurica* и *D. fruticosa* установлены максимальные концентрации Fe (1 409 и 1 325 ppm) при минимуме в стеблях *D. davurica* var. *flava* (65 ppm), что согласуется с их содержанием в почвах из точек отбора образцов.

В надземных органах растений *D. gorovoi* установлено высокое содержание Zn (257 и 226 ppm), что в 3–5 раз выше средних концентраций этого элемента в растениях в целом [19]. Возможно, превышение связано с повышенным содержанием этого элемента в почве из точки отбора (191 ppm), или растение является концентратором данного элемента. Также в стеблях *D. gorovoi* обнаружено преимущественное накопление Mn (623 ppm), Cr (241 ppm), Pb (54 ppm), а в листьях – Rb (22 ppm). В следовых количествах обнаружен Se в листьях и стеблях *D. davurica* и стеблях *D. fruticosa* (0,1 ppm), в растениях других видов он не выявлен (см. табл. 2). Повышенное содержание Ti, V, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, As, Rb, Y, Zr в надземных органах растений соотносится с их содержанием в почвах точек отбора образцов (см. табл. 1, 2).

Установлено, что концентрации потенциально токсичных элементов (Ni, Pb) в отдельных случаях превышали оптимальные значения [19] в зависимости от вида и органа растения. Так, в растениях *D. fruticosa* содержание Ni в листьях достигало 25 ppm, в стеблях – 46 ppm. В стеблях *D. fruticosa*, *D. gorovoi* и *D. mandshurica* установлены максимальные концентрации Pb (15, 54 и 61 ppm соответственно), что 1,5–9 раз превышало допустимые значения и достигало избыточного и токсичного уровня, что может быть связано с повышенным содержанием этих элементов в почвах из точек отбора (см. табл. 1).

Проанализированы соотношения между некоторыми элементами. Особенно значительные изменения претерпевает соотношение между Fe и Mn, которые взаимосвязаны в метаболических процессах, происходящих в растениях, а соотношение между ними имеет важное физиологическое значение [19; 20]. Для нормального развития растения его значение колеблется в пределах 1,5–2,5 [19]. Отмечено, что только в стеблях растений *D. gorovoi* отношение Fe/Mn является оптимальным и составляет 1,8. В стеблях растений *D. davurica* величина отношения возрастает до 10, что может свидетельствовать о снижении поступления Mn в органы растения и увеличения концентраций Fe соответственно (табл. 3). Данный сдвиг в соотношении Fe/Mn в пользу Fe, может быть связан как с повышенным содержанием Fe в почве, так и с более щелочной реакцией среды в точках отбора за счет повышенного содержания Ca в почве (см. табл. 1). Напротив, в листьях растений *D. gorovoi* и *D. mandshurica* величина соотношения Fe/Mn равняется 0,3 и 0,4.

Часто наблюдается антагонистическое взаимодействие Cu/Pb в растениях. Механизм поглощения этих металлов, вероятно, один и тот же, и каждый из них может вследствие взаимной конкуренции ингибировать поглощение другого корневой системой [19]. В листьях растений большинства видов в соотношении Cu/Pb четко прослеживается сдвиг в сторону Cu, однако в листьях *D. gorovoi* и *D. davurica* отмечается сдвиг в сторону Pb. В стеблях прослеживается другая тенденция: так, в образцах растений *D. parvifolia*, *D. mandshurica* и *D. gorovoi* заметен сдвиг в сторону антагонистического воздействия Pb на накопление Cu, а в стеблях растений *D. fruticosa*, *D. davurica* и *D. davurica* var. *flava*, напротив, в сторону наибольшего накопления Cu по отношению к Pb (см. табл. 3), что свидетельствует о взаимном ингибировании этих двух элементов, а различия в сдвигах в ту или иную сторону у разных видов может быть учтено при оценке ресурсного потенциала и безопасности растительного сырья.

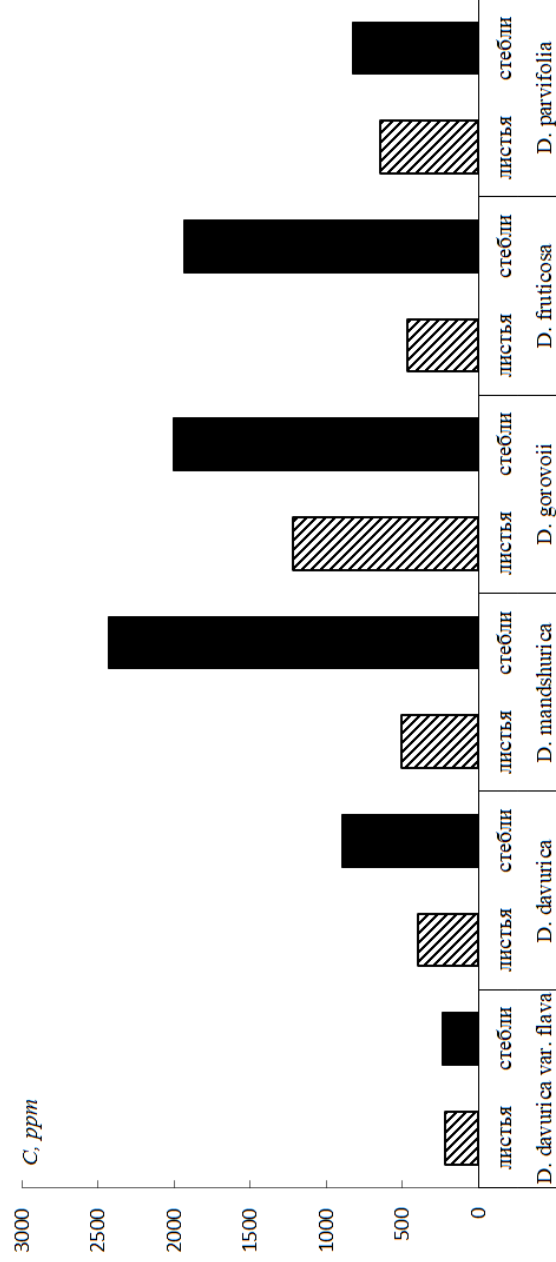


Рис. 4. Суммарное содержание микроэлементов в надземных органах растений рода *Dasiphora*.
По оси ординат – содержание элементов, ppm; по оси абсцисс – виды
Fig. 4. Total contents of microelements in the aboveground organs of plants of the genus *Dasiphora*.
Y-axis – content of elements, ppm; X-axis – species plants

Таблица 3

Соотношение между отдельными элементами в надземных органах видов рода *Dasiphora*

Table 3

Correlation between individual elements in the aboveground organs of plants of the genus *Dasiphora*

Соотношение элементов	Орган растения	<i>D. fruticosa</i>	<i>D. parvifolia</i>	<i>D. mandshurica</i>	<i>D. gorovoi</i>	<i>D. davurica</i> *	<i>D. davurica</i> var. flava
Fe/Mn	листья	1,1	2,9	0,4	0,3	4,9	0,7
	стебли	6,8	5,3	3,4	1,8	10,4	1,0
Cu/Pb	листья	8,4	1,6	5,7	0,8	0,4	12,7
	стебли	0,5	1,3	0,2	0,1	2,4	7,6

Примечание: * – по Храмовой и др., 2015 г.

Выводы

В надземных органах растений четырех видов рода *Dasiphora*, произрастающих в природных популяциях из Приморского края и Республики Бурятия, установлено содержание 21 элемента методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения.

Впервые определен элементный состав нового вида *D. gorovoi* из локального местообитания (Приморский край, Ольгинский район).

В надземных органах двух таксонов – *D. davurica* и *D. davurica* var. *flava* установлено наибольшее суммарное содержание макроэлементов (K, Ca), наименьшее – в листьях *D. mandshurica* и стеблях *D. fruticosa*, что подтверждает наши результаты по элементному составу растений этих видов из других местообитаний. Максимум микроэлементов обнаружен в надземных органах *D. gorovoi* и в стеблях *D. mandshurica* и *D. fruticosa*, минимум – в листьях и стеблях *D. davurica* var. *flava* и в листьях *D. davurica*. Каждому исследованному представителю рода свойственны определенные концентрации элементов. По максимальному содержанию Ti, V, Co, Ni и Nb в стеблях выделен вид *D. fruticosa*, Zr – в листьях *D. parvifolia*, Fe, Mn, Cu, As, Sr и Pb – в стеблях *D. mandshurica*, Mn, Cr, Rb, Y – в стеблях и Zn – в листьях и стеблях *D. gorovoi*. Для видов *D. fruticosa*, *D. mandshurica* и *D. gorovoi* отмечено превышение уровня потенциально токсичных химических элементов Ni и Pb в 1,5–9 раз.

Полученные данные могут быть использованы в базах данных по химическому составу растений.

Список литературы

1. **Пшенникова Л. М.** Новый вид рода *Dasiphora* (Rosaceae) с Дальнего Востока России // Ботанический журнал. 2006. Т. 91, № 6. С. 951–954.
2. **Пшенникова Л. М., Миронова Л. Н.** Новое местонахождение *Dasiphora davurica* var. *flava* (Rosaceae) на юге российского Дальнего Востока // Ботанический журнал. 2014. Т. 99, № 8. С. 939–940.
3. **Овчинникова С. В.** Конспект флоры Азиатской России: Сосудистые растения / Под ред. К. С. Байкова. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2012. 218 с.
4. **Храмова Е. П., Куценогий К. П., Ковальская Г. А., Чанкина О. В.** Элементный состав *Pentaphylloides fruticosa* (L.) O. Schwarz произрастающего в Горном Алтае // Растительные ресурсы. 2000. Т. 36, вып. 4. С. 59–67.
5. **Храмова Е. П., Куценогий К. П., Ковальская Г. А., Чанкина О. В.** Элементный состав листьев и цветков *Pentaphylloides fruticosa* (L.) O. Schwarz различных экотипов, выращиваемых в Новосибирске // Растительные ресурсы. 2002. Т. 38, вып. 2. С. 85–92.
6. **Храмова Е. П., Чанкина О. В., Куценогий К. П.** Использование метода РФА СИ в хемотаксономических исследованиях сибирских видов рода *Pentaphylloides* Hill // Изв. РАН. Серия физическая. 2013. Т. 77, № 2. С. 198–200.
7. **Стальная М. И., Храмова Е. П.** Элементный состав *Pentaphylloides fruticosa* (L.) O. Schwarz при интродукции в Адыгее // Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. 2002. № 4. С. 64–66.
8. **Andysheva E. V., Chankina O. V., Khramova E. P., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S.** Element composition of *Pentaphylloides fruticosa* of the Russian Far East and East Siberia. *Physics Procedia*, 2016, vol. 84, p. 263–269.
9. **He J. L., Li X. G.** *Potentilla fruticosa* has a greater capacity to translocate phosphorus from the lower to upper soils than herbaceous grasses in an alpine meadow. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 2016, vol. 228, p. 19–29.

10. **Khramova E. P., Chankina O. V., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S.** Variability of the element composition of *Pentaphylloides fruticosa* vegetable samples during long-term storage. *Physics Procedia*, 2016, vol. 84, p. 256–262.
11. **Храмова Е. П., Чанкина О. В., Андышева Е. В., Ракшун Я. В., Сороколетов Д. С.** Элементный состав видов рода *Pentaphylloides* (Rosaceae) Дальнего Востока // Изв. РАН. Серия физическая, 2015. Т. 79, № 1. С. 77–83.
12. **Trunova V. A., Sidorina A. V., Zolotarev K. V.** Using external standard method with absorption correction in SRXRF analysis of biological tissues. *X-ray spectrometry*, 2015, vol. 44, no. 4, p. 226–229.
13. **Piminov P. A., Baranov G. N., Bogomyagkov A. V.** Synchrotron radiation research and application at VEPP-4. *Physics Procedia*, 2016, vol. 84, p. 19–26.
14. **Чупарина Е. В., Мартынов А. М.** Применение неdestructивного РФА для определения элементного состава лекарственных растений // Журнал аналитической химии. 2011. Т. 66, № 4. С. 399–405.
15. **Арнаутов Н. А.** Стандартные образцы химического состава природных минеральных веществ. Методические рекомендации. Новосибирск, 1990. 220 с.
16. **Baryshev V. B., Kulipanov G. N., Skrinsky A. N.** Handbook of Synchrotron Radiation. Eds. G. Brown, D. Moncton. Amsterdam, Elsevier, 1991, vol. 3, 639 p.
17. **Дарьин А. В., Ракшун Я. В.** Методика выполнения измерений при определении элементного состава образцов горных пород методом рентгенофлуоресцентного анализа с использованием синхротронного излучения из накопителя ВЭПП-3 // Научный вестник НГТУ. 2013. № 2 (51). С. 112–118.
18. **Касимов Н. С., Власов Д. В.** Кларки химических элементов как эталоны сравнения в экогеохимии // Вестник Моск. ун-та. Серия 5. География. 2015. № 2. С. 7–17.
19. **Кабата-Пендиас А., Пендиас Х.** Микроэлементы в почвах и растениях. М.: Мир, 1989. 439 с.
20. **Ильин В. Б., Сысо А. И.** Микроэлементы и тяжелые металлы в почвах и растениях Новосибирской области. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001. 231 с.

References

1. **Pshennikova L. M.** A new species of the genus *Dasiphora* (Rosaceae) from the Russian Far East. *Botanicheskii Zhurnal*, 2006, vol. 91, no. 6, p. 951–954. (in Russ.)
2. **Pshennikova L. M., Mironova L. N.** New locality of *Dasiphora davurica* var. *flava* (Rosaceae) in the Southern Russian Far East. *Botanicheskii Zhurnal*, 2014, vol. 99, no. 8, p. 939–940. (in Russ.)
3. **Ovchinnikova S. V.** Check-list of flora of Asian Russia: Vascular plants. Ed. by K. S. Baikov. Novosibirsk, 2012, 218 p. (in Russ.)
4. **Khramova E. P., Koutsenogii K. P., Kovalskaya G. A., Chankina O. V.** Element composition of *Pentaphylloides fruticosa* (L.) O. Schwarz grown in the Mountain Altai. *Rastitelnye resursy*, 2000, vol. 36, no. 4, p. 59–67. (in Russ.)
5. **Khramova E. P., Koutsenogii K. P., Kovalskaya G. A., Chankina O. V.** Element composition of the leaves and flowers of *Pentaphylloides fruticosa* (L.) O. Schwarz of various ecotypes grown in Novosibirsk. *Rastitelnye resursy*, 2000, vol. 38, no. 2, p. 85–92. (in Russ.)
6. **Khramova E. P., Chankina O. V., Koutsenogii K. P.** Using synchrotron radiation X-ray fluorescence analysis in a chemotaxonomic study of some Siberian species of the genus *Pentaphylloides* Hill. *Bulletin of the Russian Academy of Science: Physics*, 2013. vol. 77, no. 2, p. 198–200. (in Russ.)
7. **Stalnaya M. I., Khramova E. P.** Elemental composition of *Pentaphylloides fruticosa* (L.) O. Schwarz under introductions in Adygea. *Izvestiya vuzov. Severo-Kavkazskii region. Estestvennyye nauki*, 2002, no. 4, p. 64–66. (in Russ.)

8. **Andysheva E. V., Chankina O. V., Khramova E. P., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S.** Element composition of *Pentaphylloides fruticosus* of the Russian Far East and East Siberia. *Physics Procedia*, 2016, vol. 84, p. 263–269.
9. **He J. L., Li X. G.** *Potentilla fruticosa* has a greater capacity to translocate phosphorus from the lower to upper soils than herbaceous grasses in an alpine meadow. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 2016, vol. 228, p. 19–29.
10. **Khramova E. P., Chankina O. V., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S.** Variability of the element composition of *Pentaphylloides fruticosus* vegetable samples during long-term storage. *Physics Procedia*, 2016, vol. 84, p. 256–262.
11. **Khramova E. P., Chankina O. V., Andysheva E. V., Rakshun Ya. V., Sorokoletov D. S.** Element composition of species of the genus *Pentaphylloides* (Rosaceae) in the Russian Far East. *Bulletin of the Russian Academy of Science: Physics*, 2015, vol. 79, no. 1, p. 77–83.
12. **Trunova V. A., Sidorina A. V., Zolotarev K. V.** Using external standard method with absorption correction in SRXRF analysis of biological tissues. *X-ray spectrometry*, 2015, vol. 44, no. 4, p. 226–229.
13. **Piminov P. A., Baranov G. N., Bogomyagkov A. V., Berkaev D. E., Borin V. M., Dorokhov V. L., Karnev S. E., Kiselev V. A., Levichev E. B., Meshkov O. I., Mishnev S. I., Nikitin S. A., Nikolaev I. B., Sinyatkin S. V., Voblyi P. D., Zolotarev K. V., Zhuravlev A. N.** Synchrotron radiation research and application at VEPP-4. *Physics Procedia*, 2016, vol. 84, p. 19–26.
14. **Chuparina E. V., Martynov A. M.** Application of nondestructive X-ray fluorescence analysis to determine the element composition of medical plants. *Journal of Analytical Chemistry*, 2011, vol. 66, no. 4, p. 399–405. (in Russ.)
15. **Arnautov N. A.** Standard samples of chemical composition of nature minerals. Methodological recommendations. Novosibirsk, 1990, 220 p. (in Russ.)
16. **Baryshev V. B., Kulipanov G. N., Skrinisky A. N.** Handbook of Synchrotron Radiation. Eds. G. Brown, D. Moncton. Amsterdam, Elsevier, 1991, vol. 3, 639 p.
17. **Darin A. V., Rakshun Y. V.** Method of measurement during determination of the elemental composition of rock samples by X-ray fluorescence analysis using synchrotron radiation from the VEPP-3 storage ring. *Nauchnyi vestnik NGTU*, 2013, no. 2 (51), p. 112–118. (in Russ.)
18. **Kasimov N. S., Vlasov D. V.** Clarkes of chemical elements as comparison standards in ecogeochemistry. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 5: Geografiya*, 2015, no. 2, p. 7–17. (in Russ.)
19. **Kabata-Pendias A., Pendias H.** Trace elements in soils and plants. Moscow, Mir Publ., 1989, 439 p. (in Russ.)
20. **Ilyin V. B., Syso A. I.** Микроэлементы Microelement and heavy metals in soils and plants of Novosibirsk region. Novosibirsk, SB RAS Publ., 2001, 231 p. (in Russ.)

Материал поступил в редколлегию

Received

02.09.2019

Сведения об авторах / Information about the Authors

Андышева Елена Владимировна, младший научный сотрудник, Амурский филиал Ботанического сада-института ДВО РАН (Благовещенск, Россия)

Elena V. Andysheva, junior researcher, Amur branch of Botanical Garden – Institute FEB RAS (Blagoveshchensk, Russian Federation)

lenok-luchik@mail.ru

Чанкина Ольга Васильевна, научный сотрудник, Институт химической кинетики и горения СО РАН (Новосибирск, Россия)

Olga V. Chankina, research associate, Institute of Chemical Kinetics & Combustion SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

chankina@ns.kinetics.nsc.ru

Храмова Елена Петровна, ведущий научный сотрудник, доктор биологических наук, Центральный сибирский ботанический сад СО РАН (Новосибирск, Россия)

Elena P. Khramova, leading researcher, Dr. Sci. PhD, Central Siberian Botanical Garden SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

khramova@ngs.ru

Крестов Павел Витальевич, директор, доктор биологических наук, член-корреспондент РАН, Ботанический сад-институт Дальневосточного отделения Российской академии наук (Владивосток, Россия)

Pavel V. Krestov, director, Dr. Sci. PhD, corresponding member, Botanical Garden-Institute FEB RAS (Vladivostok, Russian Federation)

pavel.krestov@icloud.com

Ракшун Яков Валерьевич, ученый секретарь, кандидат физико-математических наук, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия)

Yakov V. Rakshun, scientific secretary, candidate of physical and mathematical sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

Ya.V.Rakshun@inp.nsk.su

Сороколетов Дмитрий Сергеевич, младший научный сотрудник, Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН (Новосибирск, Россия)

Dmitrii S. Sorokoletov, junior researcher, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS (Novosibirsk, Russian Federation)

nightspirit2010@yandex.ru

«Сибирский физический журнал» публикует обзорные, оригинальные и дискуссионные статьи, посвященные научным исследованиям и методике преподавания физики в различных разделах науки, соответствующих направлениям подготовки на кафедрах физического факультета НГУ. Журнал издается на русском языке, однако возможна публикация статей иностранных авторов на английском языке.

1. Очередность публикации статей определяется их готовностью к печати. Рукописи, оформленные без соблюдения правил, к рассмотрению не принимаются.

Вне очереди печатаются краткие сообщения (не более четырех журнальных страниц), требующие срочной публикации и содержащие принципиально новые результаты научных исследований, проводимых в рамках тематики журнала.

Рекламные материалы публикуются при наличии гарантии оплаты, устанавливаемой по соглашению сторон.

2. В журнале печатаются результаты, ранее не опубликованные и не предназначенные к одновременной публикации в других изданиях. Публикация не должна нарушить авторского права других лиц или организаций.

Направляя свою рукопись в редакцию, авторы автоматически передают учредителям и редколлегии права на издание данной статьи на русском или английском языке и на ее распространение в России и за рубежом. При этом за авторами сохраняются все права как собственников данной рукописи. В частности, согласно международным соглашениям о передаче авторских прав за авторами остается право копировать опубликованную статью или ее часть для их собственного использования и распространения внутри учреждений, сотрудниками которых они являются. Копии, сделанные с соблюдением этих условий, должны сохранять знак авторского права, который появился в оригинальной опубликованной работе. Кроме того, авторы имеют право повторно использовать весь этот материал целиком или частично в компиляциях своих собственных работ или в учебниках, авторами которых они являются. В этих случаях достаточно включить полную ссылку на первоначально опубликованную статью.

3. Направлять рукописи в редакцию авторам рекомендуется по электронной почте либо приносить в редакцию электронную версию (в форматах MS WORD – *.doc, или *.docx, или *.rtf) на диске или флэш-памяти. Такая отправка исходных материалов значительно ускоряет процесс рецензирования.

Авторам предлагается посылать свои сообщения в наиболее сжатой форме, совместимой с ясностью изложения, в совершенно обработанном и окончательном виде, предпочтительно без формул и выкладок промежуточного характера и громоздких математических выражений. Не следует повторять в подписях к рисункам пояснений, уже содержащихся в тексте рукописи, а также представлять одни и те же результаты и в виде таблиц, и в виде графиков.

Рекомендованный объем присылаемых материалов: обзорные статьи – до 25-ти страниц, оригинальные материалы – до 12-ти страниц, краткие сообщения – до 4-х страниц. В любом случае объем рукописи должен быть логически оправданным.

Не рекомендуется предоставление электронных копий рукописей в формате LATEX. По техническим условиям издательства в этом случае рукопись будет преобразована редакцией в формат MS WORD, что может привести к значительному увеличению времени обработки рукописи и искажениям авторского текста.

Сокращений слов, кроме стандартных, применять нельзя. Все страницы рукописи должны быть пронумерованы.

4. При отправке файлов по электронной почте просим придерживаться следующих правил:

- указывать в поле subject (тема) название, номер журнала и фамилию автора;
- использовать attach (присоединение);
- в случае больших объемов информации возможно использование общеизвестных архиваторов (ARJ, ZIP, RAR);
- в состав электронной версии рукописи должны входить:

- ✓ файл, содержащий текст рукописи со вставленными в него рисунками;
- ✓ отдельные файлы с рисунками высокого качества;
- ✓ файл со сведениями об авторах (полностью фамилия, имя, отчество, ученые степень и звание, место работы, служебный адрес и телефон, адрес электронной почты для оперативной связи);
- ✓ файл с переводом на английский язык следующей информации: ФИО авторов, аффилиация, адрес, название статьи, аннотация, ключевые слова, подрисуночные подписи, названия таблиц.

Авторы вставляют рисунки и таблицы в текст рукописи так, как считают нужным. Рукопись обязательно должна быть подписана автором, а при наличии нескольких авторов – всеми соавторами.

Редакция обращает внимание авторов на возможность и целесообразность использования цветного графического материала.

5. В начале рукописи должны быть указаны индекс УДК, название статьи, инициалы и фамилии авторов, название и почтовый адрес учреждений, в которых выполнена работа, аннотация, содержащая основные результаты и выводы работы (в английском варианте не менее 1 000 знаков, русский вариант должен соответствовать английскому), ключевые слова, сведения о финансовой поддержке работы.

Например:

УДК 29.19.37; 47.03.08

Оценка конвективного массопереноса при импульсном лазерном нагреве поверхности стали

И. И. Иванов

*Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН
Новосибирск, Россия*

Аннотация

Проведено численное моделирование процессов при легировании поверхностного слоя металла в подложке под воздействием импульсного лазерного излучения. С помощью предлагаемой математической модели, описывающей термо- и гидродинамические явления, рассматриваются процессы, включающие разогрев металла, его плавление, конвективный тепломассоперенос в расплаве и затвердевание после окончания импульса. По результатам численных экспериментов в зависимости от условий нагрева подложки определены два варианта формирования структуры течения в расплаве и распределения легирующего вещества.

Ключевые слова

термокапиллярная конвекция, конвективный тепломассоперенос, импульсное лазерное излучение, легирование металла, численное моделирование, поверхностно-активное вещество

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 18-79-00138

Evaluation of Convective Mass Transfer during Pulsed Laser Heating of Steel Surface

I. I. Ivanov

*Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation*

Abstract

Numerical modeling of the processes during the alloying of the substrate surface metal layer under pulsed laser radiation is carried out. The proposed mathematical model is used to consider the various processes, such as: heating, phase transition, heat and mass transfer in the molten metal, solidification of the melt. The surface of the substrate is covered with a layer of alloying substance that penetrates the melt. According to the results of numerical experiments, depending on the heating conditions of the substrate, two variants of the formation of the flow structure in the melt and the distribution of the alloying substance are determined.

Keywords

thermocapillary convection, convective heat and mass transfer, impulse laser radiation, metal alloying, numerical simulation, surface active component

Acknowledgements

This work was supported by the Russian Science Foundation, grant number 18-79-00138

Основной текст статьи**Список литературы / References (в порядке цитирования)**

Материал поступил в редколлегию

Received

06.06.2018

Сведения об авторе / Information about the Author

Иванов Иван Иванович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия)

Ivan I. Ivanov, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS (4/1 Institutskaya Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation)

ivanov@itam.nsc.ru

ORCID 0000-0001-0005-0040

Подпись автора (авторов)

6. Параметры страницы: формат – А4; ориентация – книжная; поля (см): слева – 2,5; справа – 1; сверху – 2,5; снизу – 2,3; от края до нижнего колонтитула – 1,3.

7. Основной текст: стиль – «Обычный»: гарнитура (шрифт) Times New Roman (Сур), кегль (размер) 12 пунктов, абзацный отступ – 0,5 см, через 1,5 интервала, выравнивание – по ширине.

В тексте рукописи следует избегать аббревиатур, даже таких общепринятых, как ЭДС, ВТСП и т. п. Использование аббревиатур и простых химических формул в заголовках рукописей совершенно недопустимо. Следует писать: высокотемпературная сверхпроводимость, кремний, арсенид галлия и т. п., давая при необходимости соответствующую аббревиатуру или химическую формулу в тексте. Исключение могут составлять формулы сложных химических соединений. Каждое первое употребление аббревиатуры в тексте должно быть четко пояснено.

Не следует:

- производить табуляцию;
- разделять абзацы пустой строкой;
- использовать макросы, сохранять текст в виде шаблона и с установкой «только для чтения»;

- распределять текст по двум или более столбцам;
- расставлять принудительные переносы.

8. Таблицы должны иметь заголовки (на русском и английском языках). В таблицах обязательно указываются единицы измерения величин.

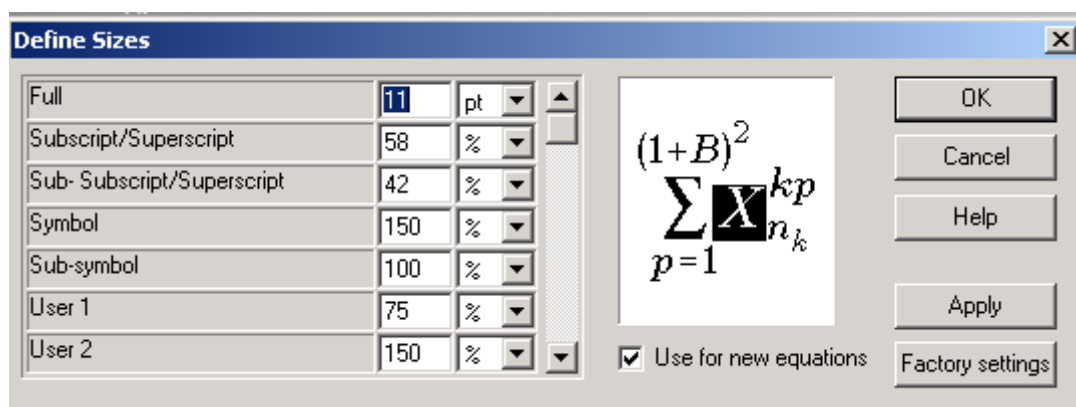
9. Число рисунков должно быть логически оправданным, качество – высоким. Файлы изображений должны находиться в том же каталоге, что и основной документ и иметь имена, соответствующие номерам рисунков в рукописи (например, 09.tif или 22a.jpg).

10. Подписи к рисункам (на русском и английском языках) в электронной версии рукописи выполняются под рисунками, точка в конце не ставится. Если имеется несколько рисунков, объединенных одной подписью, они обозначаются русскими строчными буквами: а, б, в...

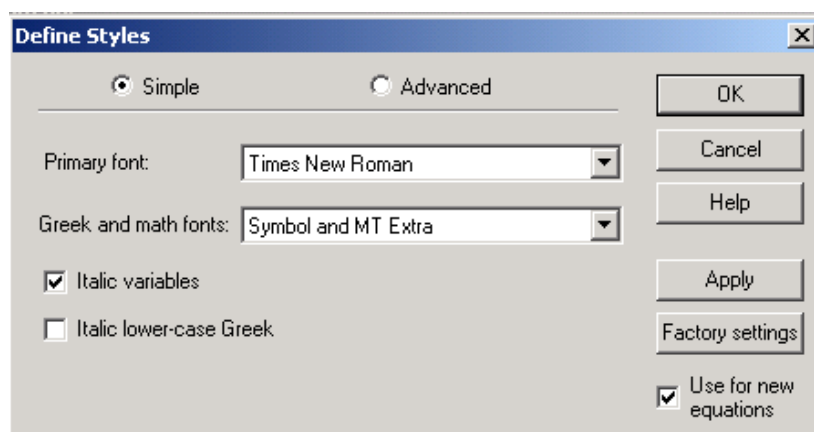
11. Формулы набираются в редакторе формул Microsoft Equation MathType в подбор к тексту или отдельной строкой по центру, **кегель 11 пт**.

Нумерация формул сквозная, в круглых скобках, прижатых к правому полю. Нумеровать следует только те формулы, на которые есть ссылки в тексте.

Настройки редактора формул



а



б

12. Библиографические ссылки. В тексте в квадратных скобках арабскими цифрами указывается порядковый номер научного труда в библиографическом списке, например: [2; 3], [4–6] и т. д. В конце рукописи помещается список литературы в порядке упоминания в рукописи. Ссылки на российские издания приводятся на русском языке и сопровождаются переводом на английский язык (в отдельной строке, но под тем же номером). Библиографическое описание публикации включает: фамилию и инициалы автора, полное название работы, а также издания, в котором опубликована (для статей), город, название издательства, год издания, том (для многотомных изданий), номер, выпуск (для периодических изданий), объем

публикации (количество страниц – для монографии, первая и последняя страницы – для статьи).

Ссылки на интернет-источники, базы данных и т. п. ресурсы, не поддающиеся библиографическому описанию, оформляются в виде примечаний (сносок).

13. В конце рукописи авторы могут поместить список использованных обозначений и сокращений.

14. Возвращение рукописи на доработку не означает, что рукопись уже принята к печати. Доработанный вариант необходимо прислать в редакцию в электронном виде с соблюдением всех требований вместе с ее начальной версией, рецензией и ответом на замечания рецензента не позднее двух месяцев со дня его отсылки. В противном случае первоначальная дата поступления рукописи при публикации не указывается.

15. Решение редакционной коллегии о принятии рукописи к печати или ее отклонении сообщается авторам.

В случае приема рукописи к публикации авторы должны прислать или передать в редакцию два бумажных экземпляра рукописи. Материалы печатаются на принтере на одной стороне стандартного (формат А4) листа белой бумаги. При этом тексты рукописи в бумажной и электронной версиях должны быть идентичными.

16. К рукописи прилагаются письмо от учреждения, в котором выполнена работа, и экспертное заключение о возможности ее опубликования в открытой печати. Если коллектив авторов включает сотрудников различных учреждений, необходимо представить направления от всех учреждений.

Сообщения, основанные на работах, выполненных в учреждении (учреждениях), должны содержать точное название и адрес учреждения (учреждений), публикуемые в статье.

17. После подготовки рукописи к печати редакция отправляет авторам электронную версию статьи с просьбой срочно сообщить в редакцию электронной почтой о замеченных опечатках для внесения исправлений в печатный текст.

18. После выхода журнала статьи размещаются на сайте физического факультета НГУ, а также на сайте Научной электронной библиотеки (elibrary.ru).

Адрес редакции

Физический факультет, к. 140 главного корпуса НГУ
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090,
редакция «Сибирского физического журнала»

тел. +7 (383) 363 44 25
physics@vestnik.nsu.ru