СИБИРСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Научный журнал
Основан в 2006 году

2023. Том 18, № 1

СОДЕРЖАНИЕ

Физика высоких энергий, ускорителей и высокотемпературной плазмы

Мейстер А. К., Солдаткина Е. И., Яковлев Д. В. Измерение потерь энергии на лимитере газодинамической ловушки 5

Сяочао М., Арсентьева М. В., Батраков А. М., Левичев А. Е., Волков В. Н., Мешков О. И., Мальцева Ю. И., Никифоров Д. А., Павленко А. В., Куаньцзюнь Ф. Измерение параметров ВЧ-пушки линейного ускорителя Сибирского кольцевого источника фотонов 14

Аржанников А. В., Синицкий С. Л., Старостенко Д. А., Логачев П. В., Бак П. А., Никифоров Д. А., Попов С. С., Калинин П. В., Самцов Д. А., Сандалов Е. С., Атлуханов М. Г., Григорьев А. Н., Воробьев С. О., Мастюк Д. А., Протас Р. В. Пучково-плазменный генератор ТГЦ-излучения на основе индукционного ускорителя (проект ЛИУ-ПЭТ) 28

Физика жидкости, нейтральных и ионизованных газов

Мищенко Н. А., Часовников Е. А. Математическое моделирование самовозбуждающихся колебаний по тангажу коническо-сферического тела при числе Маха M = 1,75 с использованием гипотезы релаксации 43

Физика твердого тела, полупроводников, наноструктур

Раззоков А. Ш. Выращивание эпитаксиальных слоев твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ из оловянного раствора-расплава 53

Физика химическая, биологическая, медицинская

Синхротронное излучение: воздействие, использование для исследований

Хайновский М. А., Болдырева Е. В., Цирельсон В. Г. Эволюция электронной структуры и упругих свойств β-глицина под воздействием внешнего гидростатического давления: квантово-химическое моделирование 61

Информация для авторов 89

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 Russan

2023. Volume 18, № 1

CONTENTS

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

Meyster A. K., Soldatkina E. I., Yakovlev D. V. Energy Loss Measurements on the Limiter of the Gas Dynamic Trap 5

Xiaochao Ma, Arsentyeva M. V., Batrakov A. M. , Volkov V. N., Levichev A. E., Maltseva Y. I., Meshkov O. I., Nikiforov D. A., Pavlenko A. V., Kuanjun Fan. Measurement of the Parameters of the RF Gun of the Linear Accelerator of the Siberian Ring Source of Photons 14

Arzhannikov A. V., Sinitsky S. L., Starostenko D. A., Logachev P. V., Bak P. A., Nikiforov D. A., Popov S. S., Kalinin P. V., Samtsov D. A., Sandalov E. S., Atlukhanov M. G., Grigoriev A. N., Vorobyov S. O., Petrov D. V., Protas R. V. Beam-Plasma Generator of the THz Radiation Based on an Induction Accelerator (LIA-PET Project) 28

Physics of a Fluid, Neutral and Ionized Gases

Mishchenko N. A., Chasovnikov E. A. Study of Self-Excited Pitch Oscillations of Conical-Spherical Body at Mach Number M = 1.75 and Two Moments of Inertia 43

Solid-State and Semiconductor Physics, Physics of Nanostructures

Razzokov A. Sh. Growth of Epitaxial Layers of the Si1-x-yGexSny Solid Solution from a Tin Solution-Melt 53

Chemical, Biological and Medical Physics

Synchrotron Radiation: Impact and Application for Research

Khainovsky M. A., Boldyreva E. V., Tsirelson V. G. Evolution of the Electronic Structure and Elastic Properties of β-glycine under the Influence of External Hydrostatic Pressure: Quantum Chemical Modeling 66

Instructions for Contributors 89

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 physicotechnical 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 acientific 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 seriesis 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://www.phys.nsu.ru/vestnik/

Научная статья

УДК 533.9
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-5-13

Измерение потерь энергии на лимитере газодинамической ловушки

Андрей Константинович Мейстер[1],
Елена Ивановна Солдаткина[2],
Дмитрий Вадимович Яковлев[3]

[1–3]Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

[1,2]Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия

[1]A.K.Meyster@inp.nsk.su
[2]E.I.Soldatkina@inp.nsk.su
[3]D.V.Yakovlev@inp.nsk.su

Аннотация

В газодинамической ловушке (ГДЛ) – открытой магнитной ловушке для удержания плазмы – наблюдается несоответствие между энергией, введенной в плазму, и энергией, измеренной по известным каналам потерь: при захвате плазмой 2–3 МВт мощности от нейтральных пучков потери энергии не превышают сотен киловатт. В данной работе было исследовано предположение о потере части энергии на лимитерах установки, основанное на численном моделировании, которое предсказывает пикированный вблизи лимитера профиль мощности, выделяющейся в плазме при остывании быстрых ионов. Экспериментальные результаты показали, что потери на лимитере слишком малы, чтобы объяснить расхождение энергобаланса, и необходимы дальнейшие поиски канала крупных потерь.

Ключевые слова

плазма, открытые ловушки, потери энергии, лимитер

Источник финансирования

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Для цитирования

Мейстер А. К., *Солдаткина Е. И.*, *Яковлев Д. В.* Измерение потерь энергии на лимитере газодинамической ловушки // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 1. С. 5–13. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-5-13

© Мейстер А. К., Солдаткина Е. И., Яковлев Д. В., 2023

Energy Loss Measurements on the Limiter of the Gas Dynamic Trap

Andrey K. Meyster[1,2], Elena I. Soldatkina[1,2], Dmitriy V. Yakovlev[1]

[1-3]*Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS*
Novosibirsk, Russia

[1-2]*Novosibirsk State University*
Novosibirsk, Russia

[1]A.K.Meyster@inp.nsk.su
[2]E.I.Soldatkina@inp.nsk.su
[3]D.V.Yakovlev@inp.nsk.su

Abstract

A discrepancy between the energy input into the plasma and the energy lost through the measured loss channels is observed in the Gas Dynamic Trap (GDT): while 2-3 megawatts of power are captured by the plasma from the neutral beams, the observed energy losses do not exceed hundreds of kilowatts. In this study, a proposal was investigated that a part of the input energy is lost on the limiters of the GDT. The proposal was based on numerical modelling results that predict an existence near the limiter of a peak of power transferred to the plasma via fast ion drag. The experimental results showed that the energy losses on the limiter are too small to explain the energy balance discrepancy and further investigations of large loss channels are required.

Keywords

plasma, magnetic mirror devices, energy losses, limiter

Funding

The study was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation

For citation

Meyster A. K., Soldatkina E. I., Yakovlev D. V., Meyster A. K., Soldatkina E. I. , Yakovlev D. V. Energy Loss Measurements on the Limiter of the Gas Dynamic Trap. S*iberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 5–13. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-5-13

Открытые магнитные ловушки являются одним из перспективных направлений в исследованиях термоядерного синтеза. На основе таких ловушек потенциально возможно создание источников быстрых нейтронов и термоядерных реакторов, отличающихся от других типов магнитных установок (к примеру, токамаков и стеллараторов) значительно большей простотой конструкции. Дополнительным преимуществом открытых ловушек является возможность удерживать плазму при более высоких значениях параметра β – отношения кинетического давления плазмы к давлению магнитного поля установки [1], а значит возможно максимально эффективное использование магнитного поля. В совокупности эти факторы снижают стоимость производства и эксплуатации данного типа реакторов.

Газодинамическая ловушка (ГДЛ) является одним из вариантов таких открытых магнитных систем для удержания плазмы. Центральной частью газодинамической ловушки (рис. 1) является соленоид длиной 7 м с магнитным полем внутри до 0,35 Тл, на концах которого расположены магнитные пробки с величиной поля до 12 Тл. «Мишенная» плазма создается дуговым разрядом плазменной пушки в «восточной» части установки и нагревается восемью пучками нейтральных атомов с энергией 25 кэВ. В результате резонансной перезарядки инжектированных атомов в плазме образуется популяция «быстрых» ионов, которые передают свою энергию «мишенной» плазме в кулоновских столкновениях и нагревают ее до температуры 200 эВ.

В установке ГДЛ наблюдается заметное расхождение в балансе энергии. Нейтральными пучками в плазму вносится до 5 МВт мощности, из которых плазмой захватывается 2–3 МВт. При этом продольные потери через магнитные пробки составляют лишь сотни киловатт. Исследования, проведенные в работах [2; 3] показали, что прочие потери (на рекомбинацию бы-

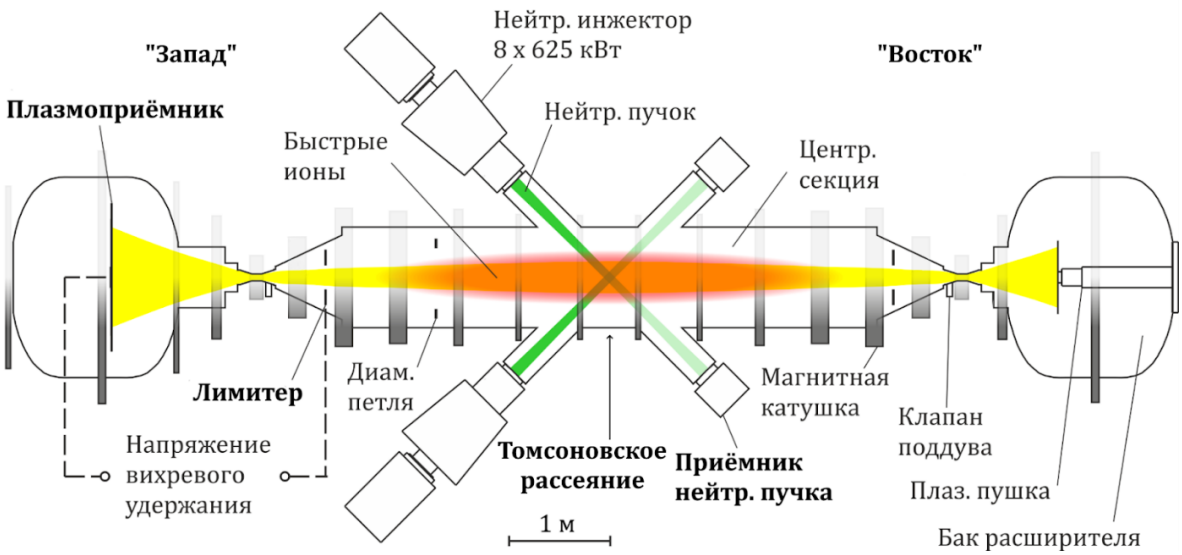
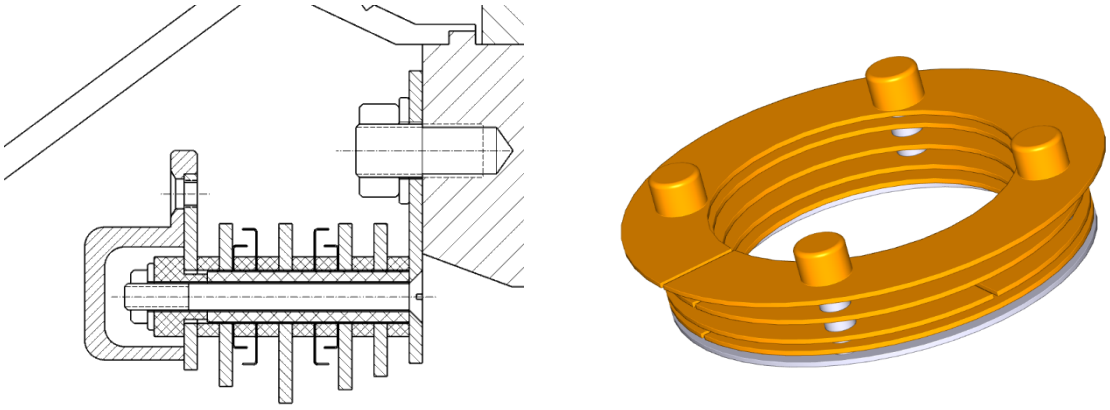


Рис. 1. Схема установки ГДЛ. Жирным шрифтом выделены места расположения использованных в работе диагностик

Fig. 1. The layout of GDT. The locations of the diagnostics used in the study are marked in bold

стрых ионов, излучение из плазмы и поперечный перенос) составляют лишь небольшую долю от продольных. Таким образом, канал потерь нескольких мегаватт остается неопределенным. Так как задача удержания энергии является одной из приоритетных для открытых ловушек в целом и для ГДЛ в частности, то важно определить каналы данных потерь, чтобы по возможности их минимизировать.

Численное моделирование, проделанное в [4], показало, что популяция быстрых ионов теряет свою энергию преимущественно на периферийных слоях плазмы. Максимум мощности потерь при этом локализован вблизи крайней силовой линии (далее – лимитерной линии), определяемой положением лимитера – кольцевого электрода, ограничивающего радиус плазменного столба. Таким образом, возможно, что горячая периферийная плазма может попадать



а *б*

Рис. 2: а – чертеж лимитера в установке (в разрезе), *б* – трехмерная модель. Первое кольцо обращено к основному объему плазмы, на третье подается потенциал для «вихревого удержания», последнее, шестое кольцо – основание каркаса из нержавеющей стали

Fig. 2. а – a schematic of the limiter inside the GDT (cutaway view), *б* – a 3D model of the limiter. The first ring faces the main plasma volume, the “vortex confinement” potential is applied to the third ring, the last, sixth ring is the base of the stainless steel frame

на лимитеры установки и терять на них полученную энергию. Чтобы подтвердить или опровергнуть эту гипотезу, было проведено измерение величины нагрева лимитера.

Для проведения эксперимента штатный лимитер установки ГДЛ из нержавеющей стали, расположенный в «западной» части установки (рис. 1), был заменен на специально изготовленный лимитер, состоящий из пяти медных колец (рис. 2). Кольца имели разные внутренние диаметры, были разрезаны во избежание больших наведенных магнитным полем токов и изолированы друг от друга керамикой. Для реализации «вихревого удержания» плазмы [5] на среднем (третьем) кольце поддерживался электрический потенциал в 250 В относительно «земли» установки, остальные кольца находились под «плавающим» потенциалом плазмы. Нагрев колец измерялся закрепленными на них терморезисторами Pt-100, температура вычислялась измерительными модулями ADAM-5013 с точностью 0,1 %.

Для каждого кольца записывалась временная зависимость температуры, которая разделялась на участки «до» и «после» выстрела плазмы. На участке «после» выстрела определялся момент времени, в который температура была максимальна. В участок «до» вписывалась прямая линия, симулирующая остывание кольца, которая экстраполировалась на участок «после» выстрела. По разности записанного максимума температуры и точки, лежащей на экстраполированной в тот же момент времени прямой остывания, определялась разность температур ΔT, из которой по формуле $Q = cm\Delta T$ рассчитывался нагрев кольца. Расчет полных потерь энергии на лимитере в выстреле производился суммированием энергий, осажденных на каждом кольце.

Следует отметить, что даже в разрезанных кольцах лимитера магнитное поле установки наводит токи, достаточные для заметного нагрева колец (рис. 3). Поправка на нагрев от данных токов производилась путем записи перед каждой серией экспериментов «фонового» выстрела без плазмы, определением нагрева колец в данном выстреле и вычитанием данного «фонового» нагрева из значений, полученных в последующих выстрелах с плазмой. Нагрев лимитера мишенной плазмой без инжекции нейтральных пучков был крайне небольшим, и сигнал практически не отличался от обычного «фонового». Нагрев разных колец (рис. 4) различался ввиду разных масс колец и разных поступающих потоков плазмы. Первое кольцо имело наибольшую площадь и было обращено к плазме непосредственно; кольца 2 и 3 частично находились в его «тени», что ограничивало принимаемые ими потоки плазмы. При этом кольцо 3 имело наименьший внутренний радиус, а значит, что на него приходилась самая «горячая» часть потока. Кольца 4 и 5 полностью находились в «тени» кольца 3, поэтому потоки на них были минимальны, отсюда их малый нагрев. Причиной низкого темпа роста сигнала второго кольца, по-видимому, являлся плохой физический контакт терморезистора с кольцом; отличие

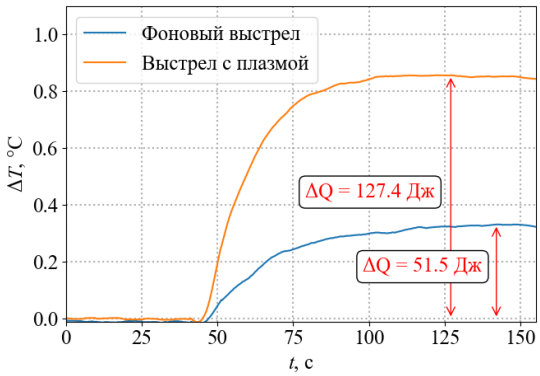


Рис. 3. Сравнение показаний температур в «фоновом» и «плазменном» выстрелах для одного кольца
Fig. 3. The comparison of temperature readings between a “background” and a “plasma” shot for the same ring

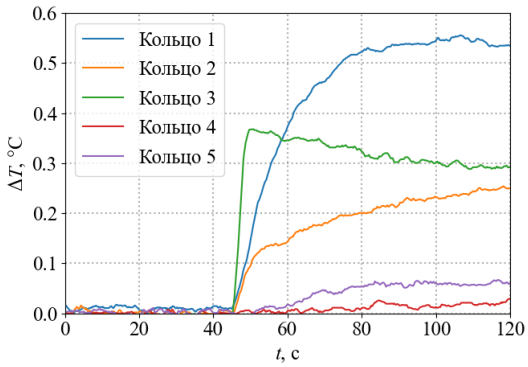


Рис. 4. Динамика нагрева разных колец лимитера в одном выстреле с плазмой (при вычтенном «фоне»)
Fig. 4. The heating dynamics of different limiter rings in the same “plasma” shot (with subtracted “background”)

же формы сигнала кольца 3 могло быть обусловлено подачей на него потенциала «вихревого удержания», что могло приводить к возникновению на этом кольце дуговых разрядов, влияющих на поток тепла.

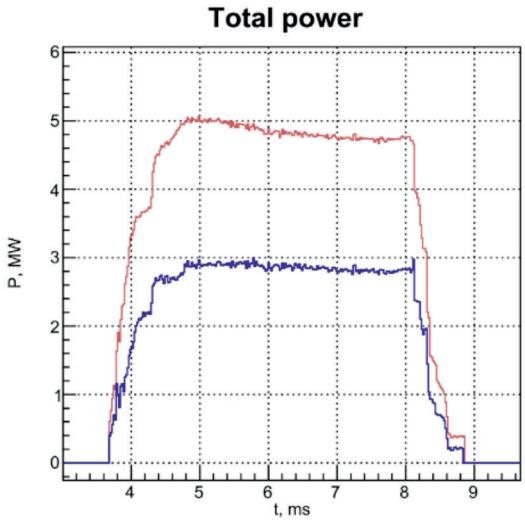


Рис. 5. Измерение захваченной мощности нейтральных пучков. Красная линия – суммарная мощность пучков без плазмы, синяя – захваченная плазмой мощность
Fig. 5. Measurement of power captured from the neutral beams. The red line shows the total beam power without plasma in the device, the blue – the power captured by the plasma

Измерения захваченной плазмой энергии проводились с помощью вторично-эмиссионных датчиков, установленных в приемниках нейтральных пучков установки. Захваченная от пучков мощность определялась как разность мощности, полученной в импульсе с плазмой, и мощности выстрела без плазмы (рис. 5). Захваченная плазмой энергия определялась интегрированием захваченной мощности по времени и варьировалась в ходе эксперимента путем изменения плотности плазмы и посредством частичного отключения инжекторов нейтральных пучков.

Также в эксперименте проводились измерения продольных потерь из плазмы через магнитную пробку. Для этого использовалась система пироэлектрических болометров (устройство болометров описано в работе [6]), расположенных на «западном» плазмоприемнике установки в расширительном баке. Система состояла из 21 датчика, расположенного на пластине крестообразно (рис. 6). Полная энергия продольных потерь в «западную» пробку установки получалась интегрированием показаний датчиков по площади плазмоприемника и по времени (рис. 7).

По результатам измерений была построена зависимость энергетических потерь на лимитере от захваченной плазмой энергии (рис. 8). Измерения показали, что при захвате плазмой энергии до 14 кДж на лимитере осаждается не более 400 Дж. Если просуммировать потери на лимитере с потерями на плазмоприемнике и удвоить эту сумму (чтобы учесть потери на «восточный» лимитер и в «восточную» пробку), то окажется, что суммарные потери по этим каналам не превышают 3 кДж (рис. 9). Вписанная в данные результаты методом наименьших квадратов прямая имеет угловой коэффициент, близкий к 0,2, а значит, потери на лимитеры и в магнитные пробки составляют приблизительно 20 % от захваченной энергии.

В предположении, что моделирование не точно предсказывает расположение пика потерь мощности нейтральных пучков по радиусу, была проведена дополнительная серия экспериментов с ослаблением силы поля «западной» магнитной пробки при поддержании постоянного уровня захваченной плазмой энергии. Ослабление магнитного поля пробки приводит к тому, что лимитерная силовая линия смещается ближе к оси установки, позволяя тем самым собрать на лимитер больший поток плазмы (рис. 10). В этом случае, если

энергосодержание периферийной плазмы действительно высоко, то поток этой плазмы будет направлен на лимитер и будет наблюдаться нагрев, соответствующий энергии порядка нескольких килоджоулей.

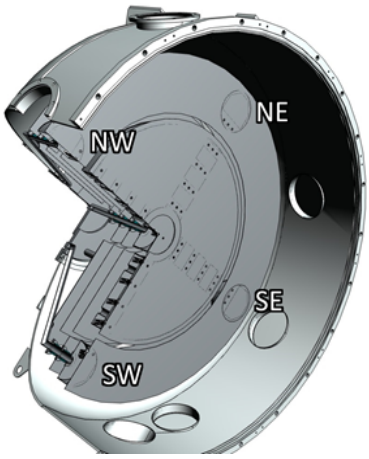


Рис. 6. Схема расположения болометров на плазмоприемнике
Fig. 6. The bolometer layout on the plasma absorber

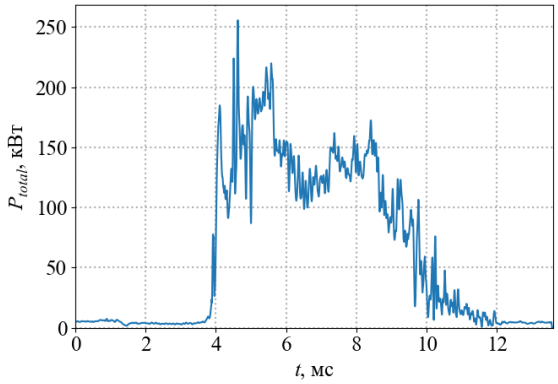


Рис. 7. Характерный сигнал полной мощности энергетических потерь на плазмоприемнике, измеренный системой пироэлектрических болометров
Fig 7. A typical signal of total power losses on the plasma absorber measured by the pyrobolometer system

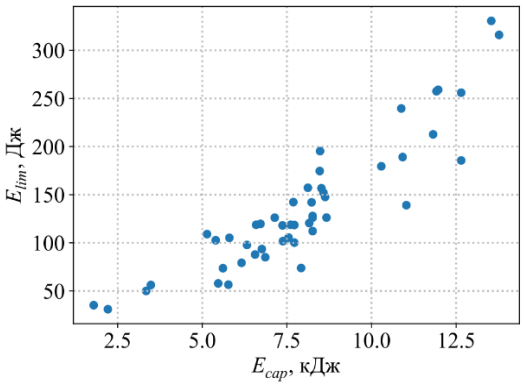


Рис. 8. Зависимость потерь энергии на лимитере от захваченной плазмой энергии
Fig. 8. Energy losses on the limiter versus the energy captured by the plasma

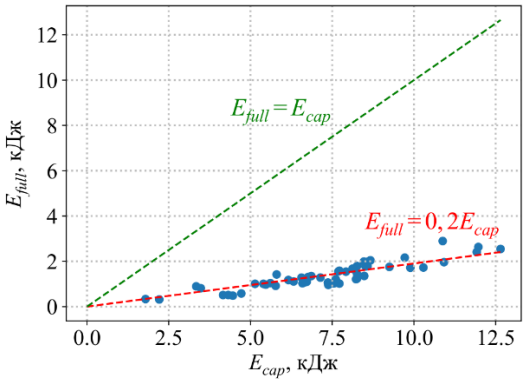


Рис. 9. Зависимость потерь энергии на лимитеры и через обе магнитные пробки от захваченной плазмой энергии
Fig. 9. Energy losses on limiters and through both magnetic mirrors versus the energy captured by the plasma

Результаты данной серии экспериментов (рис. 11) показали, что даже при ослаблении магнитного поля в пробочной катушке на 30 % нагрев лимитера возрос приблизительно вдвое, но не превысил 400 Дж. Результаты согласуются с оценкой, полученной при интегрировании формулы, описывающей радиальное распределение продольного потока энергии мишенной плазмы при ее газодинамическом течении в приближении равенства ионной и электронной температур [7]

$$q(r) \approx 1{,}53 n(r) T_e(r) \sqrt{\frac{T_e(r)}{2\pi m_i}}$$

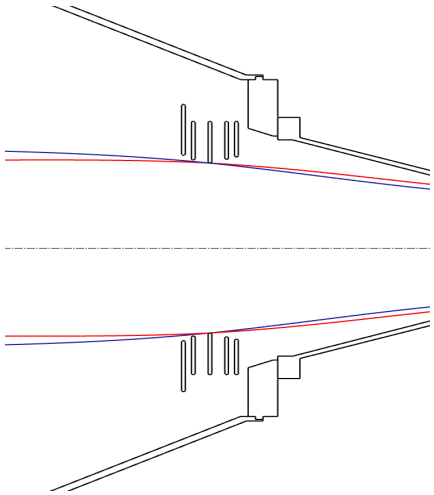


Рис. 10. Лимитерная силовая линия при разных силах поля в пробке. Синяя линия – сильное поле, красная линия – ослабленное поле

Fig. 10. The limiter field line contour at different values of magnetic field strength in the mirror. The blue line denotes the standard, “strong” field, the red line – the “weakened” field

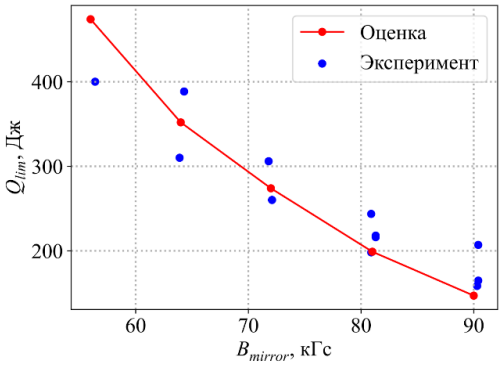
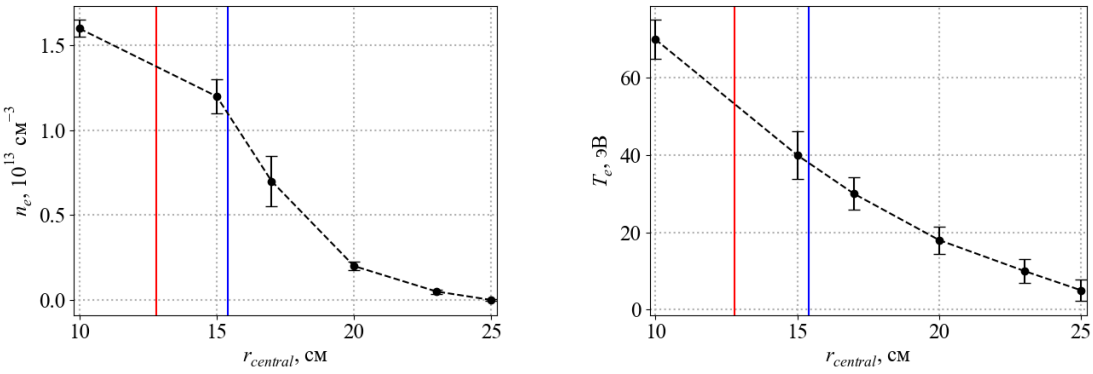


Рис. 11. Зависимость энергетических потерь на лимитере от магнитного поля в ближайшей к нему пробочной катушке

Fig. 11. Energy losses on the limiter versus the magnetic field strength in the closest mirror coil



а *б*

Рис. 12. Радиальные распределения плотности электронов (*а*) и температуры электронов (*б*) в центральной плоскости установки, измеренные диагностикой томсоновского рассеяния. Синими линиями обозначена проекция лимитера на центральную плоскость при сильном поле, красными – при ослабленном

Fig. 12. Radial distributions of electron density (*a*) and electron temperature (*б*) in the midplane of the GDT, measured by the Thomson scattering diagnostic. The blue lines denote the projection of the limiter via magnetic field lines on the midplane at the standard, “strong” field, red lines – at the “weakened” field

по площади кольца, образуемого лимитерной силовой линией и стенкой камеры (рис. 10). Коэффициент 1,53 в приведенной формуле обусловлен учетом движения ионов в немонотонном амбиполярном потенциале, возникающем между центром ловушки и пробкой, и получен путем численного интегрирования. При оценке потока мощности использовались экспериментальные радиальные профили плотности и температуры в залимитерной области плазмы, полученные с помощью штатной диагностики томсоновского рассеяния (рис. 12).

На основании результатов данного исследования можно сделать вывод, что высокое энергосодержание в периферийной плазме отсутствует, и гипотеза о потере энергии быстрых ионов

на лимитере не подтверждается. Расхождение в приблизительно 80 % захваченной мощности, возможно, объясняется потерями быстрых ионов из установки по каналу резонансной перезарядки на нейтральном газе, поддуваемом в разряд для поддержания баланса частиц. Измерение мощности перезарядных потерь станет предметом дальнейших исследований, которые готовятся в данный момент.

Список литературы

1. **Simonen T. C. et al.** High beta experiments in the GDT axisymmetric magnetic mirror //Journal of fusion energy. 2010. Т. 29. №. 6. С. 558–560.
2. **Bagryansky P. A. et al.** Effect of fast Ti-deposition on gas recycling at the first wall and on fast ion losses in the GDT experiment //Journal of nuclear materials. 1999. Т. 265. № 1–2. С. 124–133.
3. **Soldatkina E. I., Bagryansky P. A., Solomakhin A. L.** Influence of the radial profile of the electric potential on the confinement of a high-β two-component plasma in a gas-dynamic trap // Plasma Physics Reports. 2008. Т. 34. № 4. С. 259–264.
4. **Bagryansky P. A. et al.** Overview of ECR plasma heating experiment in the GDT magnetic mirror //Nuclear Fusion. 2015. Т. 55. №. 5. 053009.
5. **Beklemishev A. D. et al.** Vortex confinement of plasmas in symmetric mirror traps //Fusion science and technology. 2010. Т. 57. № 4. С. 351–360.
6. **Soldatkina E. I. et al.** Measurements of axial energy loss from magnetic mirror trap //Nuclear Fusion. 2020. Т. 60. № 8. 086009.
7. **Мирнов В.В., Ткаченко О. А.** Распределение электростатического потенциала в газодинамической ловушке //Препринт 86-28 ИЯФ СО АН СССР – 1986.

References

1. **Simonen T. C. et al.** High beta experiments in the GDT axisymmetric magnetic mirror // Journal of fusion energy. 2010. Vol. 29. no. 6. P. 558–560.
2. **Bagryansky P. A. et al.** Effect of fast Ti-deposition on gas recycling at the first wall and on fast ion losses in the GDT experiment // Journal of nuclear materials. 1999. Vol. 265. no. 1-2. P. 124–133.
3. **Soldatkina E. I., Bagryansky P. A., Solomakhin A. L.** Influence of the radial profile of the electric potential on the confinement of a high-β two-component plasma in a gas-dynamic trap // Plasma Physics Reports. 2008. Vol. 34. no. 4. P. 259–264.
4. **Bagryansky P. A. et al.** Overview of ECR plasma heating experiment in the GDT magnetic mirror // Nuclear Fusion. 2015. Vol. 55. no. 5. 053009.
5. **Beklemishev A. D. et al.** Vortex confinement of plasmas in symmetric mirror traps // Fusion science and technology. 2010. Vol. 57. no. 4. P. 351–360.
6. **Soldatkina E. I. et al.** Measurements of axial energy loss from magnetic mirror trap // Nuclear Fusion. 2020. Vol. 60. no. 8. 086009.
7. **Mirnov V. V., Tkachenko O. A.** The distribution of electrostatic potential in the gas dynamic trap // Preprint. 86-28 INP SB AS USSR, 1986. (in Russ.)

Информация об авторах

Мейстер Андрей Константинович, аспирант Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

Солдаткина Елена Ивановна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН

Яковлев Дмитрий Вадимович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института ядерной физики им. Г. И. БудкераСОРАН

Information about the Authors

Andrey K. Meyster, postgraduate student, Budker Institute of Nuclear Physics (Novosibirsk, Russian Federation)

Elena I. Soldatkina, Candidate of Science (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics (Novosibirsk, Russian Federation)

Dmitriy V. Yakovlev, Candidate of Science (Physics and Mathematics), Senior Researcher, Budker Institute of Nuclear Physics (Novosibirsk, Russian Federation)

Статья поступила в редакцию 04.07.2022; одобрена после рецензирования 02.03.23; принята к публикации 02.03.23

The article was submitted 04.07.2022; approved after reviewing 02.03.23; accepted for publication 02.03.23

Научная статья

УДК 537.533.7
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-14-27

Измерение параметров ВЧ-пушки линейного ускорителя Сибирского кольцевого источника фотонов

Сяочао Ма[1], Мария Васильевна Арсентьева[2], Александр Матвеевич Батраков[3], Алексей Евгеньевич Левичев[4], Владимир Николаевич Волков[5], Олег Игоревич Мешков[6], Юлия Игоревна Мальцева[7], Данила Алексеевич Никифоров[8], Антон Владимирович Павленко[9], Куаньцзюнь Фань[10]

[1–9]Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

[2,6]Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия

[7]Новосибирский государственный технический университет
Новосибирск, Россия

[10]Хуачжунский университет науки и техники
Ухань, Китай

[2,8]ЦКП «СКИФ»
р. п. Кольцово, Россия

[1]maxiaochao199212@icloud.com, [2]M.V.Arsentyeva@inp.nsk.su
[3]A.M.Batrakov@inp.nsk.su, [4]V.N.Volkov@inp.nsk.su
[5]A.E.Levichev@inp.nsk.su, [6]Yu.I.Maltseva@inp.nsk.su
[7]O.I.Meshkov@inp.nsk.su, [8]D.A.Nikiforov@inp.nsk.su
[9]A.V.Pavlenko@inp.nsk.su, [10]kjfan@hust.edu.cn

Аннотация

В работе анализируются результаты первых экспериментов по получению проектных параметров пучка ВЧ-пушки линейного ускорителя Сибирского кольцевого источника синхротронного излучения (СКИФ) и описываются методы диагностики, использованные при этом. Исследованными параметрами являлись поперечный и продольный профили пучка, его эмиттанс, энергия и энергетический разброс, ток, заряд и потери частиц. Проводится сравнение полученных величин с данными численного моделирования.

Ключевые слова

СКИФ, ВЧ-пушка, люминофорный датчик, магнитный спектрометр, стрик-камера, черенковское излучение, цилиндр Фарадея

Для цитирования

Ма С., Арсентьева М. В., Батраков А. М., Левичев А. Е., Волков В. Н., Мешков О. И., Мальцева Ю. И., Никифоров Д. А., Павленко А. В., Фань К. Измерение параметров ВЧ-пушки линейного ускорителя Сибирского кольцевого источника фотонов // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 1. С. 14–27. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-14-27

© Ма С., Арсентьева М. В., Батраков А. М., Левичев А. Е., Волков В. Н., Мешков О. И., Мальцева Ю. И., Никифоров Д. А., Павленко А. В., Фань К., 2023

Measurement of the Parameters of the RF Gun of the Linear Accelerator of the Siberian Ring Source of Photons

Ma Xiaochao[1], Mariya V. Arsentyeva[2], Aleksandr M. Batrakov[3], Vladimir N. Volkov[4], Aleksey E. Levichev[5], Yulia I. Maltseva[6], Oleg I. Meshkov[7] Danila A. Nikiforov[8], Anton V. Pavlenko[9], Fan Kuanjun[10]

[1–9]Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

[2,6]Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

[7]Novosibirsk State Technical University
Novosibirsk, Russian Federation

[10]Huazhong University of Science and Technology
Wuhan, China

[2,8]SRF "SKIF"
Koltsovo, Russian Federation

[1]maxiaochao199212@icloud.com, [2]M.V.Arsentyeva@inp.nsk.su
[3]A.M.Batrakov@inp.nsk.su, [4]V.N.Volkov@inp.nsk.su
[5]A.E.Levichev@inp.nsk.su, [6]Yu.I.Maltseva@inp.nsk.su
[7]O.I.Meshkov@inp.nsk.su, [8]D.A.Nikiforov@inp.nsk.su
[9]A.V.Pavlenko@inp.nsk.su, [10]kjfan@hust.edu.cn

Abstract

The paper analyzes the results of the first experiments to obtain the design parameters of the RF cannon beam of the linear accelerator of the Siberian Ring Synchrotron Radiation Source (SKIF) and describes the diagnostic methods used in this case. The studied parameters include the transverse and longitudinal profiles of the beam, its emittance, energy and energy spread, current, charge and particle losses. The obtained values are compared with the numerical simulation data.

Keywords

SKIF, RF gun, phosphor sensor, magnetic spectrometer, streak-camera, Cherenkov radiation, Faraday cup

For citation

Ma X., Arsentyeva M. V., Batrakov A. M., Volkov V. N., Levichev A. E., Maltsevsa Yu. I., Meshkov O. I., Nikiforov D. A., Pavlenko A. V., Fan K. Measurement of the Parameters of the RF Gun of the Linear Accelerator of the Siberian Ring Source of Photons. Si*berian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 14–27. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-14-27

Введение

В Институте ядерной физики (ИЯФ СО РАН) ведется строительство источника синхротронного излучения 4-го поколения СКИФ [1]. ВЧ-пушка линейного ускорителя инжекционного комплекса СКИФ является первичным источником электронов для всей установки. Для измерения параметров пучка ВЧ-пушка оснащена набором диагностик, которые были в полной мере задействованы с момента начала получения проектных параметров ускорителя. В диагностический комплекс входят люминофорный экран, черенковский детектор, дипольный магнитный спектрометр, цилиндр Фарадея, быстродействующий трансформатор тока (FCT) и монитор положения пучка (BMP), которые соответственно используются для исследования поперечного и продольного размеров пучка, его энергии и энергетического разброса, заряда, тока и положения пучка в вакуумной камере.

При выборе средств диагностики пучка мы опирались на проверенные методы, которые, однако же, адаптировались и трансформировались под конкретную задачу: диапазон энергий, геометрических размеров и заряда электронного пучка ВЧ-пушки. В статье кратко охарактеризованы все примененные методы диагностики пучка и полученные с их помощью результаты. Эти же диагностические средства станут в дальнейшем штатными инструментами на установ-

ке для ее настройки и эксплуатации в составе комплекса СКИФ. Более подробно с описанием всех диагностик пучка линейного ускорителя СКИФ можно познакомиться в [2].

1. ВЧ-пушка линейного ускорителя СКИФ

Проект источника синхротронного излучения СКИФ начал осуществляться в феврале 2018 г. [1]. В качестве инжектора в СКИФ используется линейный ускоритель с энергией электронов $E = 200$ МэВ и бустер на энергию 3 ГэВ. ВЧ-пушка, группирователь третьей гармоники, предускоритель и система регулярных ускоряющих структур являются основными компонентами линейного ускорителя [3]. Конфигурация линейного ускорителя, которая проходит сейчас тестирование на специальном стенде, показана на рис. 1. Источник электронов с энергией $E = 0{,}6$ МэВ основан на ВЧ-пушке (рис. 2) с термоэмиссионным катодом. ВЧ-пушка работает на частоте 178.5 МГц, что является половинной частотой резонатора бустера и накопителя СКИФ и 1/16 частоты 2856 МГц, на которой работает регулярная ускоряющая структура линейного ускорителя [3].

Мощность в резонатор пушки поступает через коаксиальный фидер от полупроводникового усилителя, разработанного компанией «Триада ТВ» (г. Новосибирск) [4]. Данный усилитель обеспечивает импульс мощности до 700 кВт длительностью до 100 мкс с частотой 178,5 МГц и повторением до 10 Гц. Выходная средняя энергия пучка должна составлять в районе 0,8 МэВ. Электронные сгустки пучка получаются посредством термоэмиссии из диспенсерного катода с сеточным управлением. Катод крепится внутри резонатора ВЧ-пушки на вакуумном фланце, а с внешней стороны размещается модулятор для управления током катода. Когда фаза ВЧ синусоидального напряжения в резонаторе достигает 40°, триггерный импульс длительностью 1 нс прикладывается к промежутку катод–сетка и генерирует электронный пучок. Пучок ускоряется полем резонатора до энергии $E = 600$ кэВ. Пушка работает в импульсном режиме с частотой повторения 1 Гц. Существует возможность использовать более высокую частоту повторения, до 20 Гц. Расчетные и достигнутые параметры ВЧ-пушки представлены в таблице.

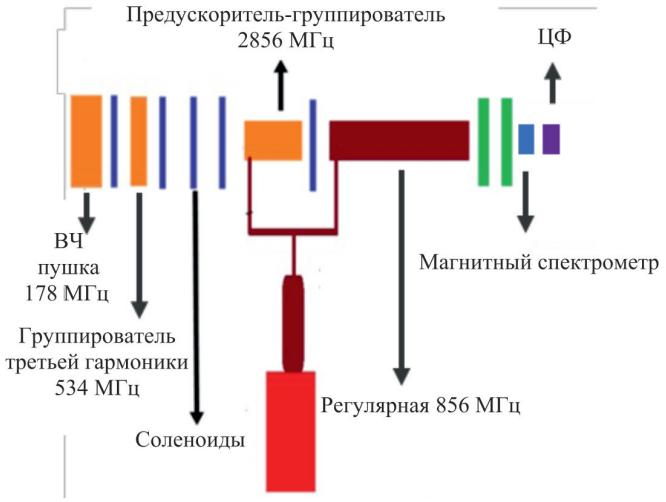
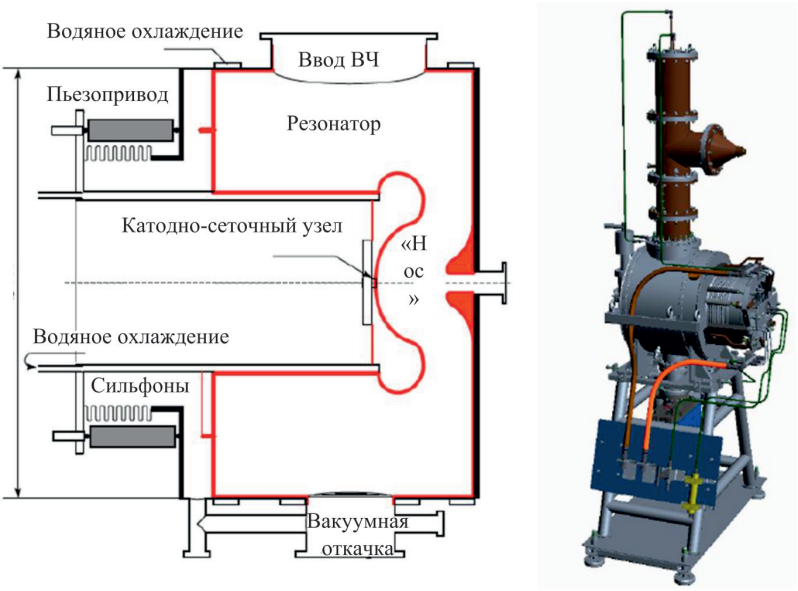


Рис. 1. Структура линейного ускорителя, первая ступень
Fig. 1. Linear accelerator structure, first stage



а *б*

Рис. 2. Схема и общий вид ВЧ-пушки: *а* – конструкция резонатора, *б* – 3D-модель
Fig. 2. Scheme and general view of the RF gun: *а* – resonator design, *б* – 3D model

Расчетные параметры ВЧ-пушки линейного ускорителя СКИФ

Calculated Parameters of the RF Gun of the SKIF Linear Accelerator

Параметры	**Значение**
Резонансная частота	178,5 МГц
Собственная добротность	14 700
Эффективное сопротивление	57,4 Ом
Коэффициент времени прохождения	0,995
Максимальное осевое электрическое поле	13 МВ/м
Импульсная мощность	До 700 кВт
Энергия пучка	0,6–0,7 МэВ
Заряд одиночного сгустка	0,3–1 нКл
Количество сгустков в пучке	1–55

2. Система диагностики параметров пучка ВЧ-пушки

В комплекс диагностики ВЧ-пушки входят люминофорный экран для измерения поперечных размеров пучка, черенковский датчик для измерения продольного распределения частиц, дипольный магнитный спектрометр для измерения энергии и энергетического разброса пучка, цилиндр Фарадея, а также монитор положения пучка (BPM). Общая схема диагностики показана на рис. 3.

Подробное описание всех методов диагностики представлено в [3]. Дополнительно следует упомянуть радиационный датчик, оказавшийся полезным на первых этапах получения пучка. Стандартная конструкция датчика состояла из сцинтиллятора на основе кристалла CsI или пластмассы, соединенных с фотоумножителем (ФЭУ). Датчик, расположенный вблизи вакуумной камеры, регистрировал потери пучка на элементах конструкции пушки, и позволял

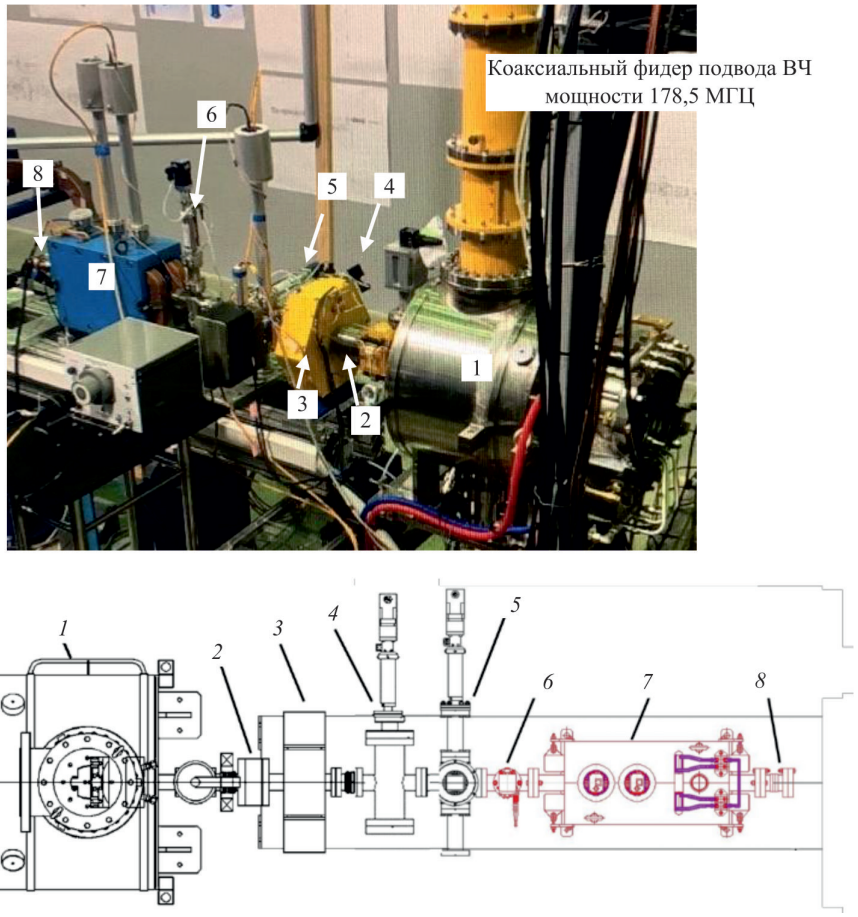
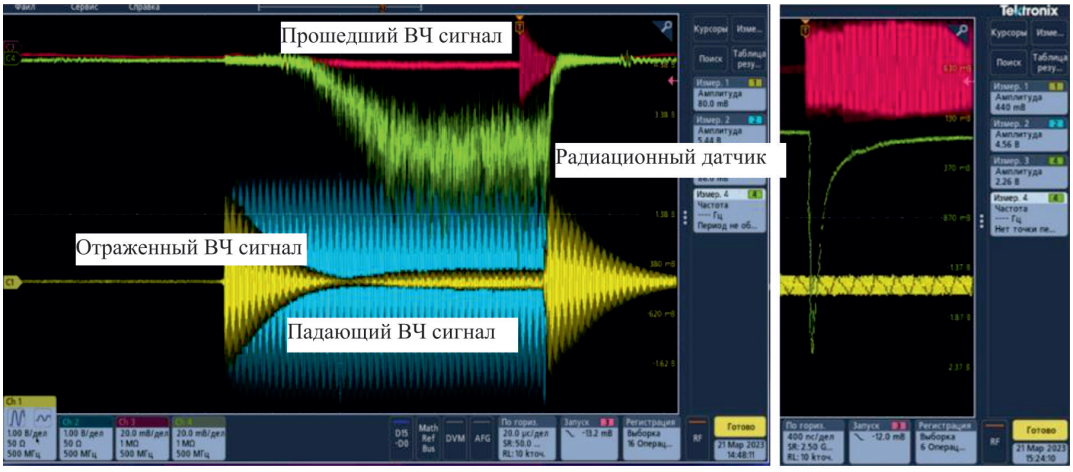


Рис. 3. Внешний вид и схема измерения параметров пучка электронной ВЧ-пушки: *1* – ВЧ-пушка; *2* – FCT; *3* – соленоид; *4* – черенковский датчик; *5* – люминофорный экран; *6* – коллиматор; *7* – спектрометр; *8* – цилиндр Фарадея

Fig. 3. Appearance and scheme for measuring the beam parameters of an electron RF gun: *1* – RF gun; *2* – FCT; *3* – solenoid; *4* – Cherenkov sensor; *5* – phosphor screen; *6* – collimator; *7* – spectrometer; *8* – Faraday cup



а *б*

Рис. 4. Осциллограммы ВЧ-импульсов пушки при мощности 320 кВт и радиационного датчика: *а* – развертка 20 мкс/дел, модулирующий импульс отсутствует, пучка нет; *б* – 400 пс/дел, приложен модулирующий импульс. Радиационный датчик регистрирует потери от пучка

Fig. 4. Waveforms of the microwave pulses of the gun at a power of 320 kW and a radiation sensor: *a* – scan 20 μs/div, no modulating pulse, no beam; *б* – 400 ps/div, modulating pulse applied. The radiation sensor registers the losses from the beam

качественно оценивать режим ее работы (рис. 4). Подобную конструкцию датчика предполагается использовать в системе регистрации потерь накопителя СКИФ [5].

На рис. 4, *а* показаны полные импульсы ВЧ-напряжения длительностью 100 мкс, приложенные к резонатору пушки. При этом модулирующий импульс, отпирающий пушку и создающий пучок электронов, отсутствует. Радиационный датчик регистрирует при этом тормозное излучение электронов темновых токов резонатора. На рис. 4, *б* представлен импульс тормозного излучения с длительностью около 1 нс по полувысоте, возникающий при генерации электронного пучка.

3. Численное моделирование работы пушки и экспериментальные результаты

Для получения результатов мы смоделировали реальный сетчатый катод из ВЧ-триода ГС-34 с использованием кода «particle-in-cell», но без резонатора ВЧ-пушки. Целью моделирования было получение распределения частиц в извлекаемом пучке и трехмерного распределения электромагнитных полей, проникающих через сетку на катоде. Кроме того, с помощью кода CST-Studio отдельно моделировались трехмерные распределения полей резонатора. Рассчитав поля, мы использовали код ASTRA [9] для моделирования динамики пучка. Во всех симуляциях использовалась модель сетки с управляющим напряжением смещения. Детали применения численного кода изложены в [3]. Данные моделирования сравниваются в дальнейшем с полученными экспериментальными результатами.

3.1. Измерение заряд пучка с помощью цилиндра Фарадея

Одной из важных характеристик пучка любого ускорителя является заряд сгустка. Для измерения заряда сгустка ВЧ-пушки использовался цилиндр Фарадея (рис. 5) [6]. Энергия электронов, ускоренных в пушке, составляла около 0,6 МэВ. Длина пробега электронов с такой энергией в любом проводящем материале составляет доли миллиметра. В связи с этим никаких специальных расчетов поглощения частиц для ЦФ, измерявшего заряд пучка из пушки, не проводилось, и его специальная конструкция не разрабатывалась. В качестве ЦФ была использована высоковакуумная часть ввода ВЧ-мощности, имевшая керамическую вставку, позволявшую оторвать приемник пучка от земли (рис. 5). Измеренная емкость на землю приемника пучка составляла 2 пФ.

Для защиты входа осциллографа от перегрузки ЦФ был шунтирован варистором и искровым разрядником. Коаксиальный кабель присоединялся к ЦФ с помощью специальных контактных площадок для снижения паразитной индуктивности (рис. 6, *а*). Типичный сигнал с ЦФ и схема регистрации сигнала с ЦФ широкополосным осциллографом показан на рис. 6, *б*.

Заряд пучка вычислялся численным интегрированием зарегистрированной осциллограммы. Зависимость между зарядом пучка и напряжение смещения ВЧ-пушки показана на рис. 7.

3.2. Измерение поперечных размеров и эмиттанса пучка

Для измерения поперечных размеров и эмиттанса пучка использовались люминофорные экраны. Как и обычно, этот вид диагностики в силу наглядности получаемых результатов оказался востребован и популярен при настройке ускорителя. На рис. 8. показано типичное изображение пучка, зарегистрированное с помощью одного из экранов. Поперечные размеры пучка соответствовали ожидаемым: $\sigma_x = 2{,}32$ мм, $\sigma_y = 1{,}49$ мм. Калибровка пространственной шкалы по обеим координатам производилась с помощью нанесенной на экран прямоугольной сетки. Точность измерения размеров пучка определялась точностью измерения размеров координатной сетки при изготовлении экранов, которая оценивается в 2 %.

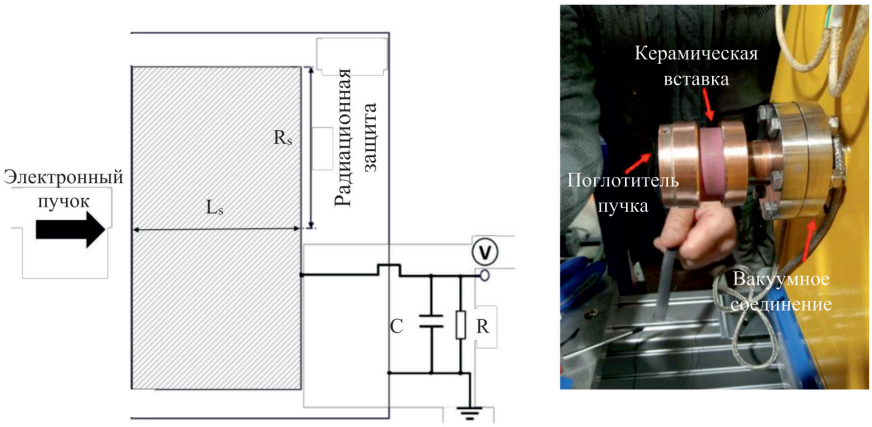
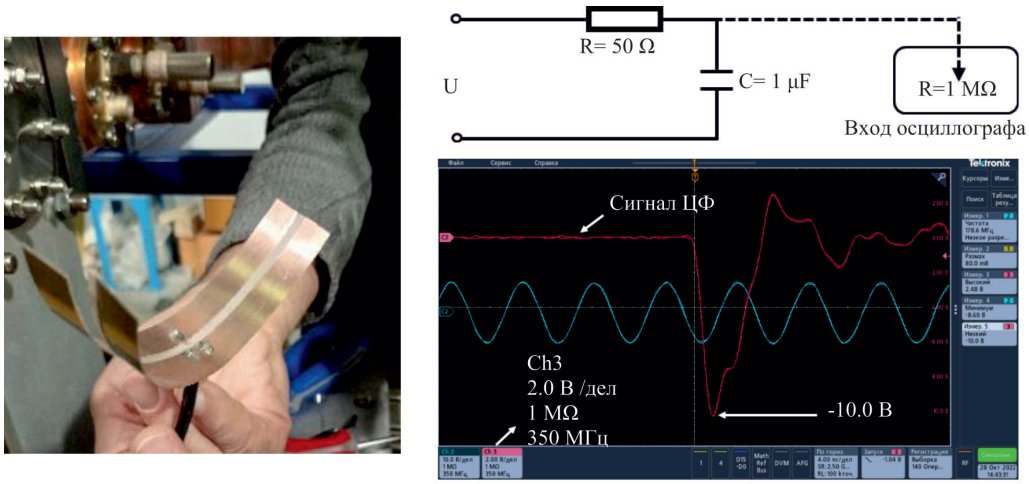


Рис. 5. Схема (*а*) и внешний вид (*б*) цилиндра Фарадея
Fig. 5. Scheme (*a*) and appearance (*б*) of the Faraday cup



а *б*

Рис. 6: а – контактные площадки для сигнального кабеля ЦФ, снижающие паразитную индуктивность; *б* – схема подключения ЦФ для регистрации широкополосного сигнала и типичный сигнал от пучка
Fig. 6: a – contact pads for the CF signal cable reducing parasitic inductance; *б* – connection diagram of a digital filter for recording a broadband signal and contact pads and a typical signal from a beam

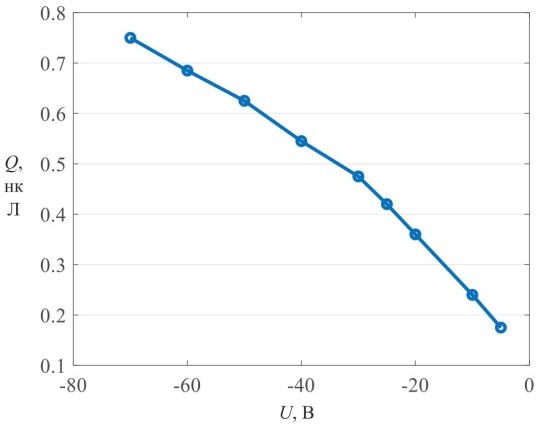


Рис. 7. Зависимость заряда пучка ВЧ-пушки от напряжения модулирующего импульса
Fig. 7. Dependence of the RF gun beam charge on the voltage of the modulating pulse

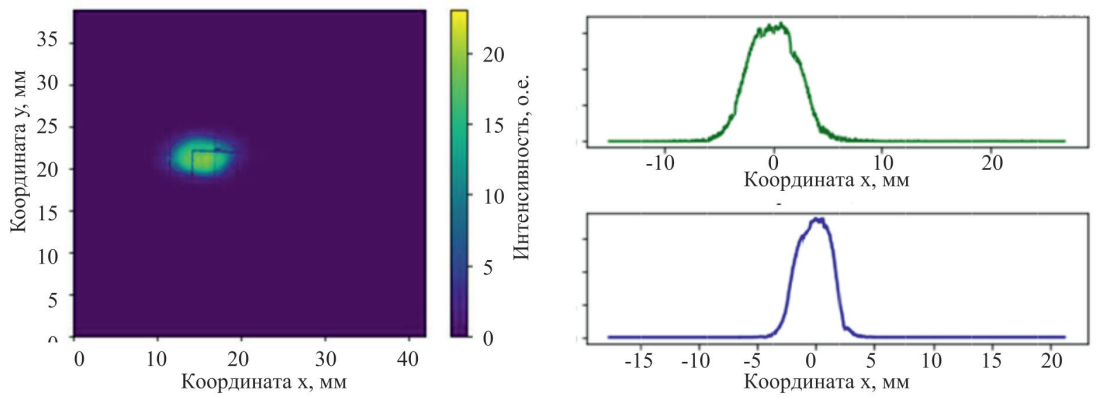


Рис. 8. Типичное изображение пучка, зарегистрированное люминофорным экраном
Fig. 8. Typical beam image recorded by a phosphor screen

Эмиттанс можно получить, измерив зависимость между поперечным размером пучка и напряженностью соленоидального поля с помощью люминофорного экрана, зная расстояние между соленоидом («линзой») и люминофорным экраном [6]. B_{11} по отношению к K является квадратичной функцией, поэтому, варьируя значение K линзы и измеряя соответствующий размер пучка, можно построить корреляцию:

$$B_{11}(K) = a(K - b)^2 + c = aK^2 - 2abK + (c - ab^2), \quad (1)$$

$$\varepsilon = \sqrt{\langle x_0^2\rangle\langle x_0^{'\,2}\rangle - \langle x_0 x_0^{'}\rangle^2} = \frac{\sqrt{ac}}{S_{12}^2}, \quad (2)$$

где B_{11} – квадрат поперечного размера σ пучка, K – величина, обратная фокусному расстоянию, S_{12} – расположенный на расстоянии от люминофорного экрана.

Для фокусировки пучка использовался соленоид, расположенный на расстоянии 200 мм от люминофорного экрана. Зависимость квадратов размеров пучка σ_x^2, σ_y^2 от расчетной силы фокусировки показаны на рис. 9. Измеренный геометрический эмиттанс пучка хорошо соответствует данным, полученным при моделировании пушки [8].

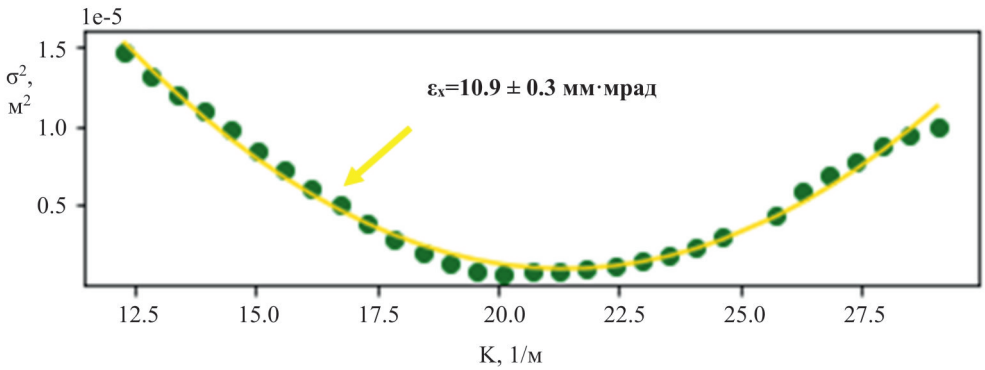


Рис. 9. Определение эмиттанса пучка ВЧ-пушки с помощью соленоидального сканирования
Fig. 9. Determination of the RF gun beam emittance using solenoidal scanning

3.3. Измерение энергии и энергетического разброса пучка

Для измерения энергии и энергетического разброса пучка использовались два метода. Энергия пучка определялась с помощью магнитного корректора MG-LG.CK4 и люминофорного экрана BI-LG.PL2 (рис. 10), а энергетический разброс – с помощью дипольного магнитного спектрометра [2].

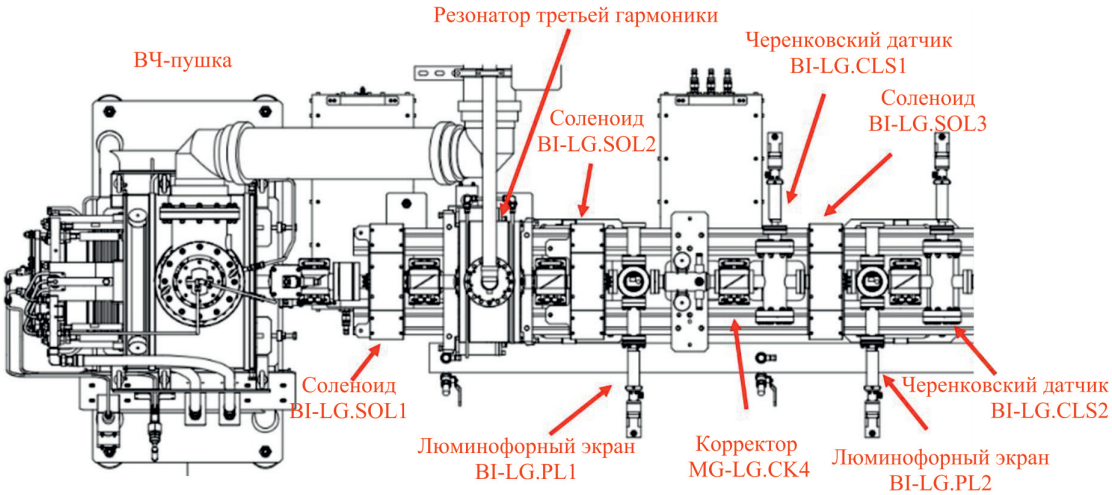


Рис. 10. Схема участка ускорительного тракта, где расположены корректор и люминофор
Fig. 10. Scheme of the section of the accelerating tract, where the corrector and phosphor are located

Энергия пучка вычислялась по его смещению под действием магнитного корректора на люминофорном экране. Точность определение координаты центр тяжести полученных изображений оценивается нами в 5 % от FWHM, что определяется точностью нахождения максимума у зарегистрированного профиля пучка с помощью встроенной функции python. На рис. 11, *а*, приведено сравнение результатов моделирования смещения пучка с помощью пакета FLUKA [7] и экспериментальных результатов, соответствующих энергии пучка $E = 0{,}6 \pm 0{,}03$ МэВ.

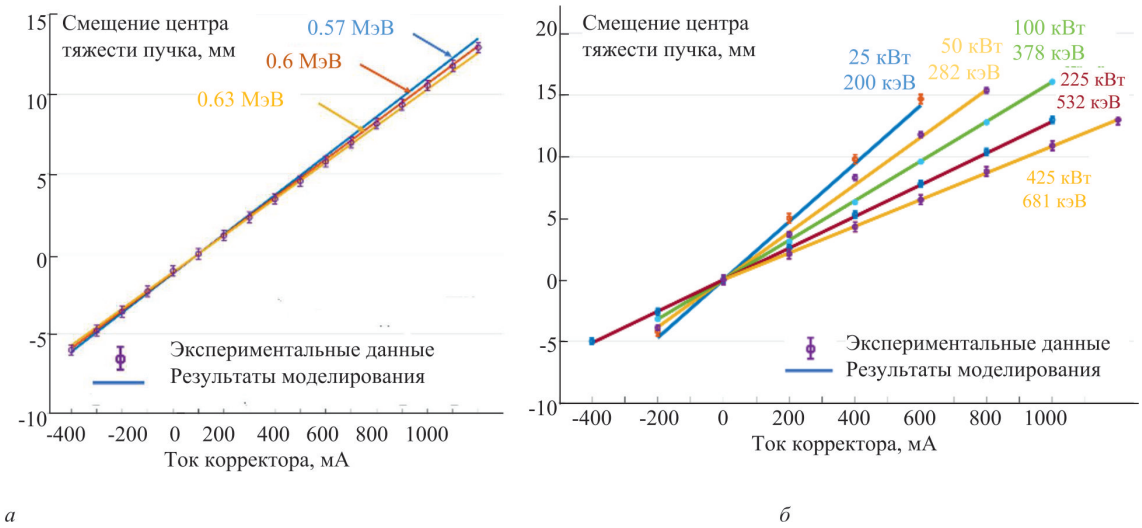


Рис. 11. Измерение энергии пучка по его смещению на люминофорном экране под действием магнитного корректора
Fig. 11. Beam energy is measured by the displacement of the beam on the fluorescent screen under the action of a magnetic corrector

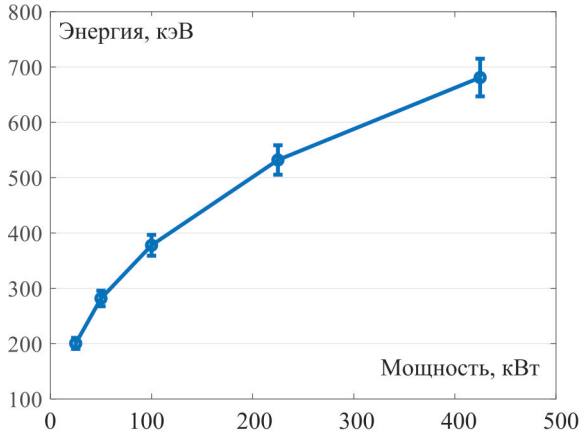


Рис. 12. Измеренные энергии пучка в зависимости от ВЧ-мощности, приложенной к резонатору пушки
Fig. 12. Measured beam energies as a function of RF power applied to the gun resonator

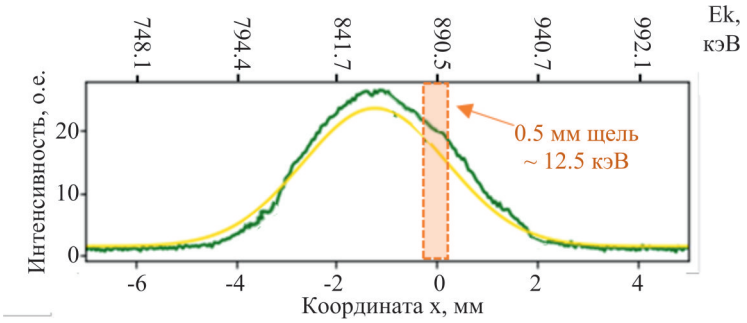


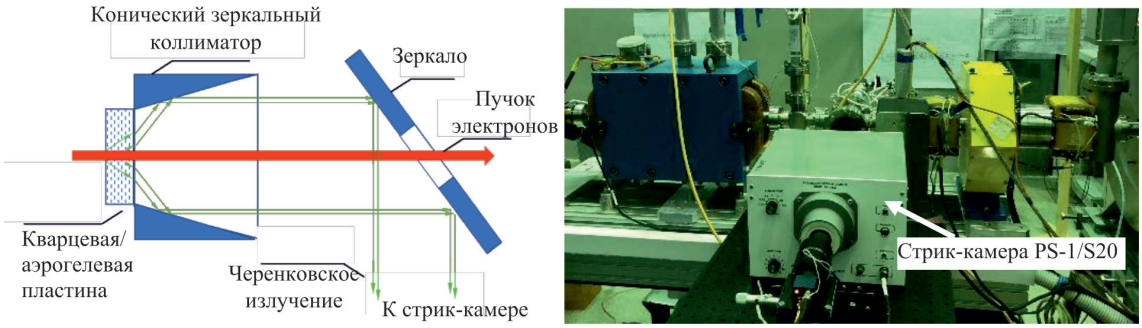
Рис. 13. Определение энергетического разброса пучка с помощью магнитного спектрометра. Зеленая кривая – зарегистрированный профиль пучка, желтая кривая – подгонка гауссовым распределением
Fig. 13. Determination of the energy spread of the beam using a magnetic spectrometer Green line — registered profile of the beam, yellow line — Gauss distribution refinement

Аналогичным методом была измерена зависимость энергии пучка от ВЧ-мощности, приложенной к резонатору ВЧ-пушки. Соответствующие зависимости представлены на рис. 11, *б*, а на рис. 12 показано найденное соотношение между измеренным значением энергии пучка и ВЧ-мощностью.

Использовать магнитный спектрометр для измерения энергии не удалось, так как мы не могли корректно определить координату и угол влета пучка в спектрометр, что приводило к большой систематической ошибке. Спектрометр использовался для измерения энергического разброса с помощью коллимирования пучка на входе [2]. Полученная величина разброса равна $\Delta E = 35 \pm 7$ кэВ (рис. 13). Погрешность измерений определяется шириной щели коллиматора, равной 0,5 мм.

3.4. Измерение продольного размера пучка

Схема измерений продольного размера пучка с помощью черенковского датчика и стрик-камеры показана на рис. 14, *а*. В качестве радиатора черенковского света использовалась кварцевая пластина толщиной 0,5 мм. Электроны с энергией 0,6 МэВ испытывают сильное рассеяние в кварце и полностью поглощаются в пластине такой толщины. Черенковское излучение, вследствие этого, имеет широкое угловое распределение на выходе из радиатора (рис. 15) [2].



а *б*

Рис. 14. Устройство черенковского датчика (*а*) и внешний вид диагностики (*б*)
Fig. 14. The device of the Cherenkov sensor (*a*) and appearance (*б*)

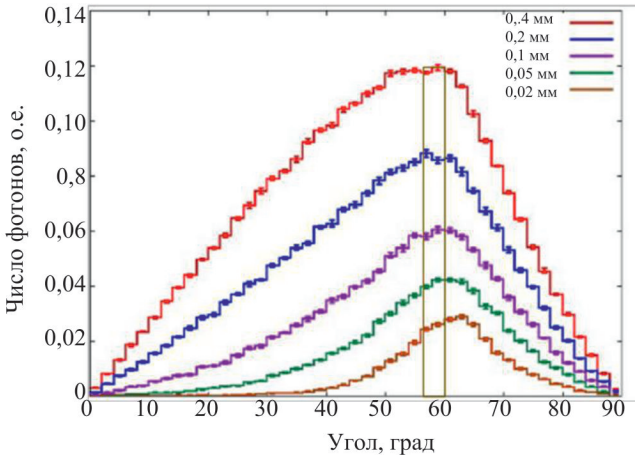
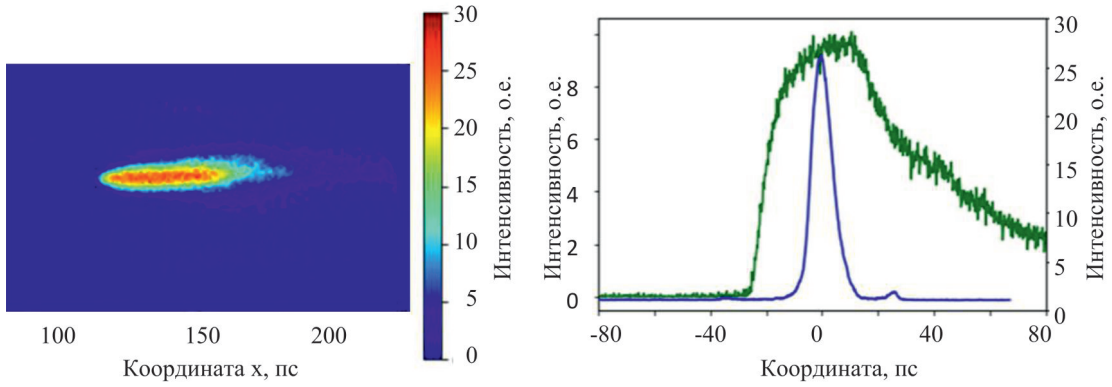


Рис. 15. Угловое распределение черенковского излучения пучка электронов с энергией 0,6 МэВ, проходящего через кварцевую пластину разной толщины. Выделен диапазон по углу в 3,5 градуса
Fig. 15. Angular distribution of the Cherenkov radiation of an electron beam with the energy of 0.6 MeV passing through a quartz plate of different thicknesses. Angle range of 3.5 degrees was selected

Вследствие этого в апертуру объектива, собирающего свет на фотокатод стрик-камеры, попадает лишь малая часть черенковских фотонов. По данным моделирования [2] при заряде пучка в 1 нК, фотокатода достигнет около 2×10^9 фотонов, чего, тем не менее, достаточно для надежной регистрации продольного профиля пучка, что и подтвердилось экспериментально.

Типичный продольный профиль пучка представлен на рис. 16, а. Временное разрешение диагностики 8,5 пс ограничивалось достигнутым размером изображения пучка на фотокатоде стрик-камеры. В подтверждение этого тезиса на рис. 16, *б* совмещены горизонтальный и вертикальный профили зарегистрированного изображения. Как видно, левый склон горизонтального сечения изображения практически совпадает с левым склоном вертикального сечения изображения. Это говорит о том, что аппаратная функция, т. е. временное разрешение стрик-камеры, определяется резкостью фокусировки. На этом этапе мы не стали принимать дополнительных мер для ее улучшения, поэтому нельзя исключить, что продольный профиль пучка может иметь более крутой передний фронт.

На рис. 17 представлены расчетная и модельная зависимости длительности пучка FWHM в зависимости от фазы ВЧ-мощности резонатора третьей гармоники. Согласие между двумя зависимостями скорее качественное, демонстрирующее возможность существенного уменьшения длины пучка перед его прохождением через ускоритель-предгруппирователь. Это



а *б*

Рис. 16. Изображение (*а*) и продольное распределение пучка (*б*), зарегистрированные при фазе резонатора ВЧ-пушки = –0,78 рад и напряжение модулятора U_m = 70 В. Длина пучка FWHM = 65 пс. Зеленая кривая – горизонтальное центральное сечение изображения, синяя кривая – вертикальное центральное сечение изображения

Fig. 16. Image (*a*) and longitudinal distribution (*б*) of the beam recorded at the phase of the RF gun resonator is –0.78 rad and modulator voltage U_m = 70 V. Beam length FWHM = 65 ps. Green curve is the horizontal central section of the image; blue curve is the vertical central section of the image

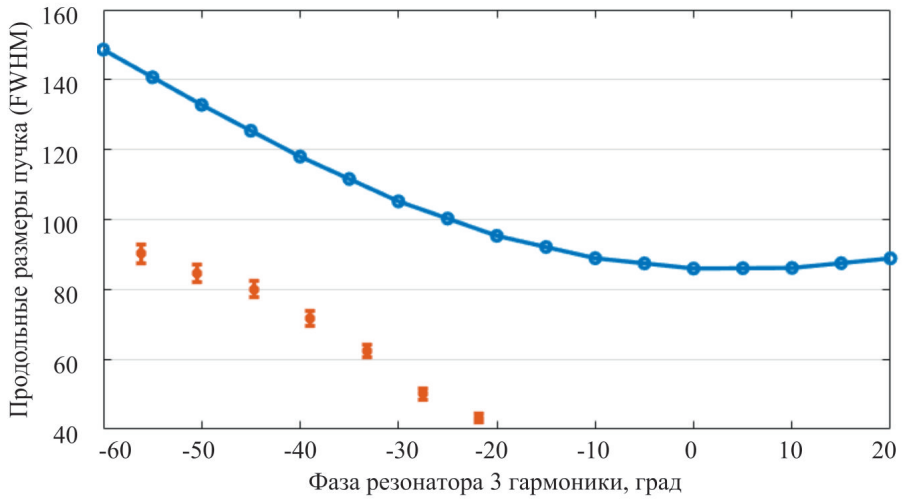


Рис. 17. Продольные размеры пучка (FWHM), зарегистрированные при разных фазах резонатора ВЧ-пушки черенковским датчиком при напряжении модулятора U_m = 70 В (оранжевые точки), и результаты моделирования (синие точки)

Fig. 17. Longitudinal beam dimensions (FWHM) recorded at different phases of the RF gun resonator by a Cherenkov sensor at modulator voltage U_m = 70 V (yellow), and simulation results (blue)

не должно вызывать удивления, так как результатом моделирования является продольная дисперсия пучка, но на практике его форма далека от гауссовой.

Заключение

В ИЯФ СО РАН на специализированном стенде начаты эксперименты с ВЧ-пушкой линейного ускорителя инжекционного комплекса СКИФ. Стенд оснащен развитым набором диагностик для измерения и контроля параметров пучка пушки. К настоящему моменту получены проектные параметры пучка: энергия, энергетический разброс, эмиттанс, заряд, поперечные размеры, длительность сгустка и количество сгустков в пучке. Измеренные параметрические

зависимости основных характеристик пучка ВЧ-пушки находятся в качественном согласии с результатами численного моделирования. Целью дальнейших экспериментов является получение проектных параметров пучка первой очереди линейного ускорителя.

Список литературы

1. **Bogomyagkov A.** (2021). Status of the Novosibirsk fourth-generation light source SKIF. In Proc. XXVII Russian Particle Accelerators Conference, JACoW.
2. **Xiaochao M, Maltseva Y I, Meshkov O I, et al.** Beam diagnostics for linear accelerator of SKIF synchrotron light source[J]. Journal of Instrumentation, 2022, 17(04): T04001.
3. **Andrianov A., Arsentyeva M., Barnyakov A., Chekmenev D., Levichev A., Meshkov O., ... & Volkov V.** (2022). Development of 200 MeV linac for the SKIF light source injector. Journal of Instrumentation, 17(02), T02009.
4. Коаксиальный фидер от полупроводникового усилителя, Триада ТВ, https://triadatv.ru/
5. **Maltseva Y. I., Ivanenko S. V., Khilchenko A. D., Ma X. C., Meshkov O. I., Morsina A. A., & Puryga, E. A. (2022).** Beam loss monitoring system for the SKIF synchrotron light source. Journal of Instrumentation, 17(05), T05004.
6. **Смалюк В В.** Диагностика пучков заряженных частиц в ускорителях [J]. Новосибирск: Параллель, 2009: 294.
7. **A. Ferrari, P. R. Sala, A. Fasso, and J. Ranft,** FLUKA: A Multi-Particle Transport Code, December 14, 2005.
8. **Арсентьева Мария Васильевна.** Разработка структуры резонаторов W-диапазона // дисс. …канд. физико-матем. наук, Новосибирск, 2022.
9. Astra: A Space Charge Tracking Algorithm, http://www.desy.de/ mpyflo

References

1. **Bogomyagkov A.** Status of the Novosibirsk fourth-generation light source SKIF // Proc. XXVII Russian Particle Accelerators Conference. JACoW. 2021.
2. **Xiaochao, M., Maltseva, Y., Meshkov, O., Arsentyeva, M., Bekhtenev, E., Cheskidov, V., Borin, V., Karpov, G., Nikiforov, D., Pavlov, O., Volkov, V.** Beam diagnostics for linear accelerator of SKIF synchrotron light source // Journal of Instrumentation. 2022, 17(04): T04001.
3. **Andrianov A., Arsentyeva M., Barnyakov A., Chekmenev D., Levichev A., Meshkov O., Volkov V.** Development of 200 MeV linac for the SKIF light source injector // Journal of Instrumentation. 2022. Vol. 17, no. 2. T02009.
4. Coaxial feeder from semiconductor amplifier, Triada TV, https://triadatv.ru/ (01.04.2023)
5. **Maltseva Y., Ivanenko S., Khilchenko A., Ma X., Meshkov O., Morsina A., Puryga, E.** Beam loss monitoring system for the SKIF synchrotron light source // Journal of Instrumentation. 17(05), T05004.
6. **Smalyuk, V.** Diagnostics of charged particle beams in accelerators // Ed. Corr. RAS N.S. Dikansky. Novosibirsk: Parallel. 2009: 294.
7. **Ferrari, A., Sala, P., Fasso, A., Ranft, J.** FLUKA: A Multi-Particle Transport Code (Program version 2005) // Cern, 2005.
8. **Arsentyeva M.** Development of the structure of W-band resonators // Dissertation for a degree of candidate of physico-mathematical sciences. Novosibirsk, 2022.
9. **Floettmann, K.** ASTRA – Space Charge Tracking Algorithm // Technical Report. DESY, Hamburg, Germany, Mar, 2017.

Информация об авторах

Ма Сяочао, аспирант

Арсентьева Мария Васильевна, кандидат физико-математических наук

Батраков Александр Матвеевич, доктор физико-математических наук

Волков Владимир Николаевич, кандидат физико-технических наук

Левичев Алексей Евгеньевич, кандидат физико-математических наук

Мальцева Юлия Игоревна, кандидат физико-математических наук

Мешков Олег Игоревич, доктор физико-математических наук

Никифоров Данила Алексеевич, научный сотрудник

Павленко Антон Владимирович, кандидат физико-математических наук

Фань Куаньцзюнь, доктор физико-математических наук

Information about the Authors

Ma Xiaochao, Ph.D student, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS

Mariya V. Arsentyeva, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS, Novosibirsk State University, SRF “SKIF” (Koltsovo, Russia)

Aleksandr M. Batrakov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS

Vladimir N. Volkov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS

Aleksey E. Levichev, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS

Yulia I. Maltseva, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS, Novosibirsk State Technical University

Oleg I. Meshkov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS, Novosibirsk State University

Danila A. Nikiforov, researcher, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS, Novosibirsk State University, SRF “SKIF” (Koltsovo, Russia)

Anton V. Pavlenko, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS, Novosibirsk State University

Fan Kuanjun, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Huazhong University of Science and Technology (Wuhan, China)

Статья поступила в редакцию 04.04.2023; одобрена после рецензирования 10.04.2023; принята к публикации 10.04.2023

The article was submitted 04.04.2023; approved after reviewing 10.04.2023; accepted for publication 10.04.2023

Научная статья

УДК 621.3.095, 621.384
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-28-42

Пучково-плазменный генератор ТГц-излучения на основе индукционного ускорителя (проект ЛИУ-ПЭТ)

Андрей Васильевич Аржанников[1], Станислав Леонидович Синицкий[2], Дмитрий Анатольевич Старостенко[3], Павел Владимирович Логачев[4], Петр Алексеевич Бак[5], Данила Алексеевич Никифоров[6], Сергей Сергеевич Попов[7], Петр Валерьевич Калинин[8], Денис Алексеевич Самцов[9], Евгений Сергеевич Сандалов[10], Магомедризы Гаджимурадович Атлуханов[11], Александр Николаевич Григорьев[12], Семен Олегович Воробьев[13], Дмитрий Витальевич Петров[14], Роман Викторович Протас[15]

[1–10]Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН
Новосибирск, Россия

[12–15]Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. акад. Е. И. Забабахина»
Снежинск, Россия

[1]A.V.Arzhannikov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-8074-9737
[2]S.L.Sinitsky@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-8634-5346
[3]D.A.Starostenko@inp.nsk.su
[4]P.V.Logatchov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-3238-8703
[5]P.A.Bak@inp.nsk.su
[6]D.A.Nikiforov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-6034-5778
[7]S.S.Popov@inp.nsk.su
[8]P.V.Kalinin@inp.nsk.su
[9]D.A.Samtsov@inp.nsk.su
[10]E.S.Sandalov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0003-0126-7519
[11]M.G.Atlukhanov@inp.nsk.su
[12]alex_nick@mail.ru
[13]s.vorobiov2010@yandex.ru
[14]vniitf@vniitf.ru
[15]romanprotas@mail.ru

Аннотация

В ИЯФ СО РАН совместно с РФЯЦ-ВНИИТФ ведутся исследования в области создания новых источников электромагнитного излучения ТГц-диапазона. В рамках данной статьи представлен проект пучково-плазменного генератора ТГц-излучения на основе электронного пучка, генерируемого линейным индукционным ускорителем. В статье приведена схема такого генератора, а также описаны основные элементы системы формирования электронного пучка. Помимо этого, представлены результаты моделирования транспортировки и сжатия сечения пучка с током до 1 кА и энергией до 1 МэВ для последующей его инжекции в плазменную секцию с плотностью плазмы до 10^{15}–10^{16} см$^{-3}$. В статье также проведен анализ результатов предшествующих экспериментальных исследований пучково-плазменного взаимодействия при различных параметрах пучка и плазмы. На основе этого анализа сформулировано требование к соотношению электронных плотностей пучка и плазмы, которое необ-

© Аржанников А. В., Синицкий С. Л., Старостенко Д. А., Логачев П. В., Бак П. А., Никифоров Д. А., Попов С. С., Калинин П. В., Самцов Д. А., Сандалов Е. С., Атлуханов М. Г., Григорьев А. Н., Воробьев С. О., Петров Д. В., Протас Р. В., 2023

ходимо удовлетворить при создании пучково-плазменного генератора ЭМ-излучения для диапазона 0,1–1 ТГц с импульсной мощностью в несколько МВт.

Ключевые слова

линейный индукционный ускоритель, релятивистский электронный пучок, пучково-плазменное взаимодействие, накачка верхнегибридных волн в плазме

Благодарности

Работы, описанные в разделах 1, 4, 5, частично выполнены за счет средств гранта Российского научного фонда № 19-12-00250.

Для цитирования

Аржанников А. В., *Синицкий С. Л.*, *Старостенко Д. А.*, *Логачев П. В.*, *Бак П. А.*, *Никифоров Д. А.*, *Попов С. С.*, *Калинин П. В.*, *Самцов Д. А.*, *Сандалов Е. С.*, *Атлуханов М. Г.*, *Григорьев А. Н.*, *Воробьев С. О.*, *Петров Д. В.*, *Протас Р. В.* Пучково-плазменный генератор ТГц-излучения на основе индукционного ускорителя (проект ЛИУ-ПЭТ) // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 1. С. 28–42. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-28-42

Beam-Plasma Generator of the THz Radiation Based on an Induction Accelerator (LIA-PET Project)

Andrey V. Arzhannikov[1], Stanislav L. Sinitsky[2], Dmitry A. Starostenko[3]
Pavel V. Logachev[4], Petr A. Bak[5], Danila A. Nikiforov[6], Sergei S. Popov[7]
Petr V. Kalinin[8], Denis A. Samtsov[9], Evgeniy S. Sandalov[10]
Magomedrizy G. Atlukhanov[11], Aleksandr N. Grigoriev[12]
Semyon O. Vorobyov[13], Dmitry V. Petrov[14], Roman V. Protas[15]

[1–10]Budker Institute of Nuclear Physics SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

[12–15]Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russia Research Institute of Technical Physics
Snezhinsk, Russian Federation

[1]A.V.Arzhannikov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-8074-9737
[2]S.L.Sinitsky@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-8634-5346
[3]D.A.Starostenko@inp.nsk.su
[4]P.V.Logatchov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-3238-8703
[5]P.A.Bak@inp.nsk.su
[6]D.A.Nikiforov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0002-6034-5778
[7]S.S.Popov@inp.nsk.su
[8]P.V.Kalinin@inp.nsk.su
[9]D.A.Samtsov@inp.nsk.su
[10]E.S.Sandalov@inp.nsk.su, https://orcid.org/0000-0003-0126-7519
[11]M.G.Atlukhanov@inp.nsk.su
[12]alex_nick@mail.ru
[13]s.vorobiov2010@yandex.ru
[14]vniitf@vniitf.ru
[15]romanprotas@mail.ru

Abstract

BINP SB RAS together with RFNC-VNIITF carry out a research in the field of creating new sources of electromagnetic radiation in the THz range. Within the framework of this article, a project of the THz beam-plasma generator based on an electron beam generated by a linear induction accelerator is presented. The article provides generator scheme and describes the main elements of the electron beam formation system. In addition, the results of modeling the beam transport and its cross-section compression are presented. These calculations were performed under the current up to 1 kA and energy up to 1 MeV for the subsequent injection of the beam into the plasma section with plasma density up to 10^{15} –10^{16} cm^{-3}. The article also contains the analysis of previous experimental studies results which are connected with the beam-plasma interaction for various beam and plasma parameters. Based on this analysis, a requirement for the ratio of the beam and plasma electron densities was formulated. This requirement should be satisfied for creation of the beam-plasma generator of EM radiation for the range of 0.1–1 THz with a pulse power of several MW.

Keywords
Linear induction accelerator, relativistic electron beam, beam-plasma interaction, pumping of upper hybrid waves in plasma

Funding
The work described in Sections 1, 4, 5 was partly supported by the Russian Science Foundation, grant No. 19-12-00250.

For citation
Arzhannikov A. V., Sinitsky S. L., Starostenko D. A., Logachev P. V., Bak P. A., Nikiforov D. A., Popov S. S., Kalinin P. V., Samtsov D. A., Sandalov E. S., Atlukhanov M. G., Grigoriev A. N., Vorobyov S. O., Petrov D. V., Protas R. V. Beam-Plasma Generator of the THz Radiation Based on an Induction Accelerator (LIA-PET Project). *Siberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 28–42. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-28-42

Введение

Необходимость генерации потоков терагерцевого излучения с длиной волны ниже 1,5 мм вплоть до 0,1 мм при высоком уровне импульсной мощности связана с широким спектром их возможного применения. К таким применениям относятся: обнаружение и визуализация скрытых объектов в рамках систем безопасности [1–3], подавление рабочего состояния скрытых радиоэлектронных средств, регистрация изображения объектов в пучках ТГц-излучения в дополнение к оптическому [4; 5], ускорение частиц кильватерным полем в диэлектрической трубке (DWA) в условиях черенковского резонанса с распространяющейся волной [6–8], анализ и модификация состояний твердого тела со сложной супрамолекулярной структурой (см., например, [9; 10]) и др. В качестве источников излучения с длинами волн диапазона 1–0,3 мм при умеренной мощности (до 200 кВт), которая приемлема в сфере исследовательских работ, могут применяться импульсные гиротроны с сильным (до 50 Тл) магнитным полем [11]. Необходимость использования магнитного поля с таким уровнем индукции для генерации в субмм-диапазоне вызвана тем, что частота излучения, генерируемого по гиротронному механизму, прямо пропорциональна индукции магнитного поля. Импульс тока пучка электронов в таком гиротроне ТГц-диапазона имеет величину масштаба 10–15 А, что с учетом КПД прибора на уровне 20 % ограничивает мощность излучения на отмеченном выше уровне. Отсутствие инженерных решений для устройств, обеспечивающих более мощные потоки субмм-излучения, стимулирует исследования по поиску новых механизмов генерации с использованием электронных пучков с килоамперным током. Таким механизмом является интенсивное взаимодействие релятивистского электронного пучка (РЭП) с плазмой на черенковском резонансе между электронами пучка и ветвью верхнегибридных электронных колебаний в плазме [12; 13]. Теоретическое описание возможности использования такого механизма взаимодействия в пучково-плазменной системе для получения электромагнитного излучения субмм-диапазона дано в работах [14–16]. Его реализация в эксперименте на пути реального получения потоков субмм-излучения мощностью около десяти мегаватт осуществлена на установке ГОЛ-ПЭТ, на которой для накачки плазменных колебаний в режиме единичных импульсов используется килоамперный пучок микросекундной длительности [17]. Для использования таких потоков излучения в сфере практических применений представляется рациональным переход к многоимпульсному режиму генерации. Такой режим генерации, по нашему мнению, осуществим с использованием последовательности импульсов, поступающих от линейного индукционного ускорителя (ЛИУ), созданного в ИЯФ (см. описание ЛИУ в [18–22]. В работе представлены результаты разработки проекта пучково-плазменного генератора ЛИУ-ПЭТ, в котором планируется реализовать генерацию мегаваттного потока субмм-излучения в рамках указанного выше пучково-плазменного взаимодействия.

1. Общая схема пучково-плазменного эксперимента по генерации субмм-излучения

На рис. 1 представлено схематическое изображение структуры пучково-плазменного эксперимента по генерации ТГц-излучения с использованием пучка, инжектируемого в плазменный шнур из ускорителя ЛИУ. В соответствии с этой схемой генерируемый в ЛИУ сильноточный релятивистский электронный пучок (РЭП), сжатый по сечению в нарастающем магнитном поле, направляется в плазменный шнур, где реализуется интенсивное пучково-плазменное взаимодействие. После прохождения через плазму этот пучок поступает в вакуумный объем, в котором происходит отделение пучка от генерируемого в плазме потока ТГц-излучения.

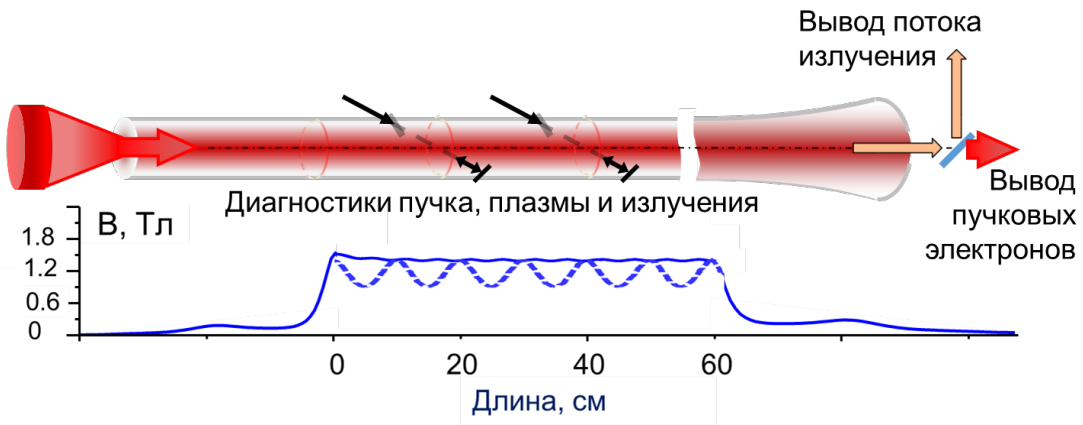


Рис. 1. Общая схема пучково-плазменной системы для генерации потока ТГц-излучения
Fig. 1. General scheme of a beam-plasma system for generating a THz radiation flux

В этих экспериментах плазменный шнур диаметром 12 мм и длиной около 30 см с плотностью электронов масштаба $5 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$ создается в продольном магнитном поле с индукцией до 1,5–2 Тл до начала инжекции пучка. В эту плазму инжектируется пучок с током до 0,5 кА, длительностью ~70 нс. Диаметр электронного пучка внутри плазменного шнура составляет 4 мм. Генерируемое излучение распространяется вдоль оси пучково-плазменной системы и выходит вместе с пучком из плазменного столба в случае, когда на торце шнура обеспечен резкий спад плотности плазмы. Вышедший из плазмы в вакуум поток излучения отделяется от электронного пучка и направляется в перпендикулярном к оси направлении с помощью специальной разделительной фольги. Уходящий перпендикулярно поток излучения выводится через окно в атмосферу для анализа его характеристик. Распространяющийся далее вдоль оси отработавший электронный пучок принимается коллектором.

2. Получение исходного РЭП в ЛИУ и трансформация его сечения для инжекции в плазму

Исходный электронный пучок генерируется в ускорительном вакуумном диоде без магнитного поля в условиях аксиально-симметричной геометрии ускорительного промежутка (см. [18]). Схема диодного узла представлена на рис. 2. Эмитирующий электроны катод с заданной геометрией поверхности 1 закреплен на катододержателе 2. Фиксация расположения катододержателя в заданном месте на оси системы задает необходимое расстояние между катодом и фокусирующим электродом 3. Термоэмиссионный диспенсерный катод способен обеспечить плотность тока с эмитирующей поверхности на уровне 10 А/см^2. Необходимое ускоряющее напряжение вырабатывается совокупностью магнитных индукторов и подается на ускоритель-

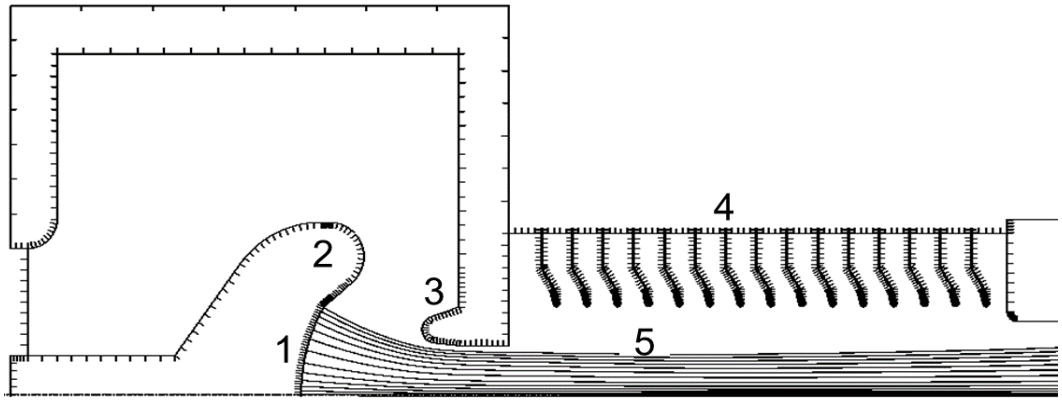


Рис. 2. Схематическое изображение диодного узла: *1* – термоэмиссионная поверхность; *2* – катододержатель; *3* – фокусирующий электрод; *4* – ускорительная трубка; *5* – электронный пучок
Fig. 2. Schematic representation of the diode node: *1*—thermal emission surface; *2*—cathode holder; *3*—focusing electrode; *4*—accelerating tube; *5*—electron beam

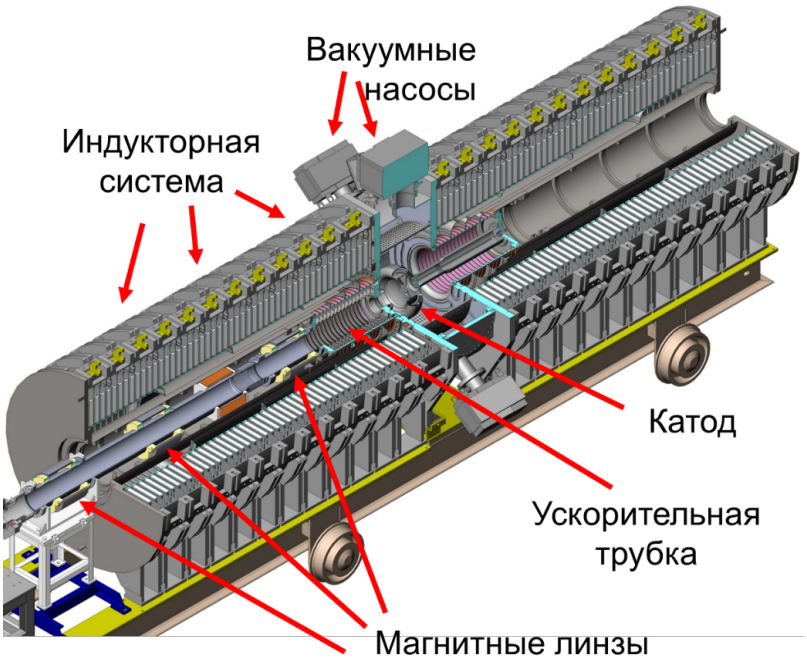


Рис. 3. Схематическое изображение конструкции линейного индукционного ускорителя
Fig. 3. The linear induction accelerator design. Blue arrow shows the direction of the electron beam

ную трубку 4, которая представляет собой секционированный высоковольтный изолятор, рассчитанный на приложение мегавольтного импульса напряжения с длительностью нескольких сотен наносекунд. Электронный поток, выходящий с эмитирующей поверхности 1, сжимается в пучок 5 с малой угловой расходимостью и далее распространяется на расстояние в несколько метров с сохранением поперечного эмиттанса. Сохранение этой характеристики пучка обеспечивается правильным подбором конфигурации магнитного поля фокусирующих линз.

Конструкция индукционного ускорителя, в котором используется описанный ускорительный диод, представлена на рис. 3. Ускоритель представляет собой импульсный высоковольтный трансформатор индукторного типа, состоящий из двух частей. В центральной его части расположен корпус катода с четырьмя откачными портами для получения высокого вакуума.

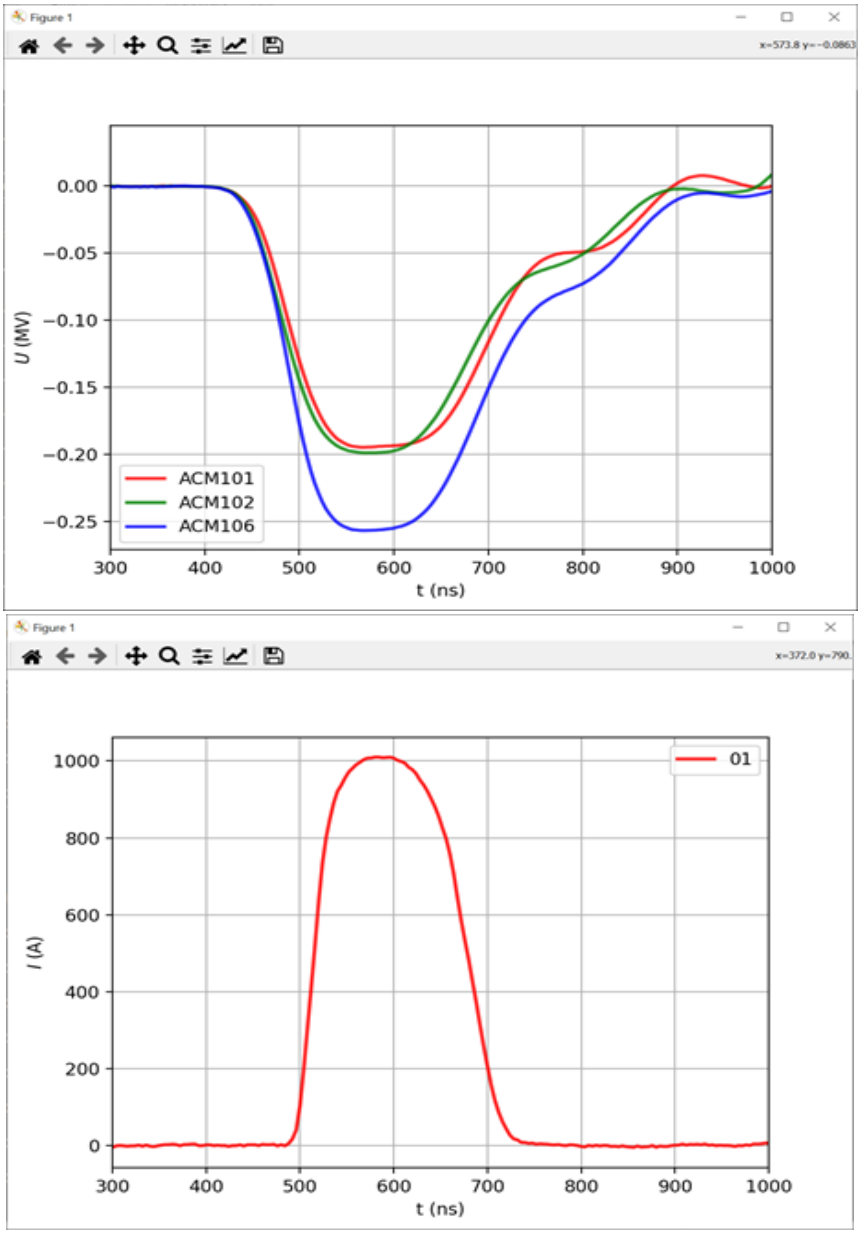


Рис. 4. Осциллограммы импульсов напряжения на ускорительном диоде (синяя линия на верхнем рисунке) и на элементах ускорительной трубки (красная и зеленая линии на верхнем рисунке), а также импульса тока на выходе из ЛИУ (красная линия на нижнем рисунке)

Fig. 4. Oscillograms of voltage pulses on the accelerating diode (blue line on the upper figure) and on the elements of the accelerating tube (red and green lines on the upper figure), as well as the current pulse at the LIA output (red line on the lower figure)

К корпусу примыкают два высоковольтных секционированных изолятора. На первом изоляторе при помощи системы высоковольтного импульсного питания формируется импульс отрицательного напряжения, который подается на катод. Ко второму изолятору прикладывается положительный импульс напряжения, создающий продольное ускоряющее электрическое поле. В результате прохождения сформированным в катод-анодном зазоре пучком этих двух ускоряющих промежутков его электроны набирают энергию до 1 МэВ и далее транспортируется по вакуумному каналу в сопровождении полей импульсных соленоидов, выполняющих функции фокусирующих линз. Малая угловая расходимость электронов пучка, генерируемого

в диоде ускорителя, обеспечивает возможность сжатия его сечения до диаметра в несколько миллиметров, что позволяет применить сжатый таким образом пучок для эффективной накачки плазменных волн в пучково-плазменном генераторе.

На рис. 4 представлены осциллограммы напряжений на диоде и ускорительной трубке, а также тока электронного пучка на выходе из ускорителя, зарегистрированные в типичном эксперименте. Из рисунка видно, что длительность импульса тока пучка на его полувысоте имеет величину более 150 нс, а амплитуда достигает 1 кА. При этом энергия электронов пучка, набираемая при движении в ускорительном диоде и последующем ускорительном промежутке, достигает уровня 1 МэВ.

Следует отметить, что в экспериментах, описанных в [12; 13; 17], генерация терагерцевого излучения в пучково-плазменной системе осуществлялась при микросекундной длительности импульса инжектируемого пучка. В этом отношении длительность импульса электронного пучка, генерируемого в ЛИУ, масштаба 150 нс, на первый взгляд, может показаться недостаточной для развития процесса накачки плазменных колебаний. Однако это не так. В экспериментах на установке ИНАР [23; 24] уже доказана возможность развития двухпотоковой неустойчивости с относительной потерей энергии электронами пучка в плазме на уровне выше 30 % в условиях длительности инжектируемого пучка 50–100 нс.

3. Анализ возможности генерации ТГц-излучения в пучково-плазменной системе при длительности импульса пучка масштаба 0.1 мкс

В работах [23; 24] описаны результаты экспериментов на установке ИНАР по релаксации в плазме с плотностью $n_p = 4 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$ пучка МэВ-ных электронов с плотностью тока около 1.5 кА/см^2 (плотность электронов в пучке $n_b = 3 \cdot 10^{11}$ см$^{-3}$) при различном угловом разбросе инжектируемых электронов. Этот разброс задавался толщиной титановой фольги, отделяющей ускорительный диод от плазменного столба, через которую инжектировался пучок. Длительность импульса тока пучка на полувысоте в этих экспериментах имела величину 50 нс. В этих работах было показано, что с уменьшением углового разброса инжектируемых электронов с 24° до 7° энерговыделение пучка на расстоянии 20 см от входа его в плазменный столб возрастает с $0{,}3 \cdot 10^{18}$ до $3 \cdot 10^{18}$ эВ см$^{-1}$ (см. рис. 5). При этом характерный пространственный масштаб – длина релаксации пучка, на котором происходит снижение энерговыделения пучка в 2–3 раза по мере его продвижения по плазменному столбу, резко уменьшается от полутора метров до нескольких сантиметров. Зависимость длины релаксации пучка от углового разброса электронов, определенная по результатам данного эксперимента, хорошо совпадала с оценками ее величины в рамках теоретической модели, в которой предполагалось ограничение на амплитуду плазменных колебаний из-за развития сильной турбулентности в режиме «плато» [25; 26]. Детальное сопоставление результатов, отмеченных выше экспериментов, с различными теоретическими моделями проведено в работах [27; 28].

Возможность продвижения в исследованиях интенсивного взаимодействия РЭП с плазмой при повышенной ее плотности была продемонстрирована в последующих экспериментах на этой установке [24]. Их целью было сопоставление энерговыделения пучка в плазме на первых двух десятках сантиметров плазменного столба при инжекции в нее РЭП с малым угловым разбросом (менее 10°). Эти эксперименты проводились в условиях, когда плотность исходной плазмы варьировалась в пределах от $n_p = 5 \cdot 10^{13}$ см$^{-3}$ до $n_p = 5 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$, а электронная температура была на уровне 2–3 эВ. Результаты этих исследований представлены на рис. 5. Из представленных результатов следует, что при плотности электронов в пучке $n_b = 2 \cdot 10^{11}$ см$^{-3}$ (1 кА/см^2) эффективная релаксация РЭП реализуется при плотности плазмы n_p от 10^{13} см$^{-3}$ до $(2\text{-}3) \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$ в то время как при повышенной плотности электронов в пучке $n_b = 10^{12}$ см$^{-3}$ (5 кА/см^2) эффективность этого процесса остается высокой вплоть до плотности $n_p = 4 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$. Здесь уместно напомнить, что длительность импульсов пучка на уста-

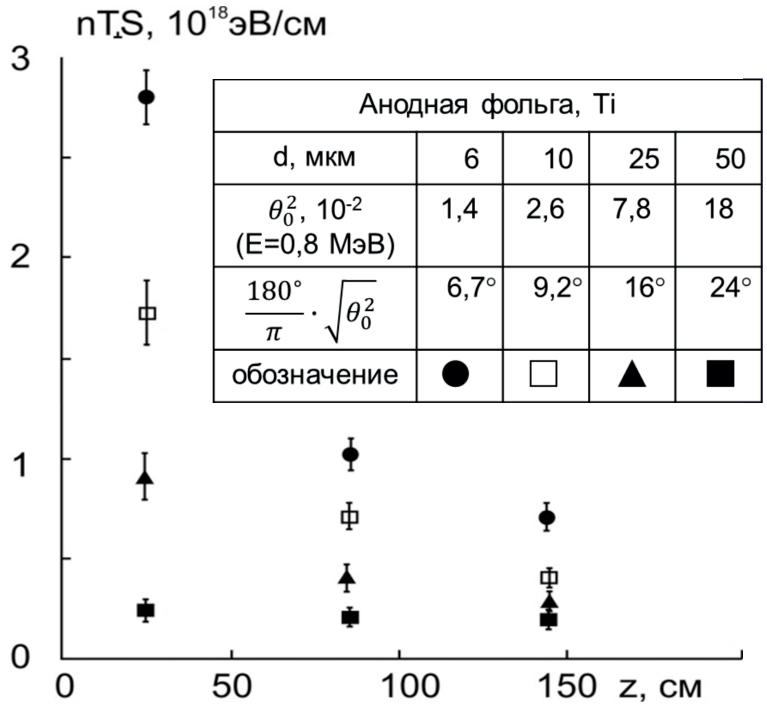


Рис. 5. Распределение поперечной энергии плазмы по длине плазменного столба с плотностью $n_p = 4 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$ при релаксации пучка с плотностью электронов $n_b = 2 \cdot 10^{11}$ см$^{-3}$ при различных величинах углового разброса в условиях продольного ведущего магнитного поля $B_0 = 2{,}5$ Тл

Fig. 5. Distribution of the transverse energy of plasma along the length of the plasma column with a density of $n_p = 4 \cdot 10^{14}$ cm^{-3} during the beam relaxation with electron density of $n_b = 2 \cdot 10^{11}$ cm^{-3} at various values of angular spread under the conditions of longitudinal leading magnetic field $B_0 = 2{,}5$ T

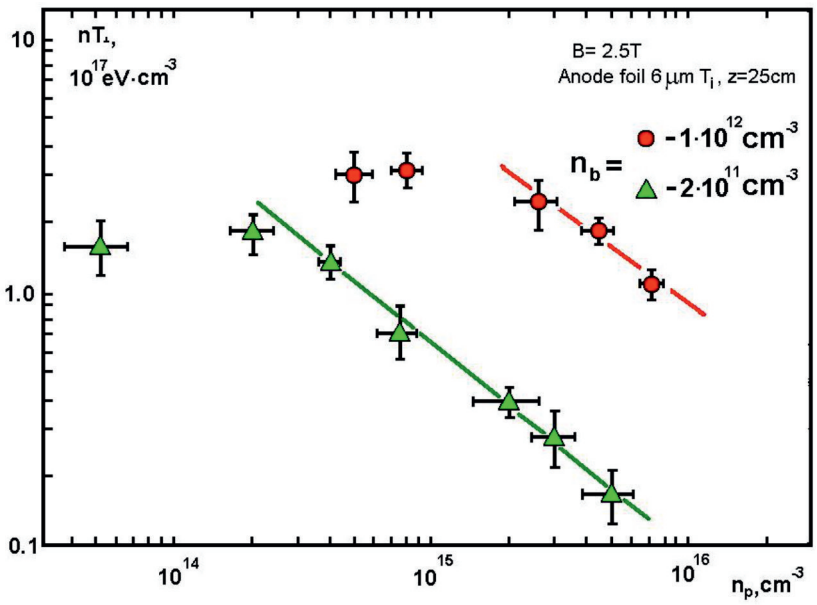


Рис. 6. Зависимость эффективности взаимодействия мощного РЭП с плазмой от величины ее плотности n_p для двух значений плотности электронов в пучке $n_b = 2 \cdot 10^{11}$ см$^{-3}$ и $1 \cdot 10^{12}$ см^{3}

Fig. 6. Dependence of the efficiency of high-power REB interaction with plasma on its density np for two values of electron density in the beam $n_b = 2 \cdot 10^{11}$ cm^{-3} and $1 \cdot 10^{12}$ cm^{-3}

новке ИНАР имела масштаб 50 нс и плотность тока пучка на уровне 5 кА/см^2 в то время, как ЛИУ обеспечивает длительность генерации пучка 150 нс и плотность тока сжатого пучка ~ 10 кА/см^2. Следовательно, в планируемых экспериментах на установке ЛИУ-ПЭТ можно рассчитывать на релаксацию пучка с торможением электронов, обеспечивающую потерю ими не менее 30 % от их исходной энергии на раскачку плазменных колебаний в плазме с плотностью вплоть до $n_p = 4 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$.

Принимая во внимание результаты исследований на установке ИНАР, можно планировать эксперименты на установке ЛИУ-ПЭТ по получению импульсов излучения на плазменной частоте при плотности плазмы $n_p = 4 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$ только если плотность тока пучка будет масштаба 5 кА/см^2 и выше. В связи с этим требуется решить задачи по транспортировке пучка, выходящего из ускорительного диода, до плазменного шнура, удерживаемого в соленоиде, и по сжатию сечения пучка для достижения необходимой плотности тока.

4. Транспортировка пучка и сжатие его сечения применительно к инжекции в плазменный шнур

Поиск необходимых условий для осуществления эффективной транспортировки и сжатия пучка по сечению осуществлялся с помощью моделирования в компьютерном коде UltraSAM [29]. Результат этого моделирования для случая генерации в диоде пучка с током 0.5 кА при напряжении на ускорительном диоде 1 МВ представлен на рис. 7. Он свидетельствует о том, что генерируемый в ЛИУ пучок устойчиво транспортируется на расстояние масштаба двух метров и далее может быть сжат до диаметра, необходимого для ввода его в плазменный шнур диаметром 12 мм.

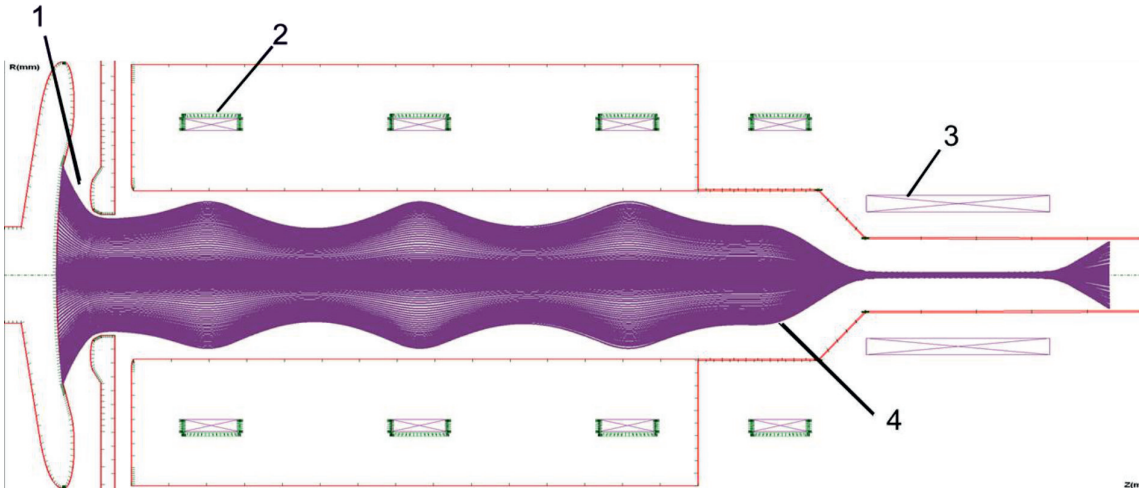


Рис. 7. Схема транспортировки пучка и сжатие его по сечению для инжекции в плазменный шнур. Цифрами указаны: 1 – ускорительный диод; 2 – соленоиды транспортного канала; 3 – соленоид с плазменным шнуром; 4 – огибающая сильноточного РЭП. Расчет выполнен с использованием UltraSAM для тока пучка 0,5 кА при энергии электронов 1 МэВ

Fig. 7. Scheme of beam transportation and its compression over the cross section for injection into the plasma column. The numbers indicate: 1—accelerating diode; 2—solenoids of the transport channel; 3—solenoid with a plasma filament; 4—high-current REB envelope. The calculation was performed using UltraSAM for a beam current of 0.5 kA at an electron energy of 1 MeV

Возможность сжатия электронного пучка до диаметра 4 мм в области плазменного шнура подтверждается моделированием с помощью K-V envelope code [30], что соответствует плотности тока пучка более 10 кА/см^2. Этот результат представлен на рис. 8.

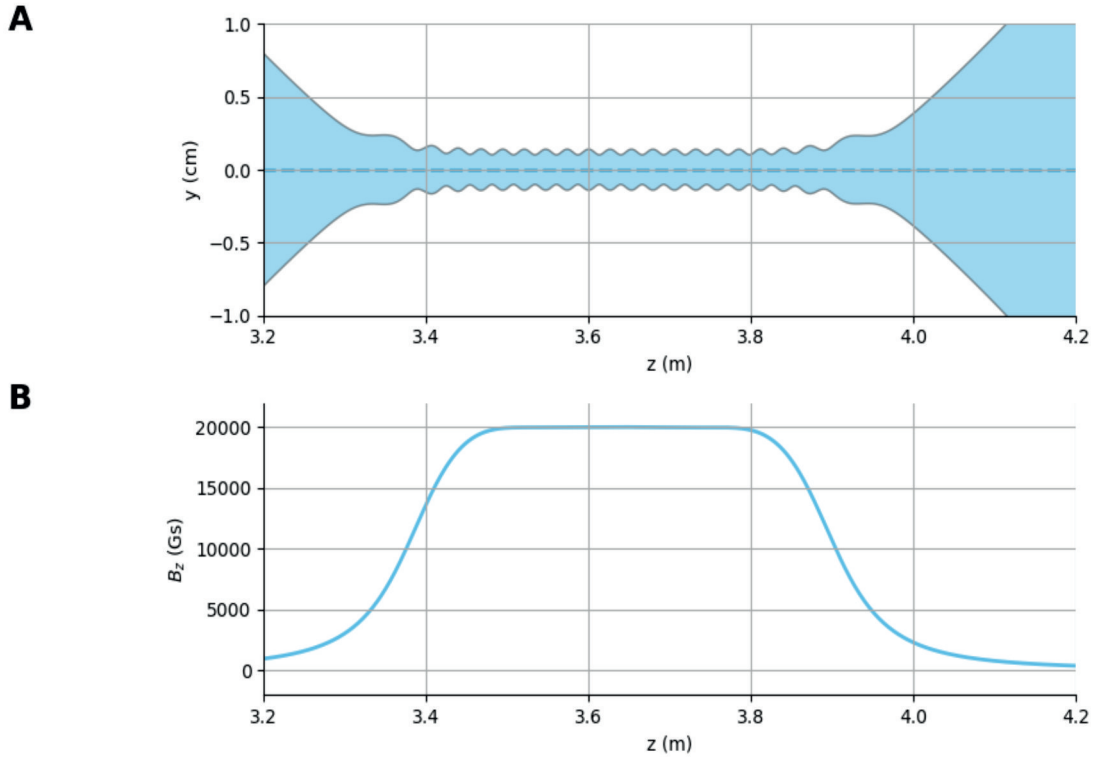


Рис. 8. Характерный вид огибающей пучка в плазменной секции, предназначенной для генерации ТГц-излучения. Ток пучка – 1 кА, энергия электронов – 1 МэВ, диаметр соленоида – 12 см, длина соленоида – 50 см

Fig. 8. Typical view of the beam envelope in plasma section designed to generate THz radiation. The beam current is 1 kA, the electron energy is 1 MeV, the solenoid diameter is 12 cm, and the solenoid length is 50 cm

Таким образом, по результатам компьютерного моделирования транспортировки пучка и сжатия его сечения продемонстрирована возможность достижения параметров пучка, необходимых для накачки плазменных верхнегибридных колебаний при плотности плазмы $n_p = (4 – 5) \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$. Пример возможных вариантов проведения экспериментов по генерации терагерцевого излучения в плазменном столбе с использованием для инжекции пучка, поступающего от ЛИУ, приведен в таблице.

Возможные параметры экспериментов с использованием пучка из инжектора ЛИУ

Possible parameters of the experiments on generation of THz radiation using a beam from a LIA

Плотность плазмы, · 10^{15} см$^{-3}$	**0,4**	**1,6**	**3,2**	**6,4**
Основная гармоника, ТГц f_p [Гц] = 9,0 · 10^3 · $n^{1/2}$ [см$^{-3}$]	0,16	0,32	0,45	0,64
Удвоенная частота (2 f_p), ТГц	0,32	0,64	0,90	1,28
Требуемая плотность тока, кА/см$^{-2}$	1	4	8	16

Столб плазмы с необходимой плотностью $n_p = (2–5) \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$ и длиной около 30 см планируется создавать с помощью высоковольтного (до 20 кВ) разряда в газовом облаке, сформированном импульсным напуском газа в вакуумной камере. Полученная в расчетах плотность тока сжатого пучка около 10 кА/см^2 вполне приемлема для эффективной накачки верхнегибридных плазменных колебаний в таком плазменном столбе, что, в свою очередь, должно обеспечить ге-

нерацию мощного потока излучения с частотой ~ 0.5 ТГц. С другой стороны, малая плотность тока пучка в областях его распространения вне плазменного столба позволяет отделить эти области от плазмы достаточно тонкими фольгами, чтобы существенно не увеличить угловой разброс электронов пучка.

Заключение

В экспериментах на установке ГОЛ-ПЭТ [17] при инжекции килоамперного пучка микросекундной длительности в плазменный столб, имеющий резкую границу по плотности на его торце, мощность в потоке терагерцевого излучения на верхнегибридной частоте плазменных колебаний, выведенном вдоль магнитного поля через окно в атмосферу, достигает уровня 10 МВт. Угловая расходимость потока имеет величину ~ 5°. Это дает основу для разработки генератора терагерцевого излучения мегаваттной мощности на основе пучково-плазменного взаимодействия.

Линейный индукционный ускоритель обеспечивает генерацию электронного пучка с малым эмиттансом при энергии электронов до 1 МэВ, токе пучка до 1 кА и длительностью импульса на полувысоте около 150 нс. Расчеты и опыты по компрессии такого пучка продемонстрировали возможность сжатия сечения этого пучка до диаметра 4 мм, что означает достижимость плотности тока свыше 10 кА/см^2.

С высокой вероятностью можно ожидать, что такой пучок применим для накачки плазменных колебаний в плазменном шнуре с плотностью $n_p = (2–5) \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$. Подтверждением возможности высокоэффективного торможения электронов такого пучка с длительностью импульса масштаба 100 нс служат результаты проведенных ранее экспериментов на установке ИНАР, которые осуществлены в условиях инжекции пучка с плотностью тока около 10 кА/см^2 при такой же длительности импульса. Исходя из описанных выше результатов исследований ведется разработка и изготовление узлов пучково-плазменного генератора ЛИУ-ПЭТ для генерации мощных потоков излучения в интервале частот 0.5–1.5 ТГц на основе пучка, генерируемого в линейном индукционном ускорителе.

Список литературы

1. ThruVision T5000 T-Ray Camera sees through Clothes (http://www.i4u.com/article15314.html). I4u.com. Retrieved 17 May 2012.
2. Parascandola, Bruno (23 January 2013). NYPD Commissioner says department will begin testing a new high-tech device that scans for concealed weapons (http://www.nydailynews.com/new-york/nypdreadies-scan-and-frisk-article-1.1245663). NYDailyNews.com. Retrieved 10 April 2013.
3. Parascandola, Rocco (22 February 2017). NYPD's pricey, controversial 'T-Ray' gun sensors sit idle, but that's OK with cops. New York Daily News. Retrieved 22 February 2017.
4. **P. Hillger, J. Grzyb, R. Jain and U. R. Pfeiffer,** Terahertz Imaging and Sensing Applications With Silicon-Based Technologies, in IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, vol. 9, no. 1, pp. 1-19, Jan. 2019, doi: 10.1109/TTHZ.2018.2884852.
5. **Ghavidel A. et al.** A sensing demonstration of a sub THz radio link incorporating a lens antenna //Prog. Electromagn. Res. Lett. 2021. Т. 99. С. 119–126.
6. **Nanni E. A. et al.** Terahertz-driven linear electron acceleration //Nature communications. 2015. Т. 6. №. 1. С. 8486.
7. **Jing C.** Dielectric wakefield accelerators //Reviews of Accelerator Science and Technology. 2016. Т. 9. С. 127–149.
8. **Thompson M. C. et al.** Breakdown limits on gigavolt-per-meter electron-beam-driven wakefields in dielectric structures //Physical review letters. 2008. Т. 100. №. 21. С. 214801.

9. **Aree T. et al.** Low-frequency lattice vibrations from atomic displacement parameters of α-FOX-7, a high energy density material //Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2022. Т. 78. №. 3.
10. **Аржанников А. В., Логачев П. В., Бак П. А. и др.** Проект пучково-плазменного генератора ТГц-излучения на килоамперном пучке линейного индукционного ускорителя // Международная звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу ICPAF-2023. 2023. С. 251–251.
11. **Глявин М. Ю., Лучинин А. Г., Богдашов А. А. и др.** Экспериментальное исследование импульсного терагерцевого гиротрона с рекордными значениями мощности и эффективности // Известия вузов. Радиофизика. 2013. Т. 56. №. 8–9. С. 550.
12. **Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Kalinin P.V. et al.** Subterahertz generation by strong langmuir turbulence at two-stream instability of high current 1-MeV REBs. 2010.
13. **Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Kuznetsov S. A. et al.** Subterahertz emission at strong REB-plasma interaction in multimirror trap GOL-3 //Fusion Science and Technology. 2011. Т. 59. №. 1Т. С. 74–77.
14. **Arzhannikov A. V., and Timofeev I. V.** Generation of powerful terahertz emission in a beam-driven strong plasma turbulence. Plasma Physics and Controlled Fusion 54.10 (2012): 105004.
15. **Аржанников А. В., Тимофеев И. В.** Интенсивное пучково-плазменное взаимодействие как источник субмиллиметрового излучения. Вестник НГУ. Серия: Физика, 11(4), pp.78–104, 2016.
16. **Глинский В. В., Тимофеев И. В., Анненков В. В., Аржанников А. В.** // Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14, № 4. С. 5–16. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-5-16.
17. **A. V. Arzhannikov, S. L. Sinitsky, S. S. Popov et al.** Energy Content and Spectral Composition of a Submillimeter Radiation Flux Generated by a High-Current Electron Beam in a Plasma Column With Density Gradients, in IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 50, no. 8, pp. 2348-2363, Aug. 2022, doi: 10.1109/TPS.2022.3183629.
18. **D. A. Starostenko, P. V. Logachev, A. V. Akimov et al.** Results of operating LIA-2 in radiograph mode, Phys. Part. Nuclei Lett., Vol.11, no.5, pp.660–664, 2014. https://doi org/10.1134/S1547477114050264.
19. **E. S. Sandalov, S. L. Sinitsky, A.V. Burdakov et al.** Electrodynamic System of the Linear Induction Accelerator Module, in IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 49, no. 2, pp. 718-728, Feb. 2021, doi: 10.1109/TPS.2020.3045345.
20. **Сандалов Е. С., Синицкий С. Л., Сковородин Д. И. и др.** Исследование поперечной неустойчивости сильноточного релятивистского электронного пучка в линейном индукционном ускорителе // Сибирский физический журнал. 2022;17(1):5-22. https://doi.org/10.25205/2541-9447-2022-17-1-5-22
21. **Сандалов Е. С., Синицкий С. Л., Сковородин Д. И. и др.** Исследование инкремента поперечной неустойчивости килоамперного электронного пучка в ЛИУ для его применения в терагерцевом ЛСЭ // Сибирский физический журнал. 2022. Т. 17, № 2. С. 16–29. DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-2-16-29
22. **Nikiforov D. A., Petrenko A.V., Sinitsky S.L. et al.** Investigation of high current electron beam dynamics in linear induction accelerator for creation of a high-power THz radiation source. Journal of Instrumentation 16.11 (2021): P11024.
23. **Аржанников А. В., Бурдаков А. В., Койдан В. С. и др.** Письма в ЖЭТФ, 1978, Т. 227, вып. 3, стр. 173–177.
24. **Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Burmasov V. S. et al.** Plasma heating in a solenoid by relativistic electron beam. Proc. of the 3rd Inter. Conf. on High Power Elec. and Ion Beam Res. and Tech., Novosibirsk, 1979, pp. 29–42.
25. **Brejzman B. N., Ryutov D. D.** Nuclear Fusion. 1974. Vol. 14. N6. P. 873–907.

26. **Галеев А. А., Сагдеев Р. З., Шапиро В. Д., Шевченко В. И.** Релаксация сильточных электронных пучков и модуляционная неустойчивость. ЖЭТФ, 1977, Т. 72. С. 507–517.
27. **Аржанников А. В.** Макроскопические характеристики взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой в магнитном поле: дисс. …канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, 1980.
28. **Аржанников А. В., Синицкий С. Л.** Килоамперные электронные пучки для накачки колебаний в вакууме и плазме. НГУ. Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2016. 258 с. С. 66–75.
29. **Ivanov A. V., Tiunov M. A.** ULTRASAM-2D code for simulation of electron guns with ultra high precision, in Proceeding of EPAC-2002, Paris, 2002, pp. 1634–1636.
30. KV-envelope code, https://github.com/fuodorov/kenv

References

1. ThruVision T5000 T-Ray Camera sees through Clothes (http://www.i4u.com/article15314.html). I4u.com. Retrieved 17 May 2012.
2. **Parascandola, Bruno** (23 January 2013). NYPD Commissioner says department will begin testing a new high-tech device that scans for concealed weapons (http://www.nydailynews.com/new-york/nypdreadies-scan-and-frisk-article-1.1245663). NYDailyNews.com. Retrieved 10 April 2013.
3. **Parascandola, Rocco** (22 February 2017). NYPD's pricey, controversial 'T-Ray' gun sensors sit idle, but that's OK with cops. New York Daily News. Retrieved 22 February 2017.
4. **P. Hillger, J. Grzyb, R. Jain and U. R. Pfeiffer,** Terahertz Imaging and Sensing Applications With Silicon-Based Technologies, in IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology, vol. 9, no. 1, pp. 1-19, Jan. 2019, doi: 10.1109/TTHZ.2018.2884852.
5. **Ghavidel A. et al.** A sensing demonstration of a sub THz radio link incorporating a lens antenna // Prog. Electromagn. Res. Lett. 2021. T. 99. C. 119–126.
6. **Nanni E. A. et al.** Terahertz-driven linear electron acceleration //Nature communications. 2015. T. 6. №. 1. C. 8486.
7. **Jing C.** Dielectric wakefield accelerators //Reviews of Accelerator Science and Technology. 2016. T. 9. C. 127–149.
8. **Thompson M. C. et al.** Breakdown limits on gigavolt-per-meter electron-beam-driven wakefields in dielectric structures //Physical review letters. 2008. T. 100. №. 21. C. 214801.
9. **Aree T. et al.** Low-frequency lattice vibrations from atomic displacement parameters of α-FOX-7, a high energy density material //Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2022. T. 78. №. 3.
10. **Arzhannikov A. V., LogachevP. V., BakP. A. etal.** Theproject ofa beam-plasmagenerator of THzradiation on the kiloamperebeam of a linear induction accelerator// 50th International Conference on Plasma Physics and Controlled Fusion(ICPAF-2023). 2023. P. 251–251.
11. **GlyavinM. Yu., LychininA. G., BogdashovA. A. et al.** Experimental investigation of the pulsed terahertz gyrotron with record-breaking power and efficiency parameters // Radiophysics and Quantum Electronics. 2013. vol. 56., no. 8–9,P. 550.
12. **Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Kalinin P.V. et al.** Subterahertz generation by strong langmuir turbulence at two-stream instability of high current 1-MeV REBs. 2010.
13. **Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Kuznetsov S. A. et al.** Subterahertz emission at strong REB-plasma interaction in multimirror trap GOL-3 //Fusion Science and Technology. 2011. T. 59. №. 1T. C. 74–77.
14. **Arzhannikov A. V. and Timofeev I. V.** Generation of powerful terahertz emission in a beam-driven strong plasma turbulence. Plasma Physics and Controlled Fusion 54.10 (2012): 105004.
15. **Arzhannikov A. V. and Timofeev I. V.** Intense beam-plasma interaction as a source of sub-mm radiation. Bulletinof NGU. Series: Physics, 11(4), pp.78–104, 2016.

16. **GlinskyV. V., TimofeevI. V., AnnekovV. V., ArzhannikovA. V.** // Siberian Journal of Physics.2019. v. 14, no. 4. P. 5–16. DOI 10.25205/2541-9447-2019-14-4-5-16.
17. **A. V. Arzhannikov, S. L. Sinitsky, S. S. Popov et al.** Energy Content and Spectral Composition of a Submillimeter Radiation Flux Generated by a High-Current Electron Beam in a Plasma Column With Density Gradients, in IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 50, no. 8, pp. 2348-2363, Aug. 2022, doi: 10.1109/TPS.2022.3183629.
18. **D. A. Starostenko, P. V. Logachev, A. V. Akimov et al.** Results of operating LIA-2 in radiograph mode, Phys. Part. Nuclei Lett., Vol.11, no.5, pp.660–664, 2014. https://doi.org/10.1134/S1547477114050264.
19. **E. S. Sandalov, S. L. Sinitsky, A.V. Burdakov et al.** Electrodynamic System of the Linear Induction Accelerator Module, in IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 49, no. 2, pp. 718-728, Feb. 2021, doi: 10.1109/TPS.2020.3045345.
20. **Sandalov E. S., Sinitsky S. L., Skovorodin D. I. et al.** Investigation of Transverse Instability of a High-Current Relativistic Electron Beam in a Linear Induction Accelerator. Siberian Journal of Physics, 2022, vol. 17, no. 1, pp. 5–22. (in Russ.) DOI 10.25205/2541- 9447-2022-17-1-5-22
21. **SandalovE. S., SinitskyS. L., SkovorodinD. I. et al.** Investigation of the Increment of Transverse Instability of a Kiloampere Electron Beam in a Linear Induction Accelerator for Its Use in a Terahertz FEL. Siberian Journal of Physics. 2022. vol. 17, no. 2, pp. 16–29. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-2-16-29
22. **Nikiforov D. A., Petrenko A. V., Sinitsky S. L. et al.** Investigation of high current electron beam dynamics in linear induction accelerator for creation of a high-power THz radiation source. Journal of Instrumentation 16.11 (2021): P11024.
23. **ArzhannikovA. V., BurdakovA. V., KoidanV. S. et al.** JETP Letters, 1978, vol. 227, no. 3, pp. 173–177.
24. **Arzhannikov A. V., Burdakov A. V., Burmasov V. S. et al.** Plasma heating in a solenoid by relativistic electron beam. Proc. of the 3rd Inter. Conf. on High Power Elec. and Ion Beam Res. and Tech., Novosibirsk, 1979, pp. 29–42.
25. **BrejzmanB. N., RyutovD. D.** NuclearFusion. 1974. Vol. 14. N6. P. 873–907.
26. **Galeev A. A., Sagdeev R. Z., Shapiro V. D., Shevchenko V. I.** Relaxation of high-current electron beams and modulation instability. JETP, 1977, V. 72. P. 507–517.
27. **ArzhannikovA. V.** Macroscopic characteristics of the interaction of a relativistic electron beam with a plasma in a magnetic field: diss. …cand. Phys.-Math. Sciences. Novosibirsk, 1980.
28. **ArzhannikovA. V., SinitskyS. L.** Kiloampere electron beams for pumping oscillations in vacuum and plasma. NSU. Novosibirsk: IPTs NSU, 2016. 258 p. pp. 66–75.
29. **Ivanov A. V., Tiunov M. A.** ULTRASAM-2D code for simulation of electron guns with ultra high precision, in Proceeding of EPAC-2002, Paris, 2002, pp. 1634–1636.
30. KV-envelope code, https://github.com/fuodorov/kenv

Информация об авторах

Аржанников Андрей Васильевич, доктор физико-математических наук

Синицкий Станислав Леонидович, кандидат физико-математических наук

Старостенко Дмитрий Анатольевич, научный сотрудник

Логачев Павел Владимирович, доктор физико-математических наук, академик РАН

Бак Петр Алексеевич, старший научный сотрудник

Никифоров Данила Алексеевич, научный сотрудник

Попов Сергей Сергеевич, кандидат физико-математических наук

Калинин Петр Валерьевич, научный сотрудник

Самцов Денис Алексеевич, младший научный сотрудник

Сандалов Евгений Сергеевич, научный сотрудник

Атлуханов Магомедризы Гаджимурадович, младший научный сотрудник

Григорьев Александр Николаевич, кандидат технических наук

Воробьев Семен Олегович, инженер-исследователь

Петров Дмитрий Витальевич, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН

Протас Роман Викторович, кандидат технических наук

Information about the Authors

Andrey V. Arzhannikov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Stanislav L. Sinitsky, Candidate of Physical and Mathematical Sciences

Dmitry A. Starostenko, researcher

Pavel V. Logachev, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician RAS

Petr A. Bak, senior researcher

Danila A. Nikiforov, researcher

Sergei S. Popov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences

Petr V. Kalinin, researcher

Denis A. Samtsov, junior researcher

Evgeniy S. Sandalov, researcher

Magomedrizy G. Atlukhanov, junior researcher

Aleksandr N. Grigoriev, Candidate of Technical Sciences

Semyon O. Vorobyov, research engineer

Dmitry V. Petrov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Corresponding Member RAS

Roman V. Protas, Candidate of Technical Sciences

Статья поступила в редакцию 27.02.2023; одобрена после рецензирования 14.03.2023; принята к публикации 14.03.2023

The article was submitted 27.02.2023; approved after reviewing 14.03.2023; accepted for publication 14.03.2023

Научная статья

УДК 533.6.013.4
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-43-52

Исследование самовозбуждающихся колебаний по тангажу коническо-сферического тела при числе Маха M = 1,75 и двух моментах инерции

Никита Андреевич Мищенко[1]
Евгений Александрович Часовников[2]

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

[1]nikita.mishchenko@yahoo.com
[1]chas@itam.nsc.ru, https://orcid.org/0009-0006-7380-0529

Аннотация

Проведены испытания коническо-сферического тела в сверхзвуковой аэродинамической трубе на установке свободных колебаний по углу тангажа при числе Маха M = 1,75 и двух моментах инерции тела относительно оси вращения. Для тела с большим моментом инерции получены автоколебания с амплитудой около 10 град. Впервые обнаружен феномен вырождения автоколебаний для тела с меньшим моментом инерции. Предпринята попытка смоделировать феномен при помощи обыкновенного линейного дифференциального уравнения первого порядка.

Ключевые слова

коническо-сферическое тело, аэродинамическое демпфирование, самовозбуждающиеся колебания, автоколебания

Источник финансирования

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2021–2023 годы (проект FWNE-2021-0012). Эксперименты проведены на базе ЦКП «Механика»

Благодарности

Авторы выражают благодарность Адамову Н. П. и Чистякову М. В., принявшим участие в подготовке и проведении экспериментов.

Для цитирования

Мищенко Н. А., *Часовников Е. А.* Исследование самовозбуждающихся колебаний по тангажу коническо-сферического тела при числе Маха M = 1,75 и двух моментах инерции // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 1. С. 43–52. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-43-52

© Мищенко Н. А., Часовников Е. А., 2023

Study of Self-Excited Pitch Oscillations of Conical-Spherical Body at Mach Number M = 1.75 and Two Moments of Inertia

Nikita A. Mishchenko[1]
Evgeniy A. Chasovnikov[2]

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

[1]nikita.mishchenko@yahoo.com
[2]chas@itam.nsc.ru, https://orcid.org/0009-0006-7380-0529

Absract

Tests of a conical-spherical body in a supersonic wind tunnel were carried out on a free oscillation installation along the pitch angle at a Mach number M = 1.75 and two moments of inertia of the body relative to the axis of rotation. For a body with a large moment of inertia, self-oscillations with the amplitude of ca. 10 deg were obtained. For the first time, the phenomenon of degeneration of self-oscillations for a body with a smaller moment of inertia has been discovered. An attempt was made to model the phenomenon using an ordinary linear differential equation of the first order.

Keywords

conical-spherical body, aerodynamic damping, self-excited oscillations, self-oscillations

Funding

The work was carried out within the framework of the Program of Fundamental Scientific Research of the State Academies of Sciences for 2021–2023 (project FWNE-2021-0012). The experiments were carried out using the equipment of the Joint Access Center “Mechanics”.

Acknowledgements

The authors are grateful to N. P. Adamov and M. V. Chistyakov who took part in planning and conducting the experiments.

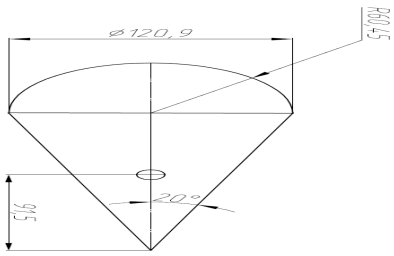
For citation

Mishchenko N. A., Chasovnikov E. A. Study of Self-Excited Pitch Oscillations of Conical-Spherical Body at Mach Number M = 1.75 and Two Moments of Inertia. *Siberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 43–52. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-43-52

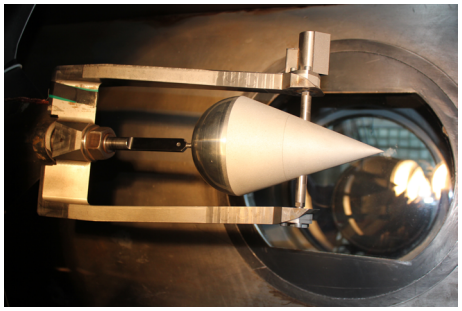
Введение

Как показывают многочисленные исследования, при движении спускаемых космических летательных аппаратов в атмосфере планет при небольших сверхзвуковых и трансзвуковых скоростях часто возникает потеря их аэродинамического демпфирования с последующим формированием незатухающих колебаний по углу атаки (автоколебаний). Этот явление является крайне неблагоприятным с практической точки зрения и приводит к необходимости развертывания парашютов. Поэтому его изучению посвящено большое количество экспериментальных и теоретических работ (см. обзор [1], включающий 83 источника). Несмотря на это, вследствие ряда трудностей, до сих пор остается много открытых вопросов. Хотя и установлено, что причиной феномена является взаимодействие срывного течения, образующегося за осесимметричным затупленным телом, с задней частью тела, механизмы этого взаимодействия изучены слабо. Также отсутствуют адекватные математические модели, позволяющие смоделировать явление для решения практических задач.

По-видимому, аналогичные срывные течения формируются и за телом, представляющим собой острый круговой конус с задней полусферической частью (коническо-сферическое тело, см. рис. 1, *а*). Для него при малых сверхзвуковых скоростях M = 1,75, 2,0 и 2,25 и моменте инерции $I_z = 14{,}0 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 также были обнаружены самовозбуждающиеся колебания [2] при испытаниях в аэродинамической трубе на установке свободных колебаний с поперечной державкой (см. рис. 1, *б*). Далее эта модель по мере необходимости будет обозначаться как «тяжелая» модель.



а



б

Рис. 1. Схема модели (а) и общий вид модели и установки свободных колебаний в аэродинамической трубе Т-313 ИТПМ СО РАН (б). Размеры в мм. Круглым маркером на оси симметрии отмечено положение оси вращения
Fig. 1. Scheme of the model (a) and general view of the model and installation of free oscillations in the wind tunnel T-313 ITAM SB RAS (б). Dimensions provided in mm. The round marker on the axis of symmetry marks the position of the axis of rotation

Следует отметить, что важные результаты по потере аэродинамического демпфирования конусов, имеющих плоскую заднюю поверхность, при дозвуковых скоростях получены в работе [3].

В настоящей работе изложены результаты дальнейших исследований самовозбуждающихся колебаний коническо-сферического тела. Основное внимание уделено изучению влияния момента инерции тела на амплитуду автоколебаний.

Постановка эксперимента

Было испытано геометрически идентичное коническо-сферическое тело с меньшим моментом инерции $I_Z = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 (далее – «легкая» модель).

В таблице приведены условия испытаний, параметры подобия и экспериментальные характеристики колебаний тела. Расшифровка обозначений: № прот. – четырехзначный номер протокола испытаний, Re – число Рейнольдса, α_0 – начальный угол атаки (при фиксации тела арретиром), $i_z = \dfrac{2I_z}{\rho S l^3}$ – безразмерный момент инерции тела (параметр подобия при свободных колебаниях [4]), ρ – плотность воздуха, S – характерная площадь тела, l – характерная длина тела, $\overline{\omega} = \omega\, l/V$ – приведенная частота колебаний, $\omega = 2\pi f$ – круговая частота колебаний модели, f – частота колебаний модели, V – скорость потока, Θ_{avt} – амплитуда автоколебаний. Везде далее в подрисуночных надписях номер протокола обозначается четырехзначным числом в скобках.

Были проведены дополнительные испытания «тяжелой» модели с небольшим закруглением носика конуса по сфере (см. табл.). Радиус закругления составлял $r = 2$ мм ($\overline{r} = r/D =$ $= 0{,}0166$; D – диаметр миделевого сечения). Анализ показал, что это не сказалось заметным образом на интегральных характеристиках.

В дальнейшем используются экспериментальные характеристики: коэффициент момента тангажа, его квазистационарные значения (в моменты мгновенной остановки), огибающие переходных процессов угла тангажа по времени и эквивалентные аэродинамические производные. Методики их определения изложены в работах [5; 6]. Эквивалентные аэродинамические производные везде в дальнейшем определялись по методу 2 [5] посредством аппроксимации коэффициента момента тангажа эквивалентным его значением на участке колебаний $N = 2$–5 (N – число периодов колебаний) $m_z = (m_Z^{\alpha})_{\mathbf{e}} \cdot \vartheta + \left(m_z^{\overline{\omega}_Z} + m_Z^{\overline{\dot{\alpha}}}\right)_{\mathbf{e}} \dfrac{l}{V} \cdot \dot{\vartheta}$, где $(m_Z^{\alpha})_{\mathbf{e}}$ и $\left(m_z^{\overline{\omega}_Z} + m_Z^{\overline{\dot{\alpha}}}\right)_{\mathbf{e}}$ – эк-

вивалентные аэродинамические производные (постоянные величины на рассматриваемом участке колебаний), ϑ – угол тангажа, $\dot{\vartheta}$ – производная угла тангажа по времени.

Параметры эксперимента

Parameters of Experiments

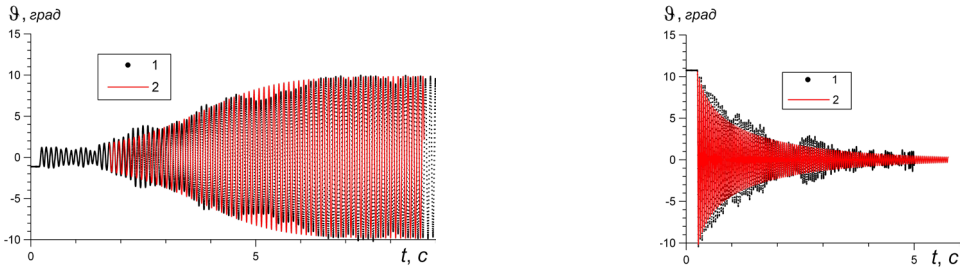
№ прот.	M	$Re \cdot 10^{-6}$	$I_z \cdot 10^3$, кгм^2	α_0, град	$i_z \cdot$	$\overline{\omega}$	Θ_{avt}, град	Примечание
4157	1,80	3,98	14,0·	4,7	917	0,0199	9,54	
4126	1,79	3,83	14,0·	11,6	823	0,0207	9,95	
4161	1,79	3,95	14,0·	33,8	919	0,0196	11,8	
4160	1,79	3,37	14,0·	-1,1	1080	0,0184	10,0	Пониженное Re
4327	1,79	4,00	14,0	10,5	901	0,0199	11,0	Носик закруглен
4329	1,79	3,98	14,0·	-1,2	904	0,0199	9,5	Носик закруглен
4326	1,78	4,15	2,2·	10,8	135	0,0556	0,0	

Обсуждение результатов эксперимента

На рис. 2 черным цветом изображены исходные данные в виде зависимости угла тангажа от времени. Видно, что для «тяжелой» модели возникают самовозбуждающиеся колебания, развитие которых приводит к автоколебаниям с амплитудой порядка 10 град (см. таблицу). Для «легкой» модели движение практически затухает. Следует отметить, что такой феномен вырождения автоколебаний в известной авторам литературе не встречался. Однако прогноз этого эффекта дан в работе [7] для сегментально-конического тела.

На рис. 3 представлены квазистационарные значения коэффициента момента тангажа. Там же приведены данные для коническо-сегментального тела, центр сферического сегмента которого совпадает с осью вращения (модель 1 [8]). Видно, что аэродинамические характеристики близки к линейным, а влияние полусферы исследуемого тела находится в пределах погрешностей измерения.

На рис. 4 даны зависимости эквивалентного коэффициента демпфирования тангажа от амплитуды колебаний. Характерно, что для «тяжелой» модели антидемпфирование максимально при малых амплитудах. С ростом амплитуды антидемпфирование уменьшается и становится равным нулю при автоколебаниях.



а *б*

Рис. 2. Переходные процессы угла тангажа по времени: *а* – $I_Z = 14{,}0 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 (4329); *б* – $I_Z = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 (4326); *1* – эксперимент; 2 – расчет

Fig. 2. Pitch angle transients over time: *a* —$I_Z = 14.0 \cdot 10^{-3}$ kgm^2 (4329); *б*—$I_Z = 2.2 \cdot 10^{-3}$ kgm^2 (4326); *1*—experiment; *2*—calculation

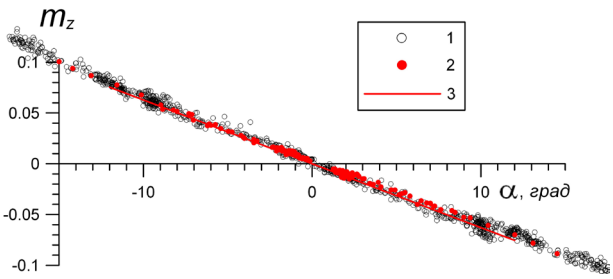
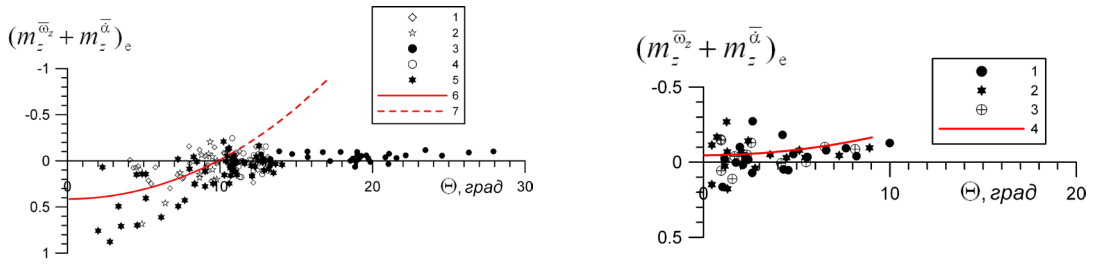


Рис. 3. Зависимость квазистационарного аэродинамического коэффициента $m_{z_{kst}}$ от угла атаки: *1* – эксперимент (4159, 4160, 4329, 4326); 2 – эксперимент, модель 1; *3* – аппроксимация 1, 2 линейной зависимостью
Fig. 3. Dependence of the quasi-stationary aerodynamic coefficient on the angle of attack: *1*—experiment (4159, 4160, 4329, 4326); *2*—experiment, model 1; *3*—approximation *1*, *2* by linear dependence



а *б*

Рис. 4. Зависимость эквивалентного коэффициента демпфирования тангажа от амплитуды колебаний: *а* – $I_Z = 14{,}0 \cdot 10^{-3}$ кгм^2: 1–5 – эксперимент (4157, 4160, 4161, 4327, 4329); 6, 7 – расчет (4329, 4161); *1–3* – $N = 4{,}5$, *4–7* – $N = 2{,}5$; *б* – $I_Z = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 (4326): *1–3* – эксперимент, $N = 4{,}5$, 6,5, 8,5; *4* – расчет, $N = 2{,}5$
Fig. 4. Dependence of the equivalent pitch damping coefficient on the oscillation amplitude. *a*— $I_Z = 14.0 \cdot 10^{-3}$ kgm^2: *1–5*—experiment (4157, 4160, 4161, 4327, 4329); *6*, *7*—calculation (4329, 4161); *1–3*—$N = 4.5$, *4–7*—$N = 2.5$. *b*— $I_Z = 2.2 \cdot 10^{-3}$ kgm^2 (4326): *1–3*—experiment, $N = 4.5$, 6.5, 8.5; *4*—calculation, $N = 2.5$

Моделирование самовозбуждающихся колебаний

Для математического описания аэродинамического момента тангажа при неустановившемся движении тел в настоящее время наиболее широко применяется концепция аэродинамических производных [9]. Эта концепция использовалась, в частности, для описания свободного движения исследуемого коническо-сферического тела при $I_z = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 и M = 2,3 [10]. Известны другие математические модели, а именно: гипотеза запаздывания [11] и гипотеза релаксации [7; 12]. Важно отметить, что смоделировать феномен вырождения автоколебаний при помощи концепции аэродинамических производных и гипотезы запаздывания не представляется возможным.

В настоящей работе предпринята попытка использования гипотезы релаксации для моделирования свободных колебаний коническо-сферического тела при двух моментах инерции [12]:

$$m_z = m_{z_{st}}(\alpha) + m_z^{\bar{\omega}_Z} \frac{\omega_z l}{V} + m_{z*}^{\bar{\dot{\alpha}}} \frac{\dot{\alpha}\, l}{V} + \Delta m_z, \tag{1}$$

$$\frac{\bar{T}\, l}{V} \frac{d(\Delta m_z)}{dt} + \Delta m_z = \bar{T}\left(m_{z*}^{\alpha} - m_{z_{st}}^{\alpha}\right)\frac{\dot{\alpha}\, l}{V}, \tag{2}$$

где $m_{z_{st}}(\alpha)$ – коэффициент момента тангажа m_z при установившемся движении, $m_z^{\bar{\omega}_Z}$, $m_{z*}^{\bar{\dot{\alpha}}}$, m_{z*}^{α} – аэродинамические производные (функции угла атаки); $m_{z_{st}}^{\alpha}$ – производная $m_{z_{st}}(\alpha)$ по

углу атаки, $\overline{T} = \frac{T(\alpha)V}{l}$ и $T(\alpha)$ – соответственно безразмерная и размерная постоянная времени (функции угла атаки), $\omega_z = \frac{d\vartheta}{dt}$ – угловая скорость тангажа, $\dot{\alpha}$ – производная угла атаки по времени.

Сущность гипотезы релаксации заключается в том, что при небольшом ступенчатом изменении угла атаки Δα относительно α коэффициент момента тангажа вначале мгновенно меняется на величину $m_{z*}^{\alpha}\,\Delta\alpha$ относительно стационарного $m_{z_{st}}(\alpha)$, а затем релаксирует по экспоненте $\left(m_{z*}^{\alpha} - m_{z_{st}}^{\alpha}\right)\Delta\alpha\,\exp(-\frac{t}{T})$ к установившемуся значению $m_{z_{st}}(\alpha + \Delta\alpha)$. Постоянная времени характеризует длительность этого процесса. Производные $m_z^{\overline{\omega}_Z}$ и $m_{z*}^{\dot{\overline{\alpha}}}$ характеризуют демпфирование передней части тела.

Уравнения движения тела на установке свободных колебаний по углу тангажа в аэродинамической трубе с учетом (1) и (2) и кинематической связи $\dot{\alpha} = \omega_z$ выглядят следующим образом:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \omega_z, \tag{3}$$

$$\frac{d\omega_z}{dt} = m_z\left(\frac{\rho \cdot V^2}{2I_z}\right)Sl + \frac{M_{fr}}{I_z}, \tag{4}$$

где M_{fr} – момент трения в узле вращения. Момент сил трения моделировался функцией $M_{fr} = \left[-R f_* \frac{d}{2}\right] \cdot \mathrm{sgn}(\dot{\alpha})$, где R – реакция в подшипниках, f_* – приведенный коэффициент трения в подшипниках, d – внутренний диаметр подшипников. Реакция в подшипниках определялась с использованием данных весового аэродинамического эксперимента, а приведенный коэффициент трения в подшипниках находился при проведении стендовых испытаний.

В (1) и (2) неизвестны четыре функции угла атаки: $m_{z_{st}} = m_{z_{kst}}(\alpha)$, $m_z^{\overline{\omega}_Z} + m_{z*}^{\dot{\overline{\alpha}}}$, $\overline{T}$, $m_{z*}^{\alpha} - m_{z_{st}}^{\alpha}$.

Примем допущения:

1. Стационарный коэффициент момента тангажа равен квазистационарному $m_{z_{st}} = m_{z_{kst}}(\alpha)$. В дальнейшем использовалась линейная аппроксимация экспериментальных данных (рис. 3) $m_{z_{st}}(\alpha) = m_{z_{st}}^{\alpha}\,\alpha = -0{,}360\,\alpha$ (размерность α в рад).
2. Коэффициент демпфирования тангажа $m_z^{\overline{\omega}_Z} + m_{z*}^{\dot{\overline{\alpha}}}$ равен таковому, рассчитанному по линейной теории [13] $m_z^{\overline{\omega}_Z} + m_{z*}^{\dot{\overline{\alpha}}} = -0{,}27$.
3. Безразмерная постоянная времени $\overline{T}$ не зависит от угла атаки.
4. Функция $m_{z*}^{\alpha} - m_{z_{st}}^{\alpha}$ является квадратичной функцией угла атаки $m_{z*}^{\alpha} - m_{z_{st}}^{\alpha} = b_0 + b_1 \cdot \alpha^2$, где b_0 и b_1 – постоянные коэффициенты.

Таким образом, определению подлежат три постоянных параметра: $\overline{T}$, b_0 и b_1.

Параметры подбирались из условия согласования расчетных и экспериментальных огибающих переходных процессов угла тангажа по времени для двух реализаций, соответствующих двум частотам колебаний (Прот. 4329 и 4326). Расчетные переходные процессы определялись посредством численного интегрирования уравнений движения (1–4) методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Методика подбора параметров заключается в следующем. Назначается величина $\overline{T}$. Затем для «тяжелой» модели подбираются параметры b_0 и b_1, обеспечивающие приемлемое согласование расчетных огибающих с экспериментом. Далее для этих параметров проводится расчет переходного процесса для «легкой» модели и проверяется степень его соответствия экспериментальному. В случае неудовлетворительного согласования назначается

новое значение постоянной времени и процесс повторяется до тех пор, пока не достигается удовлетворительное согласование огибающих для двух частот колебаний. Шаг изменения постоянной времени в процессе подбора параметров был принят равным $\Delta\overline{T}$ = 5. Параметры, соответствующие удовлетворительному согласованию данных (рис. 2), равны: $\overline{T}$ = 40,0, b_0 = 0,028 1/рад, b_1 = –2,3 1/рад^3. Они и были приняты в дальнейших расчетах в качестве оптимальных.

Численные исследования показывают, что расчетные и экспериментальные переходные процессы угла тангажа по времени для других испытаний также удовлетворительно согласуются между собой кроме (4161, см. табл.), для которого имеет место значительное различие данных, но амплитуда автоколебаний моделируется удовлетворительно.

Ниже рассматриваются различные расчетные аэродинамические характеристики коэффициента момента тангажа и в ряде случаев проводится их сравнение с экспериментальными.

На рис. 4 дано сравнение эквивалентного коэффициента демпфирования тангажа модели. Видно удовлетворительное согласование расчета с экспериментом за исключением данных для протокола 4161 (рис. 4, *а*). Также удовлетворительно согласуются эквивалентные аэродинамические производные $(m_Z^{\alpha})_{\mathbf{e}}$, огибающие расчетных и экспериментальных зависимостей коэффициента момента тангажа от времени и квазистационарные значения коэффициента момента тангажа.

На рис. 5 приведены расчетные зависимости коэффициента момента тангажа и различных его составляющих от угла атаки при двух частотах колебаний. Для «тяжелой» модели эти зависимости взяты в режиме автоколебаний, а для «легкой» – в режиме начального участка затухающих колебаний.

К сожалению, большой разброс экспериментальных данных не позволил провести сравнение зависимости коэффициента момента тангажа от угла атаки с расчетом.

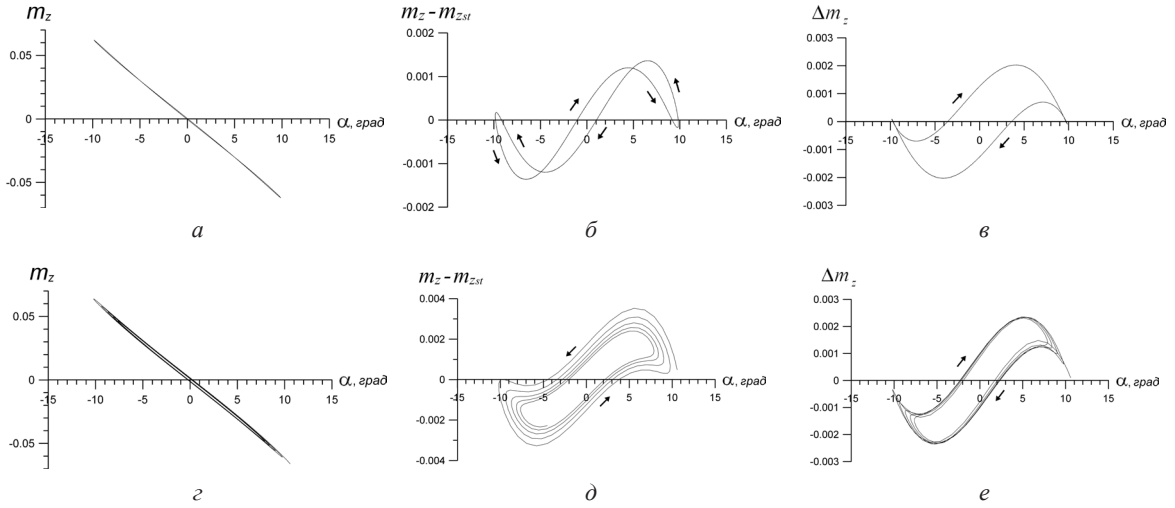
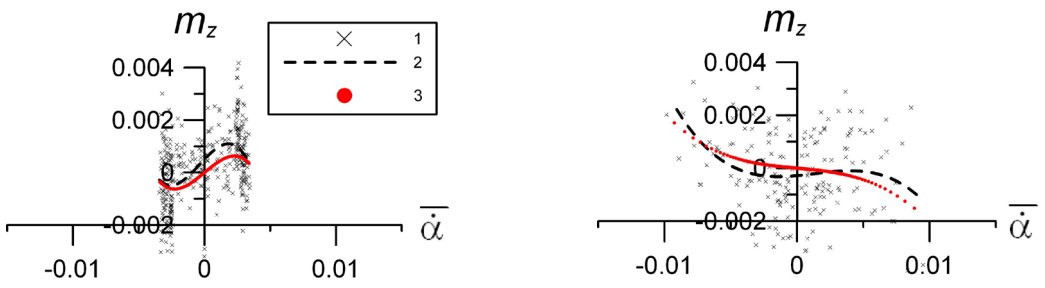


Рис. 5. Зависимости коэффициента момента тангажа и его составляющих от угла атаки: *а*, *б*, *в* – $I_Z = 14{,}0 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 (4329); *г*, *д*, *е* – $I_Z = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ кгм^2 (4326)

Fig. 5. Calculated dependences of the pitching moment coefficient and its components on the angle of attack: *а*, *б*, *в*— $I_Z = 14.0 \cdot 10^{-3}$ kgm^2 (4329); *г*, *д*, *е*—$I_Z = 2.2 \cdot 10^{-3}$ kgm^2 (4326)

Из рис. 5, *б* видно, что при меньшей частоте колебаний модели при околонулевых углах атаки имеет место отрицательное демпфирование (антидемпфирование; направление обхода зависимости $m_z - m_{z_{st}} = f(\alpha)$ – по часовой стрелке). При больших и малых углах атаки наблюдается демпфирование (направление обхода зависимости $m_z - m_{z_{st}} = f(\alpha)$ – против часовой стрелке). При большей частоте колебаний (рис. 5, *д*) модель на всех углах атаки обладает демп-



а *б*

Рис. 6. Зависимости коэффициента момента тангажа от безразмерной скорости изменения угла атаки при α = 0 град: *а* – $I_Z = 14{,}0 \cdot 10^{-3}$ кгм² (4329); *б* – $I_Z = 2{,}2 \cdot 10^{-3}$ кгм² (4326); *1* – эксперимент; *2* – аппроксимация 1 кубическим полиномом; *3* – расчет

Fig. 6. Dependences of the pitching moment coefficient on the dimensionless rate of change of the angle of attack at α = 0 deg. *a*—$I_Z = 14.0 \cdot 10^{-3}$ kgm² (4329); *b*—$I_Z = 2.2 \cdot 10^{-3}$ kgm² (4326). *1*—experiment; *2*—approximation *1* by a cubic polynomial; *3*—calculation

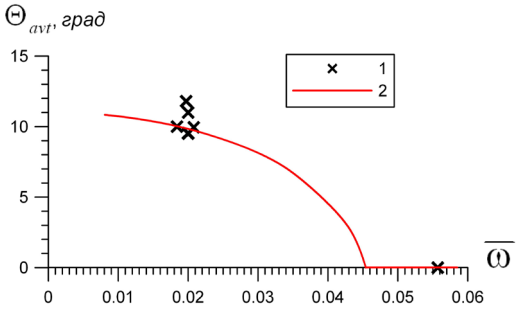


Рис. 7. Зависимость амплитуды автоколебаний от приведенной частоты: *1* – эксперимент; 2 – расчет

Fig. 7. Dependence of the amplitude of self-oscillations on the reduced frequency: *1*—experiment; *2*— calculation

фированием. Примечательно, что для Δm_z (задняя часть модели, рис. 5, *в*, *е*) для обеих частот наблюдается антидемпфирование во всем диапазоне углов атаки. Качественно такие же зависимости получены для давлений, измеренных в некоторых точках задней поверхности модели спускаемого аппарата Muses-C, в работе [11].

На рис. 6 приведены расчетные зависимости коэффициента момента тангажа от безразмерной скорости изменения угла атаки для двух моментов инерции при α = 0, определенные методом сечений [6]. Нетрудно заметить, что эти зависимости имеют существенно нелинейный характер и сильно отличаются для двух частот колебаний. Там же дано сравнение этих характеристик с экспериментальными. Несмотря на большой разброс экспериментальных данных, их кубическая аппроксимация удовлетворительно согласуется с расчетом.

Были проведены расчеты переходных процессов в широком диапазоне моментов инерции тела. На рис. 7 приведена расчетная зависимость амплитуды автоколебаний от приведенной частоты автоколебаний. Там же даны экспериментальные данные. Видно, что с увеличением приведенной частоты автоколебаний происходит уменьшение амплитуды, и при $\overline{\omega} \geq 0{,}045$ автоколебания вырождаются.

В заключение следует отметить, что для окончательной проверки адекватности используемой в работе гипотезы релаксации и механизма самовозбуждающихся колебаний требуются дополнительные испытания тела при других моментах инерции и сопоставление амплитуд автоколебаний с расчетными (см. рис. 7).

Заключение

Получены зависимости угла тангажа от времени при испытаниях коническо-сферического тела в сверхзвуковой аэродинамической трубе на установке свободных колебаний при числе Маха M = 1,75 и двух моментах инерции.

Обнаружено, что тело с большим моментом инерции динамически неустойчиво, что приводит к самовозбуждающимся колебаниям с последующим формированием автоколебаний с амплитудой порядка 10 град. Тело с меньшим моментом инерции динамически устойчиво.

Предпринята попытка описать свободные колебания тела при помощи гипотезы релаксации.

Рассматриваемый в работе механизм самовозбуждающихся колебаний коническо-сферического тела и его математическая модель требуют дополнительной экспериментальной проверки путем проведения испытаний при других моментах инерции тела.

Список литературы

1. **Kazemba C. D., Braun R. D., Clark L. G., Schoenenberger M.** Survey of Blunt Body Supersonic Dynamic Stability // Journal of Spacecraft and Rockets. Vol. 54, No 1. 2017. P. 109–127.
2. **Adamov N. P., Chasovnikov E. A.** Self-induced oscillations of a cone with a hemispherical rear part at low supersonic velocities. American Institute of Physics Conference Proceedings, 2018. V. 2027. P. 030150-1 – 030150-5.
3. **Федяевский К. К., Блюмина Л. Х.** Гидродинамика отрывного обтекания. М.: Машиностроение, 1977. 120 с.
4. **Часовников Е. А., Часовников С. А.** О критериях подобия при экспериментальном моделировании движения летательных аппаратов с помощью маломасштабных моделей // Теплофизика и аэромеханика. 2017, Том 24, № 1. С. 1–6.
5. **Часовников Е. А., Часовников С. А.** Методы определения эквивалентного аэродинамического демпфирования моделей спускаемых аппаратов при испытаниях на установке свободных колебаний // Теплофизика и аэромеханика. 2019. Том 26, № 1. С. 1–8.
6. **Часовников Е. А.** Особенности аэродинамического момента и демпфирования тангажа модели возвращаемого аппарата при свободных колебаниях на сверхзвуковых скоростях // Теплофизика и аэромеханика. 2020. Том 27, № 3.С. 347–355.
7. **Chasovnikov E. A.** Mathematical modeling of self-induced oscillations of a segmental-conical body with free movement in the pitch angle. American Institute of Physics Conference Proceedings 2351, 030073, 2021, P. 030073-1–030073-22. DOI: 10.1063/5.0051976.
8. **Adamov N. P., Gurin A. M., Chasovnikov E. A.** Methodical investigations of aerodynamic derivatives of a sharp cone on a setup with free oscillations at supersonic velocities. American Institute of Physics Conference Proceedings, 2018, V. 2027, P. 030151-1–030151-8.
9. **Белоцерковский С. М., Скрипач Б. К., Табачников В. Г.** Крыло в нестационарном потоке газа. М.: Наука, 1971. 768 с.
10. **Адамов Н. П., Мищенко Н. А., Часовников Е. А.** О динамических коэффициентах демпфирования конически-сферического тела при числе Маха M = 3,3 // Сибирский физический журнал. 2022. Том 17, № 1. С. 34–46.
11. **Abe T., Sato S., Matsukawa Y., Yamamoto K., Hiraoka K.** Study for dynamically unstable motion of reentry capsule. The institute of Space and Astronautical science // Report SP No. 17, 2003. P. 301–332.
12. **Часовников Е. А.** К вопросу о разделении комплексов аэродинамических производных для задач динамики полета самолетов // Известия вузов. Авиационная техника. 2011, № 3. С. 47–49.
13. **Tobak M., Wehrend W. R.** Stability derivetives of cones at supersonic speeds // Technical Note № 3788, NASA AMES, 1956. 43 p.

References

1. **Kazemba C. D., Braun R. D., Clark L. G., Schoenenberger M.** Survey of Blunt Body Supersonic Dynamic Stability // Journal of Spacecraft and Rockets. Vol. 54, no. 1. 2017. P. 109–127.

2. **Adamov N. P., Chasovnikov E. A.** Self-induced oscillations of a cone with a hemispherical rear part at low supersonic velocities // American Institute of Physics Conference Proceedings, 2018. Vol. 2027. P. 030150-1–030150-5.
3. **Fedyaevsky K. K., Blyumina L. Kh.** Hydrodynamics of separated flow. M.: Mashinostroenie, 1977. 120 p.
4. **Chasovnikov E. A., Chasovnikov S. A.** On similarity criteria at the experimental modeling of the flying vehicles motion with the aid of small-scale models // Thermophysics and Aeromechanics. 2017. Vol. 24, no. 1. P. 1–6.
5. **Chasovnikov E. A., Chasovnikov S. A.** Methods for determining the equivalent aerodynamic damping of reentry vehicle models tested in a setup with free oscillations // Thermophysics and Aeromechanics. 2019. Vol 26, no. 1. P. 1–8.
6. **Chasovnikov E. A.** Specific features of the aerodynamic moment and the pitch damping of a re-entry vehicle model exercising free oscillations at supersonic speeds // Thermophysics and Aeromechanics. 2020. Vol. 27, no. 3. P. 331–338.
7. **Chasovnikov E. A.** Mathematical modeling of self-induced oscillations of a segmental-conical body with free movement in the pitch angle / American Institute of Physics Conference Proceedings, 2021. P. 030073-1–030073-22. DOI 10.1063/5.0051976
8. **Adamov N. P., Gurin A. M., Chasovnikov E. A.** Methodical investigations of aerodynamic derivatives of a sharp cone on a setup with free oscillations at supersonic velocities / American Institute of Physics Conference Proceedings. 2018. Vol. 2027. P. 030151-1–030151-8.
9. **Belotserkovsky S. M., Skripach B. K., Tabachnikov V. G.** Wing in non-stationary gas flow. M.: Nauka, 1971. 768 p.
10. **Adamov N. P., Mishchenko N. A., Chasovnikov E. A.** About the Dynamic Damping Coefficients of a Segmental-Cone Model at Mach M = 2.3 // Siberian Journal of Physics. 2022. Vol. 17, no. 1. P. 34–46.
11. **Abe T., Sato S., Matsukawa Y., Yamamoto K., Hiraoka K.** Study for dynamically unstable motion of reentry capsule. The institute of Space and Astronautical science // Report SP No. 17, 2003. P. 301–332.
12. **Chasovnikov E. A.** On the issue of separating complexes of aerodynamic derivatives for problems of aircraft flight dynamics // Izvestiya vuzov. Aviation technology. 2011. No. 3. P. 47–49.
13. **Tobak M., Wehrend W. R.** Stability derivetives of cones at supersonic speeds // NASA AMES, 1956. Technical Note № 3788. 43 p.

Информация об авторах

Мищенко Никита Андреевич, лаборант

Часовников Евгений Александрович, кандидат технических наук, научный сотрудник

Information about the Authors

Nikita A. Mishchenko, Laboratory Assistant, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS

Evgeniy A. Chasovnikov, Candidate of Engineering Sciences, Senior Researcher, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS

Статья поступила в редакцию 01.03.2023; одобрена после рецензирования 30.03.2023; принята к публикации 30.03.2023

The article was submitted 01.03.2023; approved after reviewing 30.03.2023; accepted for publication 30.03.2023

Научная статья

УДК 621.315.592
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-53-60

Выращивание эпитаксиальных слоев твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ из оловянного раствора-расплава

Алижон Шоназарович Раззоков

Ургенчский государственный университет
Ургенч, Узбекистан

razzokov.a@bk.ru, https://orcid.org/0000-0002-2210-6207

Аннотация

Выращены монокристаллические пленки варизонного твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ на подложках Si <111> методом жидкофазной эпитаксии из ограниченного оловянного раствора-расплава в температурном интервале 1100–500 °C. Определен химический состав выращенных эпитаксиальных пленок на сканирующем электронном микроскопе.

Ключевые слова

эпитаксия, кристаллизация, раствор-расплав, твердый раствор

Для цитирования

Раззоков А. Ш. Выращивание эпитаксиальных слоев твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ из оловянного раствора-расплава // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 1. С. 53–60. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-53-60

Growth of Epitaxial Layers of the $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ Solid Solution from a Tin Solution-Melt

Alijon Sh. Razzokov

Urgench State University
Urgench, Uzbekistan

razzokov.a@bk.ru, https://orcid.org/0000-0002-2210-6207

Abstract

Mono-crystal films of a graded-gap solid solution $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ on Si <111> substrates were grown by liquid-phase epitaxy from a limited tin solution-melt in the temperature range 500–1100 °C. The chemical composition of the grown epitaxial films was determined using a scanning electron microscope.

Keywords

epitaxy, crystallization, solution-melt, solid solution

For citation

Razzokov A. Sh. Growth of Epitaxial Layers of the $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ Solid Solution from a Tin Solution-Melt. *Siberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 53–60. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-53-60

На базе кремния получить фотоприемник, работающий в инфракрасном диапазоне (ИК), является весьма актуальным. Для этой цели другими авторами [1–3] для формирования тройных соединений SiGeSn проведено много экспериментальных работ и получены приборные структуры на его основе. Авторами работ [4] пленки $Ge_{1-x-y}Si_xSn_y$ были выращены на подложках Si с Ge-буфером с помощью осаждения тригермана (Ge_3H_8), тетрагермана (Ge_4H_{10}), тетра-

© Раззоков А. Ш., 2023

силана (Si_4H_{10}) методом молекулярной эпитаксии с газовым источником (GS-MBE) или методом химического осаждения из газовой фазы монокристаллических пленок.

В работе [5] также использовалась система химического осаждения из паровой фазы при пониженном давлении для получения монокристалла $Ge_{1-x-y}Si_xSn_y$. SiGeSn и химические соединения $A^{III}B^{V}$ выращены в одной ростовой камере методом MOVPE с целью получения InGaP/GaInAs/SiGeSn/Ge монолитных четырехконтактных солнечных батарей. Показана возможность, что при соответствующей модификации MOVPE в реакторе, выбрав условия роста, можно уменьшить загрязнение эпитаксиальных слоев структур [6]. Выращивание нелегированных и легированных сплавов приборного качества может быть достигнуто с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии с использованием методов выращивания при низких температурах [7]. Но разность параметров решетки и коэффициент термического расширения дискретных структур не дает возможности получить кристаллически совершенные гетероструктуры, которые обусловливают электрические и фотоэлектрические характеристики твердого раствора и структур на их основе [8, 9].

В этой работе показано получение монокристаллических пленок варизонного твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ на подложках Si <111> методом жидкофазной эпитаксии из ограниченного оловянного раствора-расплава в температурном интервале 1100–500 °C. Использованы апробированные экспериментальные научные методы. Во время роста пленок из жидкой фазы в качестве подложек использовали монокристаллические Si (111) с отклонением – (0°15’–0°30’) n и p-типа проводимости. Любая поверхность твердого тела имеет определенную шероховатость, поэтому поверхностная энергия распределяется неравномерно и влияет на выращивание твердого раствора на подложке, а также на образование дислокаций, которые связаны с такими технологическими параметрами, как температура начала кристаллизации (T_{HK}), скорость роста (υ), зазор между подложками (δ), состав компонентов в растворе-расплаве с ориентациями подложек и т. д.

Для выращивания варизонного твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ нами был использован кварцевый реактор вертикального типа с горизонтально расположенными подложками на установке типа ЭПОС. Блок управления установки содержит высокоточный регулятор температуры ВРТ (Р-111, И-102), при помощи которого можно производить процесс охлаждения раствора-расплава автоматически по заранее заданной программе. Для предотвращения попадания неконтролируемых примесей из атмосферы в реактор процесс выращивания эпитаксиальных слоев осуществляется в атмосфере водорода. Очистка водорода производится на установке «Палладий-15». Сначала в реакторе создавался вакуум до остаточного давления 10^{-2} Па, затем в течение 30 минут через реактор пропускался очищенный водород, а после этого начинался процесс нагревания. Когда температура доходила до необходимого значения (T_{HK} – температура начала кристаллизации), система переключалась в автоматический режим. В течение 40–50 минут производилась гомогенизация раствора-расплава. Потом подложки на графитовом держателе приводились в контакт с раствором-расплавом и после заполнения зазоров между подложками раствором-расплавом поднимались на 1 см выше уровня раствора. Рост эпитаксиальных слоев $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ системы со скоростью в интервале 0,5–3 град/мин программным понижением температуры при окончании кристаллизации ($T_{O.K}$) прекращался сливом раствора-расплава с подложек при помощи центрифуги (рис. 1).

Состав раствора-расплава, состоящий из Si, Ge и Sn, определялся из диаграммы состояния двойного сплава Sn–Si, Sn–Ge. Для приготовления жидкого раствора-расплава были использованы литературные данные и изучена растворимость Si и Ge в Sn в интервале температур 450–1100 °C [10–12]. Эпитаксиальные пленки $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ выращивались при разных температурах начала кристаллизации – от T_{HK} = 800 °C до T_{HK} = 1050 °C соответственно температура окончания кристаллизация составляла от T_{OK} = 500 °C до T_{OK} = 600 °C. При выращивании эпитаксиальных слоев от T_{HK} = 1050 °C до T_{OK} = 500 °C, т. е. в температурном интервале роста 1050–500 °C, можно получить пленки относительно большой толщины при температурном интервале роста 1050–600 °C. Из этого следует, что, выбирая температурный интервал роста пленки, можно управлять толщиной пленки.

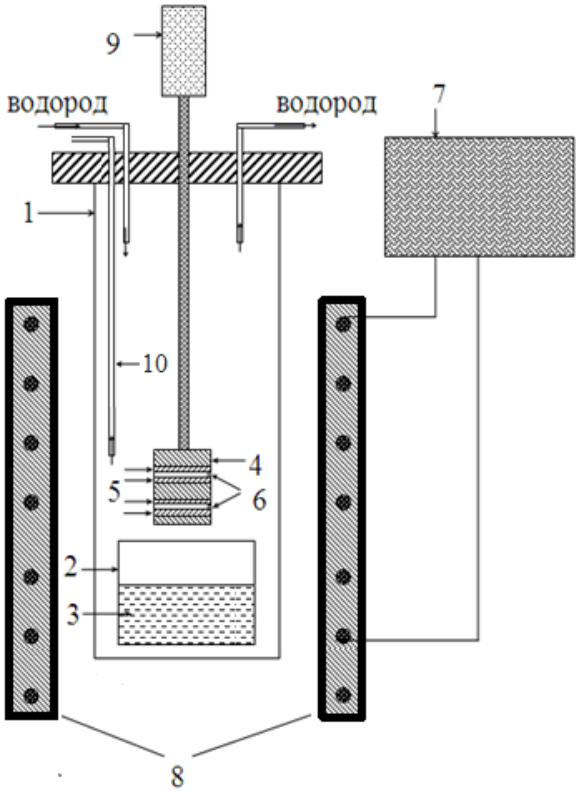


Рис. 1. Принципиальная схема установки для жидкофазной эпитаксии: 1 – кварцевый реактор; 2 – кварцевый тигель; 3 – раствор-расплав; 4 – графитовая кассета; 5 – кремниевые подложки; 6 – графитовые подпорки; 7 – блок управления; 8 – тепловой блок; 9 – электродвигатель и 10 – термопара

Fig. 1. Schematic diagram of the installation for liquid-phase epitaxy. 1 – quartz reactor; 2 – quartz crucible; 3 – melt solution; 4 – graphite cassette; 5 – silicon substrates; 6 – graphite props; 7 – control unit; 8 – thermal block; 9 – electric motor; and 10 – thermocouple

Для исследования монокристалличности выращиваемого эпитаксиального слоя $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ на подложке Si (111), не заканчивая процесс выращивания пленок, прервали и отсканировали поверхность начала роста с помощью электронного микроскопа SEM EVO MA 10 (Zeiss) с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord) для изучения образования начала эпитаксиальных слоев (рис. 2, *а*).

В начале роста образовавшиеся треугольники на подложке показывают, что эпитаксиальные слои начали расти по направлению подложки Si (111). После этого образцы выращивались при различных значениях технологических параметров жидкостной эпитаксии и был найден оптимальный режим роста ($T_{НК}$ и $T_{ОК}$ соответственно будут в температурном интервале 950–500 °C) эпитаксиальных слоев $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ (рис. 2, *б*).

С помощью ПЭМ (просвечающий электронный микроскоп) проведены исследования однородности и монокристалличности эпитаксиальных слоев, выращенных при оптимальном режиме роста (рис. 3). Морфология поперечного сечения полученных пленок была охарактеризована с использованием просвечивающего электронного микроскопа с полевой эмиссией (FE-TEM, Hitachi/HF-3300). Образцы ПЭМ были приготовлены с использованием системы сфокусированного ионного и электронного пучка (двухлучевой FIB) с ускоряющим напряжением ионного пучка 40 кВ и окончательным утончением 5 кВ; поверхности пленки были покрыты защитными слоями из аморфного углерода и платины перед тем, как подвергнуться FIB.

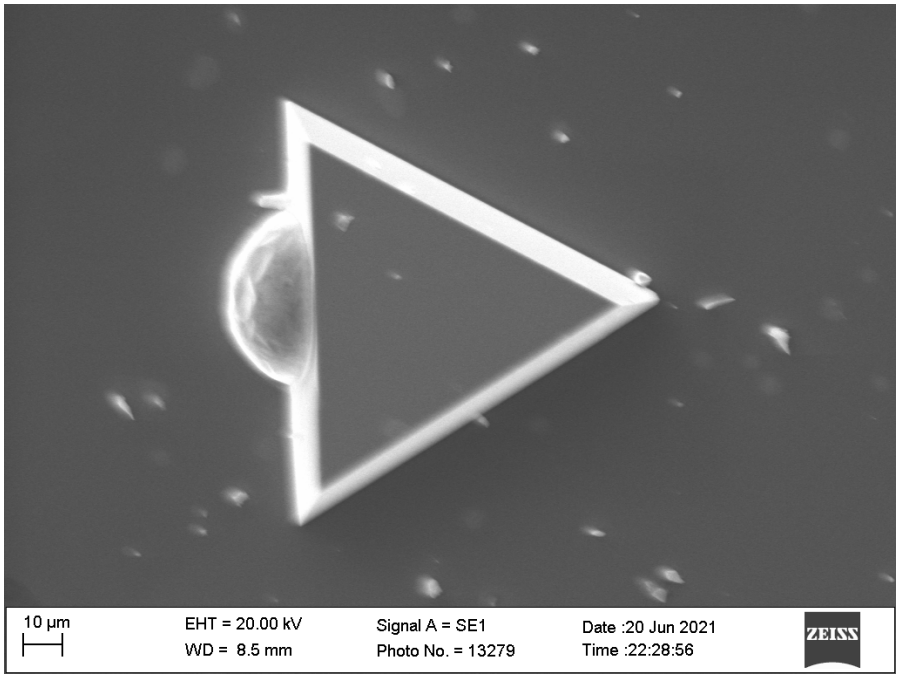


Рис. 2, а. Снимок начала роста твердого раствора $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ на подложке кремния <111> (полученный с помощью SEM EVO MA 10 (Zeiss) с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord)

Fig. 2, a. Snapshot of the beginning of the growth of the $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ solid solution on a <111> silicon substrate (obtained using an SEM EVO MA 10 (Zeiss) with an Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord) energy-dispersive X-ray spectrometer)

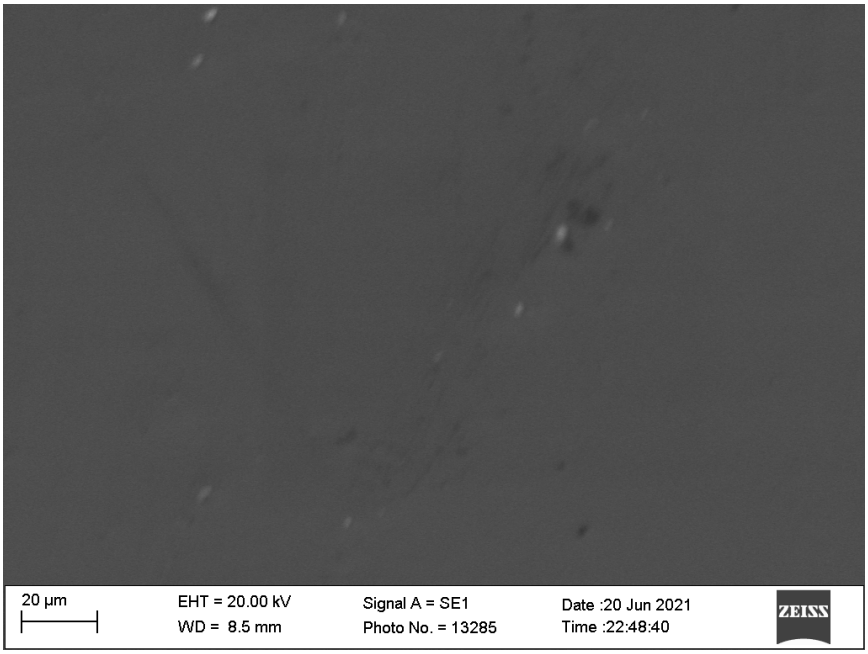


Рис. 2, б. Снимок поверхности выращенных эпитаксиальных слоев $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ на подложке кремния <111> (полученный с помощью SEM EVO MA 10 (Zeiss) с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord)

Fig. 2, b. Photograph of the surface of $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ epitaxial layers grown on <111> silicon substrate (obtained by SEM EVO MA 10 (Zeiss) with energy dispersive X-ray spectrometer Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord)

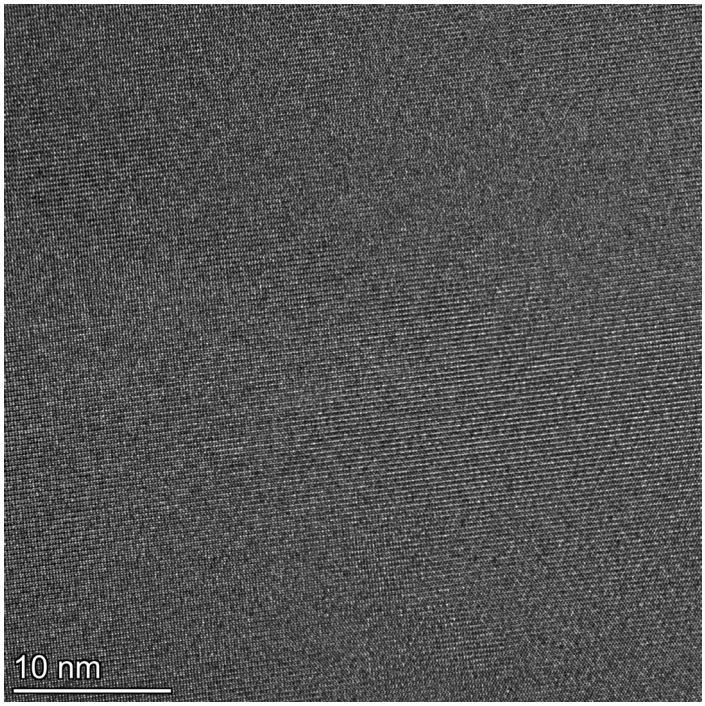


Рис. 3. HR TEM изображения образцов $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$, выращенных при температуре начала кристаллизации $T_{НК}$ = 950 °C и окончания кристаллизации $T_{ОК}$ = 500 °C, с принудительным охлаждением со скоростью 1 град/мин
Fig. 3. HR TEM images of $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ samples grown at crystallization start temperature $T_{o.c.}$ = 950 °C and crystallization end temperature $T_{e.c.}$ = 500 °C, with forced cooling at a rate of 1 deg/min

Определен химический состав поверхности выращенных эпитаксиальных пленок с помощью сканирующего электронного микроскопа, который составляет следующие доли процентных соотношений компонентов твердого раствора $Si_{0.80}Ge_{0.19}Sn_{0.01}$ (рис. 4).

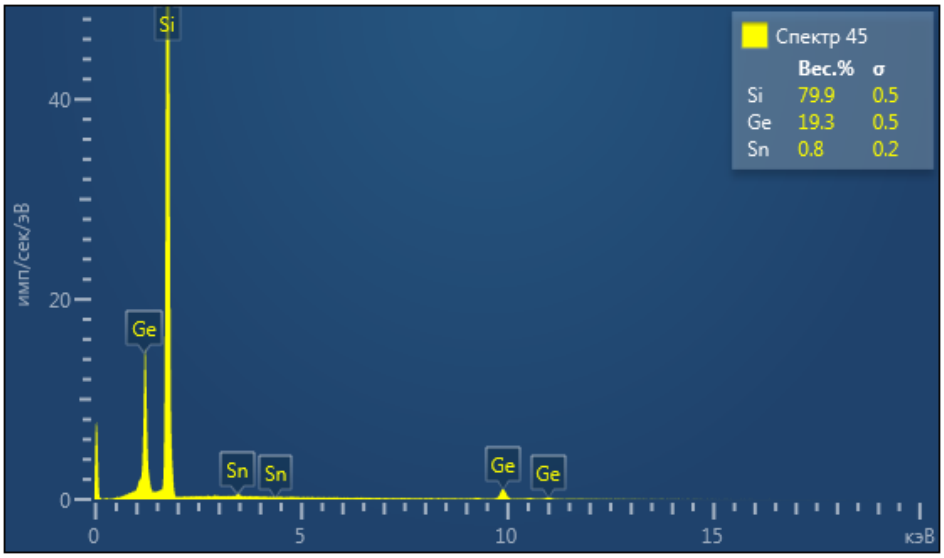


Рис. 4. Энергетический спектр поверхности эпитаксиальных слоев $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$, полученный с помощью SEM EVO MA 10 (Zeiss) с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord)
Fig. 4. The energy spectrum of the surface of $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ epitaxial layers obtained using SEM EVO MA 10 (Zeiss) with energy-dispersive X-ray spectrometer Aztec Energy Advanced X-Act (Oxdord)

Проведенные эксперименты позволили выяснить: изменяя зазор между подложками δ (т. е. изменяя обьем раствора-расплава между подложками), при одинаковом режиме роста выращенные эпитаксиальные слои на нижних и верхних подложках не отличались друг от друга толщиной и монокристалличностью на поверхности и на границе подложки-пленки до δ = 1,4 мм. В условиях δ > 1,4 мм на верхних подложках всегда образуются толстые и более низкокачественные слои, чем на нижних, которые связаны с диффузионным и конвекционным потоком компонентов в ограниченном растворе (если плотность растворяемых компонентов меньше плотности растворителя). В литературе [13] это объясняется конвекционным потоком раствора-расплава между подложками в поле силы тяготения.

Исследованы некоторые электрофизические свойства полученных пленок. Определены удельное сопротивление, холловская подвижность и концентрация носителей заряда при температуре 300 К: $\rho = 0{,}5–12\ \Omega\cdot$см, $\mu_n = 600–1100$ см^2/V·s, $n = 2\cdot10^{16} – 5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$. Пленки имели донорный тип проводимости.

К эпитаксиальным слоям $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ и структурам *p*Si – *n*$Si_{1-x-y}Ge_xSn^y$ вакуумным напылением наносились золотые омические контакты и затем были проведены измерения их фотоэлектрических свойств. Фоточувствительность структуры *p*Si – *n*$Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ измерялась в фотодиодном режиме при температуре 300 К (рис. 5).

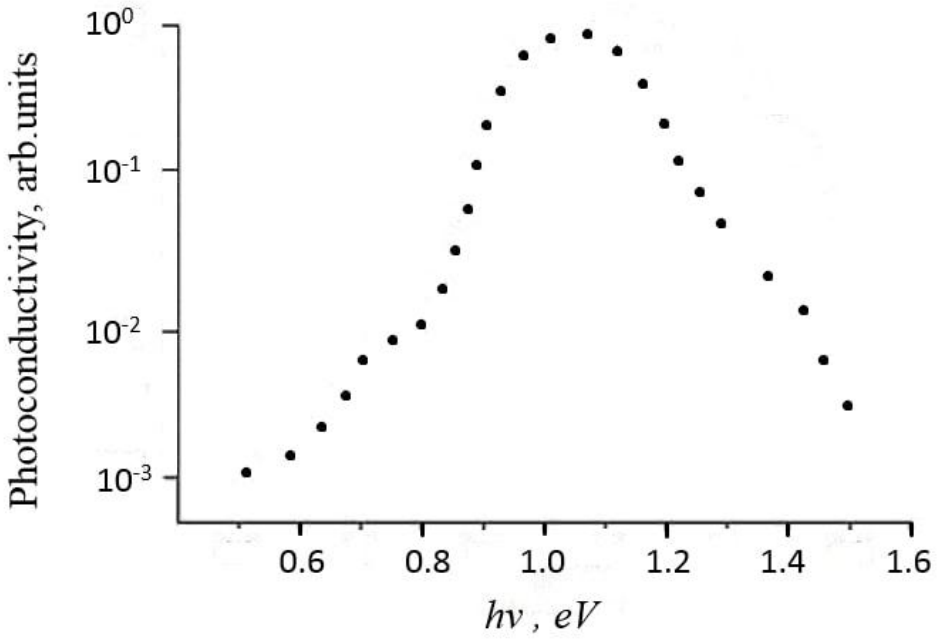


Рис. 5. Фоточувствительность структуры *p*Si–*n*$Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ в фотодиодном режиме при температуре 300 К
Fig. 5. Photosensitivity of the *p*Si–*n*$Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ structure in the photodiode mode at a temperature of 300 K

Таким образом, в данной работе показана возможность получения кристаллически совершенных эпитаксиальных слоев $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ путем сглаживания разности параметров решетки подложки-пленки (варьированием химического состава пленки) вдоль ее направления роста.

Определены оптимальные режимы роста для выращивания кристаллических совершенных $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ эпитаксиальных слоев из ограниченного оловянного раствора-расплава на монокристаллических подложках Si с ориентацией (111), которыми являются следующие технологические параметры:

– $T_{НК}$ в интервале от $T_{НК}$ = 800 °C до $T_{НК}$ = 950 °C;

– принудительное охлаждение раствора-расплава со скоростью 0,5–1,5 град/мин.

– зазор между подложками (соответствуя высоте раствора-расплава) в интервале 0,5–1,4 мм.

Список литературы

1. **M. Oehme, D. Buca, K. Kostecki, S. Wirths, B. Holl¨ander, E. Kasper, J. Schulze.** Epitaxial growth of highly compressively strained GeSn alloys up to 12.5 % Sn. J.Cryst.Growth, 384, 71 (2013). DOI:10.1016/j.jcrysgro.2013.09.018.
2. **R. R. Lieten, J. W. Seo, S. Decoster, A. Vantomme, S. Peters, K. C. Bustillo, E. E. Haller, M. Menghini, J. P. Locquet.** Tensile strained GeSn on Si by solid phase epitaxy. Appl.Phys. Lett., 102, 052106 (2013). https://doi.org/10.1063/1.4790302.
3. **Блошкин А. А., Якимов А. И., Тимофеев В. А., Туктамышев А. Р., Никифоров А. И., Мурашов В. В.** Разрывы валентной зоны в напряженных слоях SiGeSn/Si с различным содержанием олова // Физика и технология полупроводников. Т.51, №3. (2017). DOI: 10.21883/FTP.2017.03.44205.8343.
4. **BuguoWang, T. R. Harris, M. R. Hogsed, Y. K. Yeo, Mee-YiRyu, J. Kouvetakis.** Comparison study of temperature dependent direct/indirect bandgap emissions of Ge1-x-ySixSny and Ge1-ySny grown on Ge buffered Si. Thin Solid Films (2019), Volume 673, Pages 63–71. https://doi.org/10.1016/j.tsf.2019.01.022.
5. **S. Wirths, D. Buca, Z. Ikonic, P. Harrison, A. T. Tiedemann, B. Holländer, T. Stoica, G. Mussler, U. Breuer, J. M. Hartmann, D. Grützmacher, S. Mantl.** SiGeSn growth studies using reduced pressure chemical vapor deposition towards optoelectronic applications. Thin Solid Films. (2014), V.557, Pages 183-187. DOI:10.1016/j.tsf.2013.10.078.
6. **Gianluca Timò, Giovanni Abagnale, Nicola Armani, Marco Calicchio and Bernd Schineller.** MOVPE SiGeSn development for the next generation four junction solar cells. AIP Conference Proceedings, 040011 (2018); Pages 1–7. https://doi.org/10.1063/1.5053519
7. **I. A. Fischer, M. Oehme, J. Schulze.** Molecular Beam Epitaxy Growth of SiGeSn Alloys. Molecular Beam Epitaxy(2018), Pages 55-71. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812136-8.00004-9
8. **A. I. Nikiforov, V. A. Timofeev, A. R. Tuktamyshev, A. I. Yakimov, V. I. Mashanov, A. K. Gutakovskii.** Self-assembled strained GeSiSn nanoscale structures grown by MBE on Si(100) // Journal of Crystal Growth, 457, 215–219. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.02.024.
9. **Раззоков А. Ш.** Выращивание твердых растворов Ge1-xSnx из жидкой фазы. Доклады АН (Россия). Том 379, №5, 2001. С. 617–619.
10. **J. P. Fleurial and A. Borshchevsky.** Si-Ge-Metal Ternary Phase Diagram Calculations. Journal of The Electrochemical Society, Volume 137, Number9.DOI:https://doi.org/10.1149/1.2087101.
11. **Саидов А. С., Саидов М. С., Кошчанов Э. А.** Жидкостная эпитаксия компенсированных слоев арсенида галлия и твердых растворов на его основе: Монография. Ташкент: Фан. 1986. 128 с.
12. **Андреев В. М., Долгинов Л. М., Третьяков Д. Н.** Жидкостная эпитаксия в технологии полупроводниковых приборов. М.: Советское радио, 1975.
13. **Боцелев С. П., Марончук И. Е., Марончук Ю. Е.и др.** Кристаллизация эпитаксиальных слоев AlGaAs из ограниченного объема раствора-расплава // Неорганические материалы. 1977, 13, № 5. С. 769–772.

References

1. **M. Oehme, D. Buca, K. Kostecki, S. Wirths, B. Holl¨ander, E. Kasper, J. Schulze.** Epitaxial growth of highly compressively strained GeSn alloys up to 12.5 % Sn. J.Cryst.Growth, 384, 71 (2013). DOI:10.1016/j.jcrysgro.2013.09.018.

2. **R. R. Lieten, J. W. Seo, S. Decoster, A. Vantomme, S. Peters, K. C. Bustillo, E. E. Haller, M. Menghini, J. P. Locquet.** Tensile strained GeSn on Si by solid phase epitaxy. Appl.Phys. Lett., 102, 052106 (2013). https://doi.org/10.1063/1.4790302.
3. **Bloshkin A. A., Yakimov A. I., Timofeev V. A., Tuktamyshev A. R., Nikiforov A. I., Murashov V. V.** Valence band discontinuities in strained SiGeSn/Si layers with different tin contents // Physics and technology of semiconductors.T.51, №3. (2017). DOI: 10.21883/FTP.2017.03.44205.8343.
4. **BuguoWang, T. R. Harris, M. R. Hogsed, Y. K. Yeo, Mee-YiRyu, J. Kouvetakis.** Comparison study of temperature dependent direct/indirect bandgap emissions of Ge1-x-ySixSny and Ge1-ySny grown on Ge buffered Si. Thin Solid Films (2019), Volume 673, Pages 63–71. https://doi.org/10.1016/j.tsf.2019.01.022.
5. **S. Wirths, D. Buca, Z. Ikonic, P. Harrison, A. T. Tiedemann, B. Holländer, T. Stoica, G. Mussler, U. Breuer, J. M. Hartmann, D. Grützmacher, S. Mantl.** SiGeSn growth studies using reduced pressure chemical vapor deposition towards optoelectronic applications. Thin Solid Films. (2014), V.557, Pages 183-187. DOI:10.1016/j.tsf.2013.10.078.
6. **Gianluca Timò, Giovanni Abagnale, Nicola Armani, Marco Calicchio and Bernd Schineller.** MOVPE SiGeSn development for the next generation four junction solar cells. AIP Conference Proceedings, 040011 (2018); Pages 1–7. https://doi.org/10.1063/1.5053519
7. **I. A. Fischer, M. Oehme, J. Schulze.** Molecular Beam Epitaxy Growth of SiGeSn Alloys. Molecular Beam Epitaxy(2018), Pages 55-71. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812136-8.00004-9
8. **A. I. Nikiforov, V. A. Timofeev, A. R. Tuktamyshev, A. I. Yakimov, V. I. Mashanov, A. K. Gutakovskii.** Self-assembled strained GeSiSn nanoscale structures grown by MBE on Si(100) // Journal of Crystal Growth, 457, 215–219. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2016.02.024.
9. Razzokov A. Sh. Growth of solid solutions Ge1-xSnx from liquid phase. Reports of the Academy of Sciences (Russia). Vol. 379, No. 5, 2001. pp. 617–619.
10. **J. P. Fleurial and A. Borshchevsky.** Si-Ge-Metal Ternary Phase Diagram Calculations. Journal of The Electrochemical Society, Volume 137, Number9.DOI:https://doi.org/10.1149/1.2087101.
11. **Saidov A. S., Saidov M. S., Koshchanov E. A.** Liquid epitaxy of compensated layers of gallium arsenide and solid solutions based on it: Monograph. Tashkent: Fan. 1986. 128 p.
12. **Andreev V. M., Dolginov L. M., Tretyakov D. N.** Liquid epitaxy in the technology of semiconductor devices. M.: Soviet radio, 1975.
13. **Botselev S. P., Maronchuk I. E., Maronchuk Yu. E. And etc.** Crystallization of AlGaAs epitaxial layers from a limited volume of a melt solution // Inorganic Materials. 1977, 13, No. 5, pp. 769–772.

Информация об авторе

Раззоков Алижон Шоназарович, кандидат физико-математических наук, доцент

Information about the Author

Alijon Sh. Razzokov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Urgench State University

Статья поступила в редакцию 28.09.2022; одобрена после рецензирования 28.03.2023; принята к публикации 28.03.2023

The article was submitted 28.09.2022; approved after reviewing 28.03.2023; accepted for publication 28.03.2023

Научная статья

УДК 530.145
DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-61-88

Эволюция электронной структуры и упругих свойств β-глицина под воздействием внешнего гидростатического давления: квантово-химическое моделирование

Марк Андреевич Хайновский[1], Елена Владимировна Болдырева[2], Владимир Григорьевич Цирельсон[3]

[1,2]Новосибирский государственный университет
Новосибирск, Россия

[1,2]Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН,
Новосибирск, Россия

[3]Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева
Москва, Россия

[1]ma.khainovskiy@gmail.com
[2]eboldyreva@yahoo.com
[3]vtsirelson@yandex.ru

Аннотация

Исследовано влияние гидростатического сжатия на упругие и электронные свойства кристаллов β-глицина методом квантово-химического моделирования. Установлена взаимосвязь между изменением микроскопического квантового давления, макроскопической сжимаемостью, а также геометрическими и энергетическими характеристиками водородных связей, формирующих структуру кристаллов β-глицина, до и после перехода в β'-фазу высокого давления.

Ключевые слова

квантовая кристаллография, высокие давления, молекулярные кристаллы, теория функционала плотности, квантовая теория: атомы в молекулах

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ совместно Институтом катализа СО РАН (проект АААА-А21- 121011390011-4), НГУ (Программа Приоритет-2030) и РХТУ им. Д. И. Менделеева (программа Сетевого центра перспективных исследований «Зеленая химия для устойчивого развития: от фундаментальных принципов к новым материалам»)

Для цитирования

Хайновский М. А., *Болдырева Е. В.*, *Цирельсон В. Г.* Эволюция электронной структуры и упругих свойств β-глицина под воздействием внешнего гидростатического давления: квантово-химическое моделирование // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 1. С. 61–88. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-61-88

© Хайновский М. А., Болдырева Е. В., Цирельсон В. Г., 2023

Evolution of the Electronic Structure and Elastic Properties of β-glycine under the Influence of External Hydrostatic Pressure: Quantum Chemical Modeling

Mark A. Khainovsky[1], Elena V. Boldyreva[2], Vladimir G. Tsirelson[3]

[1,2]Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

[1,2]Boreskov Institute of Catalysis SB RAS
Novosibirsk, Russian Federation

[3]Mendeleev University of Chemical Technology of Russia
Moscow, Russian Federation

[1]ma.khainovskiy@gmail.com
[2]eboldyreva@yahoo.com
[3]vtsirelson@yandex.ru

Abstract

The effect of hydrostatic compression on the elastic and electronic properties of β-glycine crystals has been studied by quantum-chemical modeling. A relationship has been established between changes in the microscopic quantum pressure, macroscopic compressibility, and also the geometric and energy characteristics of hydrogen bonds that form the structure of β-glycine crystals before and after the transition to the high-pressure β'-phase.

Keywords

quantum crystallography, high pressures, molecular crystals, density functional theory

Funding

The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation jointly with Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (project AAAA-A21- 121011390011-4), NSU (Program PRIORITY-2030) and Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (program of the Network Center for Advanced Studies "Green chemistry for sustainable development: from fundamental principles to new materials")

For citation

Khainovsky M. A., Boldyreva E. V., Tsirelson V. G. Evolution of the Electronic Structure and Elastic Properties of β-glycine under the Influence of External Hydrostatic Pressure: Quantum Chemical Modeling. *Siberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 61–88. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-1-61-88

Введение

Квантово-химическое моделирование кристаллов приобретает в последнее время все большее значение, выделившись в самостоятельное направление физической химии. Совместное использование квантово-химических расчетов и дифракционных экспериментов дает синергетический эффект, позволяя уточнить структурные данные и улучшить модели электронного строения, чтобы интерпретировать и даже предсказывать физические и химические свойства. Это направление получило название *квантовой кристаллографии* [1–6].

Одна из интересных задач квантовой кристаллографии – объяснение и предсказание механических свойств кристаллов за счет установления взаимосвязи между макроскопическими характеристиками кристалла (модуль Юнга, твердость, сжимаемость, пьезоэлектрический тензор и др.) и соответствующими изменениями на микроуровне (деформация водородных связей, изменения иных межмолекулярных контактов и молекулярной конформации) при повышении давления [7–16]. Такие исследования важны как для понимания природы пьезоэлектрического эффекта и дизайна новых пьезоэлектрических материалов [17–19], так и для изучения взаимосвязи между химическими и структурными процессами в кристаллах, с одной стороны, и их механическим откликом, с другой стороны, что важно, в частности, для изучения термо- и фотомеханических эффектов и дизайна материалов и устройств на их основе [20–23].

В органических кристаллах значительную роль в формировании кристаллических структур и их отклика на внешние воздействия играют различные виды межмолекулярных взаимодействий, в первую очередь, водородные связи [24; 25]. Хорошо известно, что характеристики водородных связей сильно зависят от температуры и давления [26–28]. В литературе имеется много работ, посвященных изучению водородных связей в кристаллах экспериментальными дифракционными методами. Имеется также немало исследований характеристик водородных связей и других межмолекулярных взаимодействий в кристаллах методами квантовой химии при нормальных условиях и переменных температурах [29–33], а также при повышении гидростатического давления [34–47]. В то же время, работ, в которых дифракционные экспериментальные исследования различных межмолекулярных взаимодействий в органических кристаллах и, в частности, водородных связей в условиях гидростатического сжатия сочетались бы с квантово-химическими расчетами с целью интерпретации механических и пьезоэлектрических свойств, встречается немного [48; 49].

Одним из очень интересных объектов для квантовой кристаллографии среди органических кристаллов является глицин [50]. Это на сегодняшний день единственная аминокислота, которая может образовывать несколько полиморфных модификаций в ходе кристаллизации, причем разные модификации могут сосуществовать и храниться при нормальных условиях очень долго. Две из трех полиморфных модификаций, а именно, β- и γ-формы, обладают пьезоэлектрическими свойствами [51–54]. Влияние гидростатического давления на структуры кристаллов аминокислот также впервые было изучено на примере глицина. Было показано, что при одном и том же повышенном давлении фазовое состояние зависит от того, к какой исходной полиморфной модификации давление приложено. Кристаллы α-модификации не претерпевают фазовых переходов при повышении давления, как минимум, до 23 ГПа [55], в то время как две другие модификации, обладающие пьезоэлектрическими свойствами, β- и γ-формы, переходят в фазы высокого давления, причем разные, в зависимости от того, какая полиморфная модификация берется изначально. Кристаллы γ-модификации превращаются в другую фазу высокого давления, δ-форму [56–58], которая при разгрузке переходит сначала при 0,62 ГПа в ς-форму, и только при нормальном давлении в контакте с атмосферой после разгрузки и открытия ячейки постепенно с течением времени – в α-форму [59]. При этом перестройка структуры очень значительна, а монокристалл разрушается в порошок. Кристаллы β-модификации при повышении давления до 0,76 ГПа обратимо превращаются в β'-форму, причем монокристаллы при этом не разрушаются [60; 61]. Это делает данный объект особенно интересным для исследования. Электронное строение кристаллического глицина неоднократно анализировалось при помощи квантово-химических расчетов при нормальном давлении для α-модификации и значительно менее для β- и γ-модификаций [62–72]. Известны также попытки использовать квантово-химические расчеты для описания структуры фаз высокого давления глицина [73–77]. В основном целью расчетов было обосновать различия относительной термодинамической устойчивости полиморфных модификаций, проинтерпретировать их оптоэлектронные свойства, воспроизвести (или предсказать) структуру равновесной фазы высокого давления. Насколько нам известно, анализ механических свойств кристаллов β- или γ-глицина не проводился, хотя недавно появились работы, посвященные моделированию пьезоэлектрических свойств смешанных кристаллов на основе глицина [78].

Цель данной работы – используя экспериментальные структурные данные как исходные, уточнить механизм фазового перехода, связать между собой макроскопические упругие свойства и микроскопическое квантовое давление и проследить эволюцию электронной среды β-глицина при повышении внешнего давления до и после фазового перехода.

1. Методика расчетов

Квантово-химическое моделирование эволюции электронной структуры полиморфной модификации β-глицина и ее изменений в условиях повышенного гидростатического давления до и после структурного фазового перехода проведено методом Кона–Шэма с учетом периодичности электронных волновых функций основного состояния и с полной оптимизацией параметров элементарной ячейки с использованием программного пакета CRYSTAL17[1]. Поскольку упругие свойства органических пьезоэлектриков во многом определяются Н-связями, нами был выбран обменно-корреляционный функционал PBE0, позволяющий адекватно моделировать Н-связи в кристаллах [79]. Использовался базисный набор 6-31G(d,p) из локализованных атомных орбиталей, исправленный по Таулеру[2]. Внешнее давление отвечало точкам: 0; 0,2; 0,4; 0,7; 0,9 и 1,7 ГПа, для которых ранее были получены экспериментальные структурные данные [62]. В данной работе именно эти данные о параметрах элементарной ячейки и координатах атомов были использованы в качестве исходных для моделирования.

Критерий сходимости по энергии для оптимизации геометрии был равен 10^{-10}, градиент RMS <0,0003, смещение RMS <0,0006. SHRINK-фактор, определяющий число *k* точек в обратном пространстве в схеме Пака–Монкхорста, в которых была диагонализирована матрица Кона–Шэма, был равен 8 8. Параметр TOLINTEG, отвечающий за значения интегралов перекрывания, был установлен на 10 10 10 10 20 для обеспечения достаточно высокой точности моделируемых систем [80]. Все расчеты проведены как с введением дисперсионной поправки D3 по Гримме [81], так и без нее. Расчет ИК колебательных частот показал отсутствие мнимых частот. Модули упругости по Хиллу и Ройсу [82; 83], а также их пространственные распределения и визуализация получены с помощью онлайн-пакета ELATE [84]. Квантово-топологический анализ электронных плотностей выполнен с использованием программы TOPOND[3].

Расчеты проведены с использованием ресурсов кластера ИВЦ НГУ[4]. Количество узлов, использовавшихся для работы, – 6: 12 процессоров и 12 Гб оперативной памяти на узел.

2. Результаты и их обсуждение

Параметры и объем элементарной ячейки кристалла

Оптимизированные в результате квантово-химических расчетов значения параметров элементарной ячейки приведены в табл. 1. Поскольку расчеты проводились для модели при 0 К, для сравнения расчетных значений при атмосферном давлении использовали также значения, полученные экстраполяцией к 0 К экспериментальных зависимостей параметров элементарной ячейки и объема в интервале 300–100 К [85] (установка ячейки, выбранная в [85], была перед экстраполяцией приведена к установке, использовавшейся в [61] и в настоящей работе).

Сравнение результатов расчета параметров и объема элементарной ячейки с экспериментальными значениями показало, что их лучшее совпадение достигается без использования в расчете дисперсионной поправки. Целесообразность использования дисперсионных поправок по Гримме и Ткаченко–Шеффлеру [81] уже ставилась под сомнение при изучении механических свойств кристаллов различных аминокислот и их сокристаллов [86]. Эмпирическая дисперсионная поправка вносит вклад только в энергию, но не изменяет волновую функцию системы. Мы также приходим к выводу, что функционалы семейства PBE без дисперсионной

[1] https://www.crystal.unito.it

[2] https://www.somewhereville.com/2014/12/30/the-emsl-basis-set-exchange-6-31g-6-31gd-and-6-31gdp-gaussian-type-basis-set-for-crystal8892959803060914etc-conversion-validation-with-gaussian09-and-discussion/#631Gdp

[3] https://www.crystal.unito.it/topond

[4] http://nusc.nsu.ru/wiki/doku.php/doc/index

поправки более точно описывают структурные и механические свойства органических кристаллов [87], тогда как дисперсионные поправки склонны переоценивать ван-дер-ваальсовы взаимодействия.

Таблица 1

Параметры и объемы элементарной ячейки β- (простр. гр. $P2_1$) и β'-глицина (простр. гр. $P2_1/c$) по экспериментальным [61; 85] и расчетным данным при различном внешнем давлении

Table 1

Parameters and Unit Cell Volumes of β- (Space Group $P2_1$) and β'-glycine (Space Group $P2_1/c$) According to Experimental [61, 85] and Calculated Data at Various External Pressures

Давление, ГПа		a, Å	b, Å	c, Å	β,°	V, Å^3
Фаза низкого давления (β-глицин)						
0	Расчет с поправкой Гримме	5,357	5,954	4,992	113,23	146,04
	Расчет без поправки Гримме	5,378	6,174	5,065	111,87	156,07
	Эксперимент при 300 К и 0.0001 ГПа [61]	5,388(2)	6,276(2)	5,091(2)	113,12(3)	158,31(10)
	Эксперимент [85], экстраполирован к 0 К	5,388(1)	6,130(3)	5,067(1)	113,52(1)	153,39(12)
0,2	Расчет с поправкой Гримме	5,354	5,932	4,983	113,50	145,14
	Расчет без поправки Гримме	5,375	6,143	5,056	112,06	154,69
	Эксперимент 300 К [61]	5,381(1)	6,217(2)	5,076(2)	113,42(2)	155,80(10)
0,4	Расчет с поправкой Гримме	5,351	5,911	4,975	113,66	144,12
	Расчет без поправки Гримме	5,372	6,114	5,046	112,25	153,38
	Эксперимент 300 К [61]	5,378(1)	6,184(2)	5,062(1)	113,64(2)	154,20(10)
0,7	Расчет с поправкой Гримме	5,346	5,882	4,963	113,91	142,67
	Расчет без поправки Гримме	5,367	6,072	5,032	112,52	151,51
	Эксперимент 300 К [61]	5,375(1)	6,125(1)	5,051(1)	113,93(1)	151,80(10)
Фаза высокого давления (β'-глицин)						
0,9	Расчет с поправкой Гримме	5,329	5,843	9,870	113,98	280,80
	Расчет без поправки Гримме	5,364	6,113	9,936	112,92	300,08
	Эксперимент 300 К [61]	5,367(3)	6,010(3)	10,010(3)	114,16(6)	294,73(10)
1,7	Расчет с поправкой Гримме	5,31	5,764	9,836	114,31	274,36
	Расчет без поправки Гримме	5,346	5,974	9,906	113,47	290,21
	Эксперимент 300 К [61]	5,363(4)	5,932(3)	9,979(2)	114,33(6)	289,27(10)

Относительные изменения параметров элементарной ячейки различных фаз глицина при разных давлениях показывают, что наибольшая линейная деформация кристаллов β-глицина наблюдается в направлении ***b***, наименьшая – в направлении ***a*** (см. табл. 1 и рис. 1). Это связано с пространственным атомным строением данной кристаллической модификации глицина: молекулярные цепи цвиттер-ионов в слое (***a*** × ***c***) располагаются параллельно оси ***a*** и перпендикулярно направлению ***b***. При фазовом переходе параметр ***c*** удваивается из-за изменения симметрии структуры, хотя при этом изменение межмолекулярных расстояний в направлении ***c*** мало.

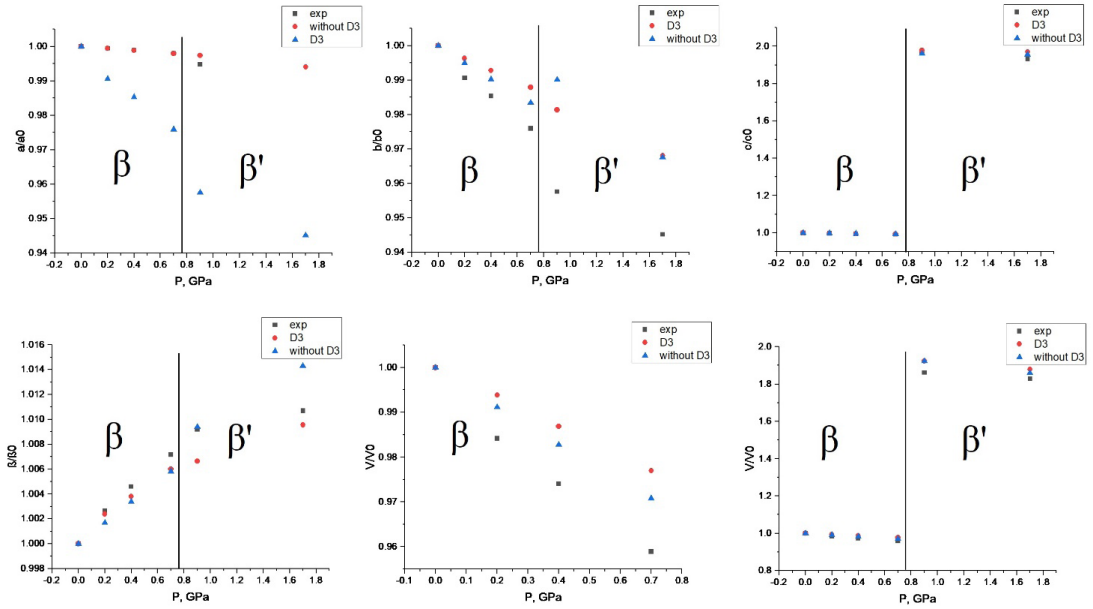


Рис. 1. Относительные изменения параметров элементарной ячейки a/a_0, b/b_0, c/c_0, β/β_0 и V/V_0 по экспериментальным [62] и расчетным данным с дисперсионной поправкой D3 и без нее при разных величинах давления. Параметры с индексом 0 соответствуют н.у. Вертикальная линия соответствует 0,76 ГПа и отделяет область существования фазы низкого давления от области существования фазы высокого давления, в соответствии с данными [61]

Fig. 1. Relative changes in elementary quantities a/a_0, b/b_0, c/c_0, β/β_0, and V/V_0 according to experimental [61] and calculated values with dispersion correction D3 and disregarding various pressure values. Parameters with index 0 correspond to normal conditions. The vertical line corresponds to 0.76 GPa and separates the low-pressure phase existence region from the high-pressure phase existence region, according to experimental data [61]

Геометрические параметры внутримолекулярных и межмолекулярных связей

Оптимизированные в ходе квантово-химических расчетов значения длин ковалентных связей и валентных углов согласуются с ранее полученными экспериментальными величинами, экстраполированными к 0 К [85]. При повышении давления до точки полиморфного перехода расчетная внутримолекулярная геометрия изменяется незначительно. Это характерно для гидростатического сжатия молекулярных органических кристаллов. При давлении 0,76 ГПа происходит обратимый фазовый переход первого рода в фазу высокого давления β' [61], при этом каждый второй цвиттер-ион совершает поворот. В результате в независимой части элементарной ячейки оказываются два симметрически независимых цвиттер-иона, что вызывает удвоение параметра ***c*** элементарной ячейки (рис. 2) [61]. Внутримолекулярная геометрия симметрически независимых молекул различается несущественно, за исключением углов, характеризующих положение аминогруппы относительно остова.

Исходя из межатомных расстояний, цвиттер-ионы в кристаллической структуре β-глицина связаны более короткими водородными связями N1-H3…O1 (I) и N1-H4…O2 (II) в двумерные слои в плоскости (***a*** × ***c***), подобные тем, которые присутствуют в α-полиморфной модификации, а также в δ- и ς-фазах высокого давления [51]. Водородные связи между слоями N1-H5…O1 (III) и N1-H5…O2 (IV) более длинные. При приложении внешнего гидростатического давления эти H-связи заметно укорачиваются и расстояние между молекулами, формирующими слои, уменьшается (рис. 2).

Руководствуясь кристаллографическим критерием существования H-связей по Гамильтону [88], можно предположить, что сближение атомов O1 и H4 может приводить к образованию еще одной связи – II' (рис. 2). Сравнение расстояний, полученных экспериментально

при 300 К, ($R_{O1...H4}$ = 2,519 Å) и расчетом ($R_{O1...H4}$ = 2,459 Å) с ван-дер-ваальсовыми радиусами (R_O+R_H = 2,72 Å [89]) говорит в пользу образования новой водородной связи II'.

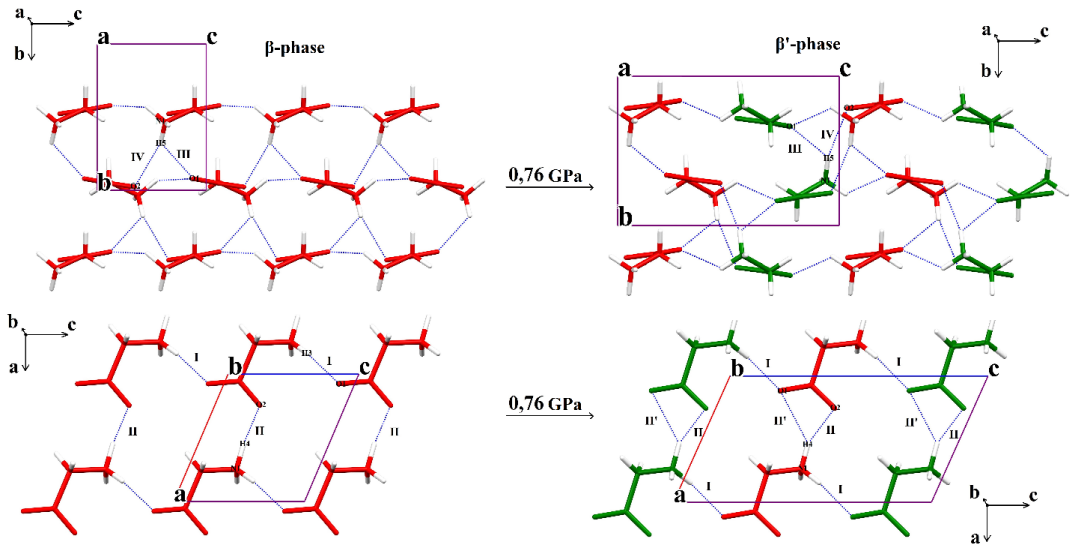


Рис. 2. Фрагменты кристаллических структур β-глицина и β'-глицина в двух ориентациях. Красный и зеленый цвет соответствуют двум симметрически независимым типам цвиттер-ионов.
Fig. 2. Fragments of β-glycine and β'-glycine crystal structures in two orientations. Red and green colors correspond to two symmetrically independent types of zwitterions

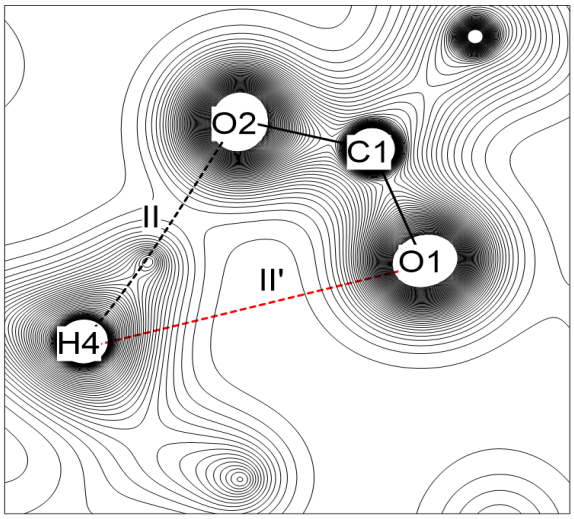


Рис. 3. Электронная плотность β'-глицина в плоскости молекулярных слоев. Черная пунктирная линия соответствует линии связи II, красная пунктирная линия – предположительно возможной связи II'. Интервал между изолиниями 0,02 э·Å^5
Fig. 3. Electron density of β'-glycine in the plane of molecular layers. The black dotted line corresponds to link II, the red dotted line corresponds to the hypothetical link II'. Isolines interval is 0.02 e·Å^5

Поскольку изменения в системе водородных связей могут приводить к изменению различных макроскопических свойств, в частности, упругих и пьезоэлектрических, мы исследовали этот вопрос детально. Был проведен поиск критических точек нековалентных связей

(КТС) для фаз низкого и высокого давления в различных точках внешнего гидростатического давления (табл. 2). Связевые межатомные пути и соответствующие критические точки связей позволили установить молекулярный граф. Оказалось, что связевого пути, соответствующего связи II', не существует. 2D-карта распределения электронной плотности (рис. 3) также не выявила образования каких-либо контактов между атомами O1 и H4. Таким образом, топологический анализ не подтвердил образование связи II' в ходе фазового перехода: вопреки геометрическому кристаллографическому критерию [88] число водородных связей в системе β-глицин/β'-глицин при фазовом переходе не изменяется.

Электронные характеристики нековалентных взаимодействий

Поскольку внутримолекулярные связи устойчивы к внешнему давлению, наше внимание было перенесено на межмолекулярные взаимодействия. Для описания нековалентных взаимодействий используют различные дескрипторы связывания, основанные на электронной плотности и ее топологии, которые позволяют изучать особенности распределения электронов в пространстве и связывать изменения электронной среды с изменениями в структуре кристаллов [90]. Так, отрицательные значения лапласиана электронной плотности выявляют области концентрации электронной плотности. Для нековалентных взаимодействий характерны положительные значения лапласиана в КТС (табл. 2). Атом H5 образует бифуркационную водородную связь N1-H5…(O1/O2) (которую для удобства мы разбиваем на две компоненты – связи III и IV). Из характеристик электронной плотности (табл. 2) ясно, что эта бифуркационная связь является асимметричной, но с увеличением давления после фазового перехода электронная плотность обеих ее ветвей (III и IV) выравнивается.

Кривизну электронной плотности в КТС мы оценили с помощью собственных значений гессиана электронной плотности и связанной с ними характеристики – эллиптичности связи $\varepsilon = (\lambda_1/\lambda_2) - 1$. Так, индекс ε при 0,0001 ГПа для связей III и IV больше, чем для связей I и II. Этот результат показывает, что для более слабых связей характерно более неравномерное распределение ЭП в пространстве перпендикулярно линиям связи. Эллиптичности связей I и II близки по значениям. При увеличении давления величина эллиптичности растет для связей I, II, III и уменьшается для связи IV. Это свидетельствует об увеличении асимметричности распределения ЭП в результате гидростатического сжатия для всех связей, кроме IV. При фазовом переходе наблюдается скачок эллиптичности для слабых связей III и IV, указывающий на увеличение взаимного влияния связей III и IV друг на друга: эти связи образованы с участием одного атома водорода H5 (и лежат в одной плоскости), а изменение длины связи III при фазовом переходе Δr_{III} (0,7→0,9 ГПа) = 0,041 Å сопоставимо с изменением связи IV Δr_{IV} (0,7→0,9 ГПа) = 0,049 Å (рис. 4). В то же время, угол O1-H5-O2 увеличивается с 90,21° до 91,99°, что говорит о росте межэлектронного отталкивания между связями III и IV. Последнее связано с увеличением концентрации электронов перпендикулярно линии связи. В свою очередь, это характерно для перераспределения электронной плотности между связями III и IV в ходе фазового перехода.

Распределение лапласиана ЭП в водородных связях β-глицина (рис. 5) показывает, что во всех случаях неподеленная пара атома кислорода, вовлеченного в H-связь, ориентирована в сторону атома H. После фазового перехода эта закономерность остается справедливой.

Таблица 2

Топологические характеристики в критических точках водородных связей в различных фазах β-глицина

Table 2

Topological Characteristics at the Hydrogen Bonds Critical Points in Different Phases of β-glycine

P, ГПа	Связь	r(O…H), Å	ρ, ат.ед.	$\nabla^2\rho$, ат.ед.	v, ат.ед.	g, ат.ед.	$E_{св}$, кДж/моль [82]	рКТС, ат.ед [96]	ε
Фаза низкого давления – β-глицин									
0	I	1,774	0,038	0,109	–0,028	0,028	36,50	–0,030	0,021
	II	1,664	0,052	0,137	–0,040	0,037	48,84	–0,036	0,022
	III	2,233	0,013	0,047	–0,015	0,011	14,70	–0,014	0,070
	IV	2,118	0,019	0,058	–0,011	0,015	19,17	–0,017	0,095
0,2	I	1,769	0,039	0,111	–0,029	0,028	37,02	–0,030	0,022
	II	1,662	0,052	0,137	–0,041	0,037	49,10	–0,036	0,023
	III	2,230	0,013	0,048	–0,018	0,011	14,84	–0,014	0,075
	IV	2,104	0,020	0,059	–0,015	0,015	19,82	–0,018	0,092
0,4	I	1,765	0,039	0,112	–0,029	0,029	37,42	–0,031	0,022
	II	1,660	0,052	0,138	–0,041	0,038	49,36	–0,036	0,028
	III	2,227	0,014	0,048	–0,011	0,011	14,97	–0,014	0,079
	IV	2,091	0,020	0,06	–0,016	0,016	20,35	–0,018	0,090
0,7	I	1,758	0,040	0,114	–0,030	0,029	38,20	–0,031	0,022
	II	1,658	0,053	0,139	–0,041	0,038	49,76	–0,037	0,023
	III	2,223	0,014	0,049	–0,011	0,012	15,23	–0,014	0,086
	IV	2,073	0,021	0,063	–0,017	0,016	21,14	–0,019	0,087
Фаза высокого давления – β'-глицин									
0,9	I	1,765	0,039	0,114	–0,030	0,029	38,07	–0,031	0,020
	II	1,662	0,052	0,138	–0,041	0,038	49,36	–0,036	0,025
	III	2,052	0,020	0,067	–0,016	0,017	21,66	–0,019	0,045
	IV	2,167	0,017	0,058	–0,014	0,014	18,38	–0,017	0,136
	II '	КТС не обнаружена							
1,7	I	1,755	0,040	0,117	–0,031	0,030	39,25	–0,032	0,022
	II	1,664	0,052	0,138	–0,041	0,038	49,49	–0,036	0,026
	III	2,085	0,019	0,065	–0,015	0,016	20,74	–0,018	0,059
	IV	2,103	0,020	0,063	–0,016	0,016	20,61	–0,018	0,104
	II '	КТС не обнаружена							

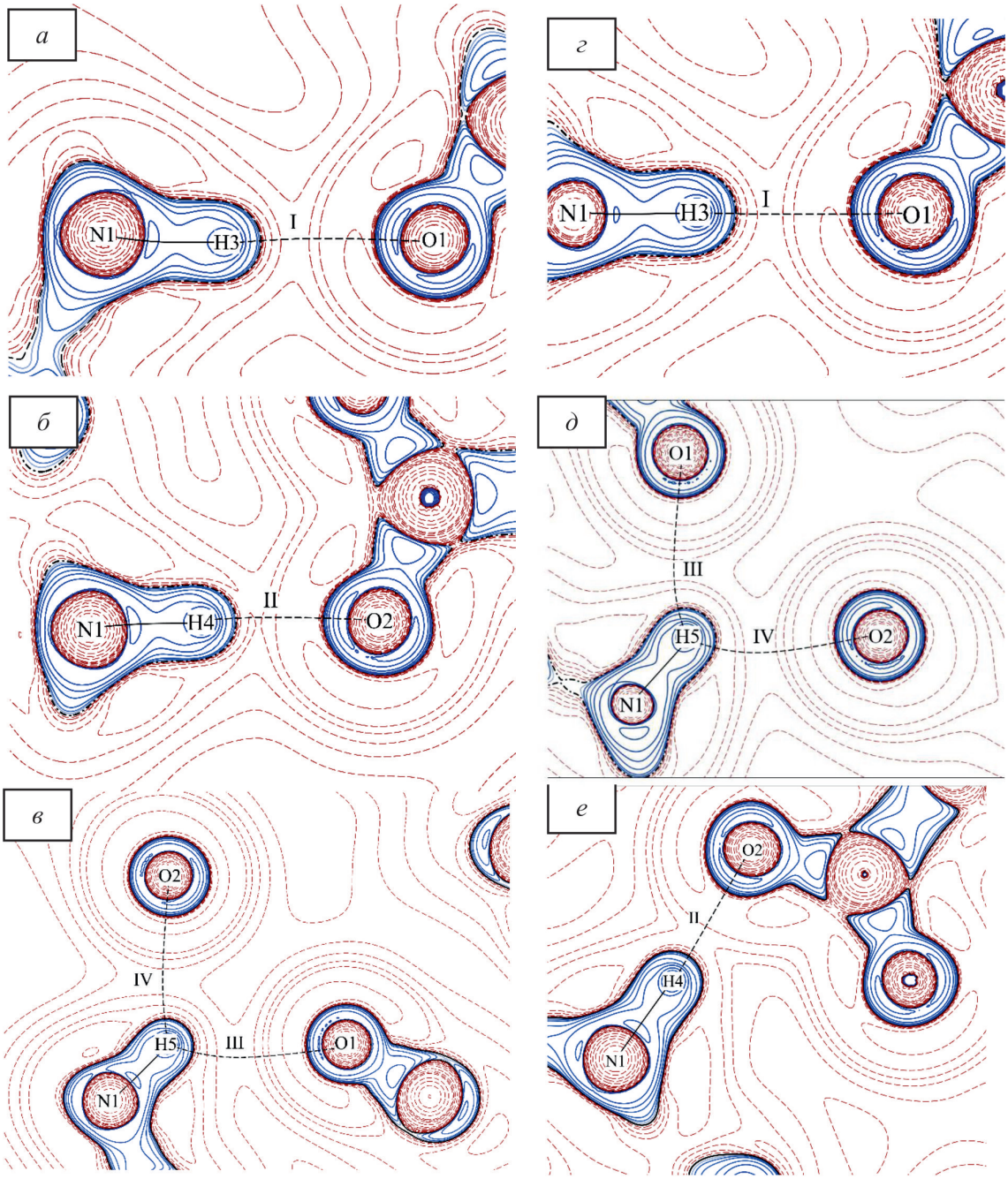


Рис. 4. 2D-карта лапласиана электронной плотности в плоскостях, соответствующих H-связям при давлении 0,0001 ГПа (*а*, *б*, *в*) и давлении выше точки фазового перехода (0,9 ГПа, *г*, *д*, *е*) Синие линии соответствуют концентрациям электронной плотности. Шаг изолиний ±(2, 4, 8) · 10^n э ·$Å^5$ (–3 ≤ n ≤ 3)

Fig. 4. 2D map of the electron density laplacian in the planes corresponding to H-bonds at 0.0001 GPa (Figs. *а*, *б*, *в*) and a pressure above the phase transition point (0.9 GPa, Figs. *г*, *д*, *е*) Blue lines correspond to electron density concentrations. Isoline intervals are ± (2, 4, 8) · 10^n э ·$Å^5$ (–3 ≤ n ≤ 3)

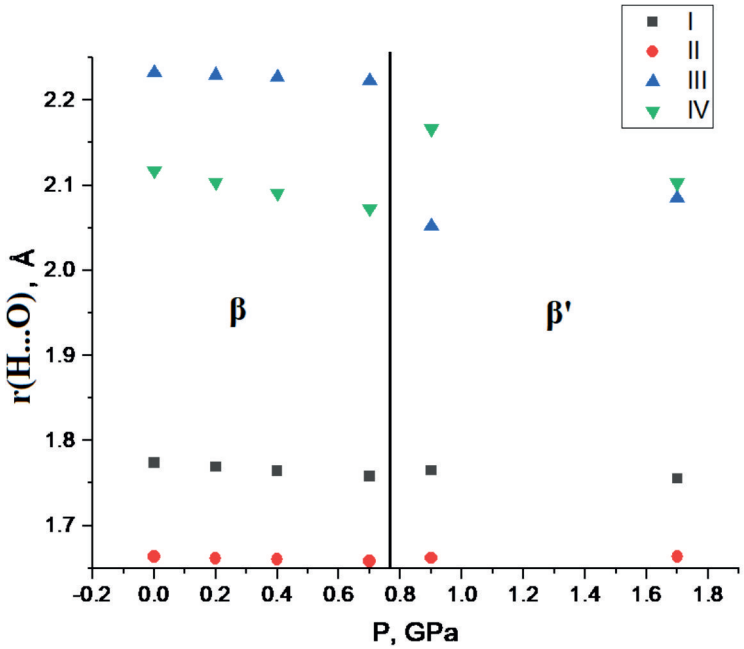


Рис. 5. Изменение межатомных расстояний H…O в водородных связях. Связь II направлена параллельно оси a, связь I – вдоль оси c, а связи III и IV лежат в направлении b. Вертикальная линия соответствует 0,76 ГПа и отделяет область существования фазы низкого давления от области существования фазы высокого давления, в соответствии с данными [61].

Fig. 5. Change in H…O interatomic distances in hydrogen bonds. Bond II is directed parallel to the a axis, bond I is in the c direction, and bonds III and IV lie in the b direction. Parameters with index 0 correspond to normal conditions. The vertical line corresponds to 0.76 GPa and separates the low-pressure phase existence region from the high-pressure phase existence region, according to experimental data [61]

Для оценки значений энергии $E_{св}$ H-связей мы использовали локальную плотность кинетической энергии электронов g(r) в критических точках водородных связей, а именно эмпирическое соотношение $Eсв = 0{,}429\ g$ [91; 92]. Полученные величины приведены в табл. 2. Их анализ показывает, что перечисленные выше связи с увеличением внешнего гидростатического давления упрочняются: $E_{св}$ увеличивается, а расстояния между протоном и акцептором уменьшаются. Таким образом, из геометрических и энергетических характеристик становится ясно, что относительно сильные связи I и II сжимаются хуже, чем связи III и IV. Уместно предположить, что сопротивление деформациям вдоль молекулярных слоев кристалла глицина (направление ***a***) увеличено, а деформация максимальна в направлении ***b***, перпендикулярном молекулярным слоям.

Таким образом, в ходе фазового перехода при 0,76 ГПа происходит переключение связей III и IV, хотя основная сетка водородных связей не изменяется. Интересной особенностью фазового перехода является то, что слабые водородные связи III и IV как бы меняются местами (табл. 2) что приводит к более плотной упаковке кристалла. В то же время более жесткие связи I и II удерживают структуру от полной перестройки: расстояния H…O в этих связях непрерывно монотонно уменьшаются даже при прохождении через фазовый переход. Это сохраняет монокристалл от разрушения и обеспечивает возврат к исходной структуре после снятия приложенного давления. Подобные явления, когда большая часть водородных связей при повышении давления просто непрерывно сжимается, и только отдельные связи, переключаясь, обеспечивают структурную реорганизацию, уже описаны в литературе и характерны для обратимых фазовых переходов [93]. При дальнейшем повышении давления компоненты III и IV

бифуркационной связи выравниваются, что также является достаточно типичным для сжатия органических кристаллов и может быть одной из причин устойчивости фазы β'-глицина в отношении новых фазовых переходов при дальнейшем повышении давления, как минимум, до 7,6 ГПа [50], что значительно выше давления, при котором термодинамически устойчивая при нормальных условиях γ-полиморфная модификация глицина претерпевает фазовый переход в δ-форму [58].

Связь геометрических характеристик H-связей и микроскопического квантового давления

Для выяснения природы анизотропии сопротивления определенным деформациям обратимся к анализу упругих свойств глицина. Выше отмечалось, что деформации затруднены вдоль молекулярных слоев благодаря относительно сильным водородным связям и облегчены перпендикулярно им, где реализуются более слабые водородные связи. Чтобы проверить это утверждение, учтем, что, согласно классической теории упругости [94], напряженное состояние материала описывается симметричным тензором напряжений второго ранга. Пространственное изменение электронной среды в молекулах и кристаллах при сжатии и растяжении описывают в терминах плотности тензора локальных напряжений σ(r) [92,95]:

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\sigma}_{kin}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{\sigma}_{xc}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{\sigma}_{els}(\boldsymbol{r}). \quad (1)$$

Здесь $\sigma_{kin}(\boldsymbol{r})$ – квантовый вклад кинетической энергии электронов, $\sigma_{xc}(\boldsymbol{r})$ – член, учитывающий обменные и корреляционные электронные эффекты, $\sigma_{elst}(\boldsymbol{r})$ – классическая составляющая, включающая в себя электростатические взаимодействия электронов и ядер. Тензорная функция $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{r})$ является основной характеристикой растяжения и сжатия электронного континуума, находящегося в поле ядер [96].

Электростатический вклад электронов и ядер в распределение электронной подсистемы можно трактовать как внешнее поле наравне с электростатическим полем ядер [97]. Тогда плотность квантового тензора напряжений $\boldsymbol{\sigma}_{kin}(\boldsymbol{r})$ можно записать как

$$\sigma_{ij}(\boldsymbol{r}) = \sigma_{ij}^{S}(\boldsymbol{r}) + \sigma_{ij}^{x}(\boldsymbol{r}). \quad (2)$$

Здесь $\sigma_{ij}^{S}(\mathbf{r})$ и $\sigma_{ij}^{x}(\mathbf{r})$ – кинетическая и обменно-корреляционная компоненты соответственно. Кулоновская электронная корреляция мала по сравнению с обменной корреляцией, поэтому ей можно пренебречь [98].

Распределение локального квантового давления (КЭД) в электронной среде, вызванного движением электронов и их обменно-корреляционными свойствами, изотропно и равно

$$\mathrm{p}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{3}\left(\sigma_{11}(\boldsymbol{r}) + \sigma_{22}(\boldsymbol{r}) + \sigma_{33}(\boldsymbol{r})\right) \quad (3)$$

КЭД описывает локальное изменение средней внутренней энергии при сжатии бесконечно малого элемента среды, находящегося в точке r, при сохранении его формы и числа частиц внутри деформируемого элемента. Сдвиговая часть тензора напряжений, которая описывает реакцию на локальное изменение формы элемента в точке **r** без изменения его объема, вклада в среднее давление не дает. Увеличение КЭД в точке соответствует увеличению здесь плотности электронной энергии и соответствует стремлению системы компенсировать напряжения, возникающие при внешнем воздействии. Следовательно, изменение электронной среды в молекулярном пространстве характеризует изменение механических свойств.

Вклад плотности кинетической энергии электронов в локальное квантовое давление в теории функционала плотности имеет вид [99]:

$$p^S(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{3}g(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{4}\nabla^2\rho(\boldsymbol{r}), \tag{4}$$

где $g(\boldsymbol{r})$ – положительно определенная плотность кинетической энергии невзаимодействующих электронов [92]. В рамках неорбитального подхода теории функционала плотности [100] функция $g(\boldsymbol{r})$ может быть выражена в терминах электронной плотности, ее градиента и лапласиана.

Обменно-корреляционную составляющую КЭД можно учесть, используя обменно-корреляционные функционалы теории функционала плотности. В простейшем случае приближение локальной электронной плотности (ПЛП) дает обменный вклад во внутреннее давление электронной среды в следующем виде:

$$p^x_{\text{ПЛП}}(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}\rho^{4/3}(\boldsymbol{r}). \tag{5}$$

Таким образом, распределение КЭД в неоднородной электронной среде, обусловленное кинетическими и обменными эффектами, можно описать выражением

$$p(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{3}\, g(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{4}\,\nabla^2\rho(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\,\rho^{\frac{4}{3}}(\boldsymbol{r}). \tag{6}$$

Давление имеет размерность Дж/м^3 и описывает самоорганизацию квантовой части плотности электронной энергии системы в физическом пространстве (а не саму электронную плотность) в виде «сжатых» в электростатическом поле ядер и электронов при внешнем воздействии областей положительного давления для атомных остовов и внутримолекулярных взаимодействий и «растянутых» (мягких) областей отрицательного давления для межмолекулярных взаимодействий.

Аппроксимируя $g(\boldsymbol{r})$ по Киржницу [101] и используя формулу (6), мы перешли в область квантовой кристаллографии [86] и провели расчет квантового электронного давления в каждой точке системы. Оценивая свойства электронной среды с точки зрения ее ответа на внешнее воздействие, мы обнаружили (рис. 6), что наибольшая податливость обеих фаз глицина наблюдается в межмолекулярном пространстве, а области относительно высокого положительного КЭД (ковалентные связи, неподеленные электронные пары) проявляют наибольшую устойчивость к внешним воздействиям.

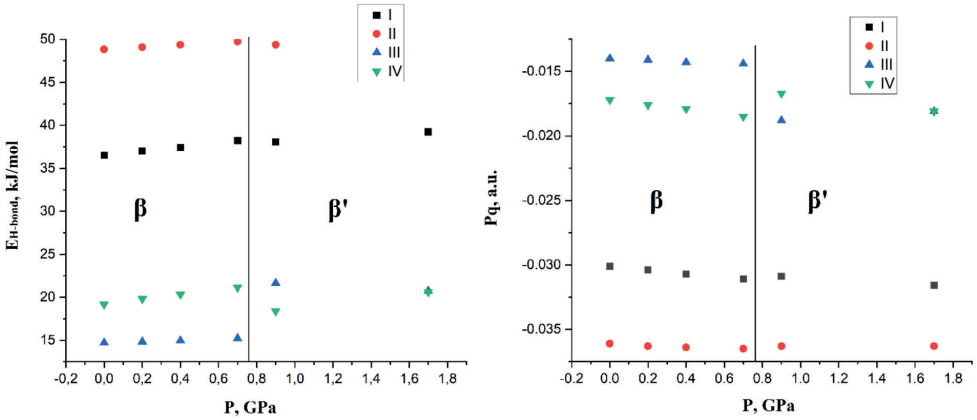


Рис. 6. Зависимость $E_{св}$ и квантового электронного давления в критических точках водородных связей в фазах β- и β'-глицина от внешнего гидростатического давления. Увеличение $E_{св}$ соответствует понижению давления. Вертикальная линия соответствует 0,76 ГПа и отделяет область существования фазы низкого давления от области существования фазы высокого давления, в соответствии с [61].

Fig. 6. Dependence of E_b and quantum electron pressure at the hydrogen bonds critical points in β-and β'-glycine on external hydrostatic pressure. An increase in E_b corresponds to a decrease in P. The vertical line corresponds to 0.76 GPa and separates the region of existence of the low-pressure phase from the region of existence of the high-pressure phase, in accordance with [61]

Все Н-связи глицина показывают отрицательные значения КЭД в КТС (табл. 2), выявляя «мягкие» области электронной среды. Абсолютные значения КЭД для слабых связей III и IV меньше значений для связей I и II. При увеличении внешнего давления КЭД на этих связях незначительно увеличивается (табл. 2). После фазового перехода при дальнейшем повышении внешнего давления до 1,7 ГПа квантовое давление в КТС слабых связей III и IV выравнивается. Таким образом, подтверждается высказанное выше предположение о стремлении слабых связей III и IV выровнять свои характеристики под действием внешнего гидростатического сжатия, что соответствует симметризации бифуркационной связи N1-H5...(O1/O2). Это приводит к значительному увеличению сопротивлению деформациям в направлении ***b***. Этот вывод согласуется с анализом геометрических и энергетических характеристик: сжатие водородных связей в β-глицине соответствует увеличению энергии связей $E_{св}$ и уменьшению квантового давления p в них.

Карты распределения квантового электронного давления (рис. 7) отчетливо фиксируют его изменение в системе слабых связей III и IV в фазе высокого давления, при 0,9 ГПа и 1,7 ГПа: при фазовом переходе квантовое давление в межмолекулярном пространстве уменьшается, что соответствует повышению концентрации электронов в обеих связях и коррелирует с изменением энергий связи. При дальнейшем сжатии до 1,7 ГПа области сжатия этих связей выравниваются относительно друг друга. Для относительно сильных связей I и II характерно лишь незначительное сжатие межмолекулярного пространства при увеличении внешнего давления. Таким образом, в случае кристалла β-глицина, и, как можно предположить, для многих молекулярных кристаллов, основные изменения упругих свойств под давлением определяются реорганизацией межмолекулярного пространства, отвечающего ван-дер-ваальсовым и Н-связям.

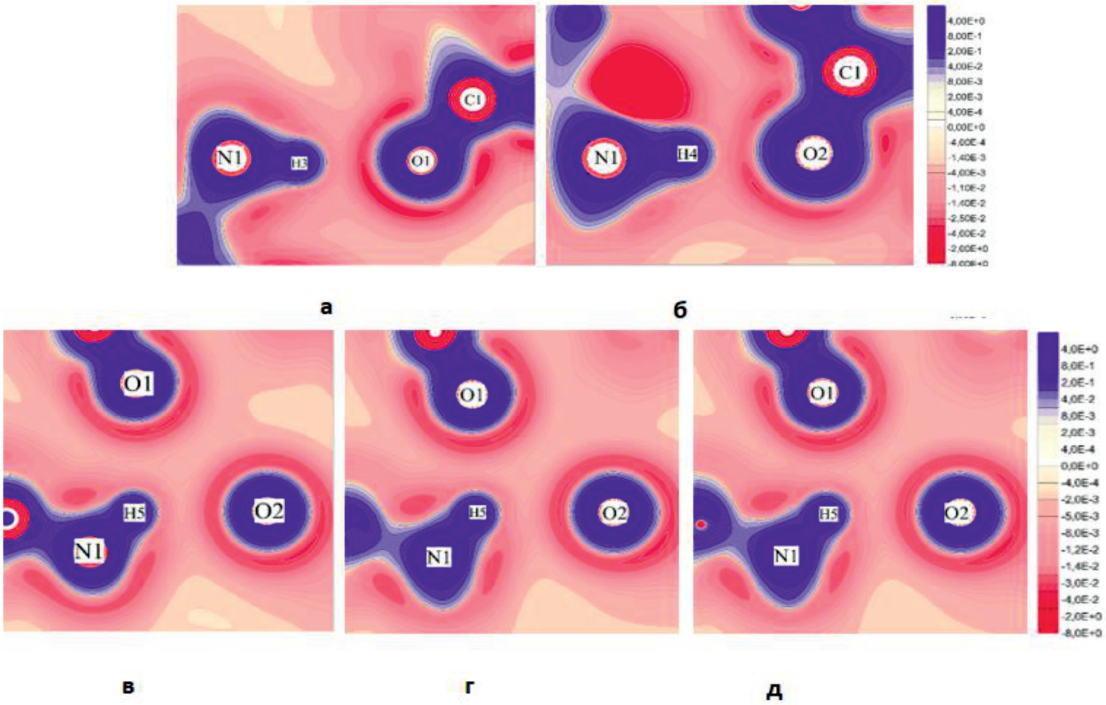


Рис. 7. Карты квантового электронного давления в структурах β-глицина и β'-глицина для Н-связей в соответствующих плоскостях при разных давлениях: *а* – связь I при 0 ГПа; *б* – связь II при 0 ГПа; *в*, *г*, *д* – связи III и IV при 0, 0,9 и 1,7 ГПа. Шаг изолиний $\pm(2, 4, 8) \cdot 10^n$ э $\cdot$Å^5 ($-3 \le n \le 3$)

Fig. 7. Maps of quantum electronic pressure in the structures of β-glycine and β'-glycine for H-bonds in the corresponding planes at different pressures: *a*) Bond I at 0 GPa, *б*) Bond II at 0 GPa; *в*), *г*), *д*) Bonds III and IV at 0, 0.9, and 1.7 GPa. Isoline interval is $\pm(2, 4, 8) \cdot 10^n$ э $\cdot$Å^5 ($-3 \le n \le 3$)

Макроскопические упругие свойства фаз β-глицина

При исследованиях упругих и пьезоэлектрических свойств кристаллов используют классические представления механики сплошных сред и теории упругости [94; 102]. Макроскопические дескрипторы упругости, такие как модуль Юнга E, модуль сдвига G, показатели гидростатической H и объемной сжимаемости K, традиционно использующиеся в материаловедении [82; 83], дают оценку механических свойств материала. В данной работе мы рассмотрим гидростатическую сжимаемость H, которая представляет собой податливость кристалла при изотропном внешнем напряжении.

Для получения значений и пространственной анизотропии этого дескриптора мы рассчитали тензоры упругостей для фаз низкого и высокого давления β-глицина и проанализировали их в программном пакете ELATE [84]. Рассчитанные главные компоненты тензора упругости (табл. 3) показывают, что собственные значения тензора упругости положительны во всех точках внешнего давлениях, что свидетельствует о механической стабильности кристалла β-глицина. Их величины в разной степени растут с ростом давления, что соответствует увеличению сопротивления кристалла сжатию. В литературе нет экспериментальных данных такого рода, а единственный теоретический расчет компоненты C66 [54] проведен в базисе плоских волн, который для молекулярных кристаллов малопригоден. Мы надеемся, что наши данные стимулируют эксперименты в этом направлении.

Таблица 3

Рассчитанные компоненты главной диагонали тензора упругости C β-глицина

Table 3

Calculated Components of the Main Diagonal of the Elasticity Tensor C of β-glycine

P, ГПа	0	0,2	0,4	0,7	0,9	1,7
C_{11}	98,11	101,12	103,70	107,45	102,22	109,12
C_{22}	28,77	30,14	31,53	33,78	25,96	30,55
C_{33}	49,87	50,86	51,93	53,72	53,95	62,25
C_{44}	6,64	7,06	7,54	8,13	8,97	9,67
C_{55}	15,72	16,03	16,30	16,75	17,25	19,09
C_{66}	8,63	8,93	9,28	9,67	11,64	12,26

Таблица 4

Рассчитанные модули упругости по Войту, Ройсу и Хиллу, а также показатель анизотропии линейной сжимаемости глицина при различном внешнем гидростатическом давлении

Table 4

Calculated Elasticity Moduli According to Voight, Royce and Hill, As Well As the Anisotropy Index of the Linear Compressibility of Glycine at Various External Hydrostatic Pressures

Давление, ГПа	K(Войт), ГПа	K(Ройс), ГПа	K(Хилл), ГПа	Hmin, ТПа$^{-1}$	Hmax, ТПа$^{-1}$	Анизотропия гидростатической сжимаемости
0	29,95	21,66	25,80	–0,155	27,27	∞
0,2	30,95	22,45	26,70	–0,275	25,92	∞
0,4	31,92	23,39	27,65	–0,178	24,52	∞
0,7	33,46	24,82	29,14	–0,151	22,61	∞
0,9	30,92	21,42	26,17	–0,282	31,32	∞
1,7	35,99	26,29	31,14	0,399	26,70	66,979

Анизотропия модуля упругости равна отношению его максимального значения к минимальному. В случае негативной сжимаемости она считается «бесконечной», что следует понимать как максимально возможную неэквивалентность свойств в разных направлениях [84].

Судя по рассчитанным модулям упругости по Войту, Ройсу и Хиллу и показателю анизотропии линейной сжимаемости, кристаллы β-глицина достаточно плохо поддаются действию внешних изотропных давлений (табл. 4). Анизотропия сжимаемости с увеличением давления уменьшается явно после фазового перехода. Это естественно увязать с симметризацией бифуркационной водородной связи, состоящей в выравнивании ее компонентов III и IV, так как эти связи ответственны за максимальную сжимаемость Hmax (см. ниже).

Гидростатическая сжимаемость

Сжимаемость кристалла под воздействием внешнего давления удобно представить, используя пространственную визуализацию максимальных и минимальных значений отдельных компонент линейной (гидростатической) сжимаемости. Как показано на рис. 8, максимальная гидростатическая сжимаемость при 0,0001 ГПа наблюдается перпендикулярно молекулярным слоям в направлениях связей III и IV.

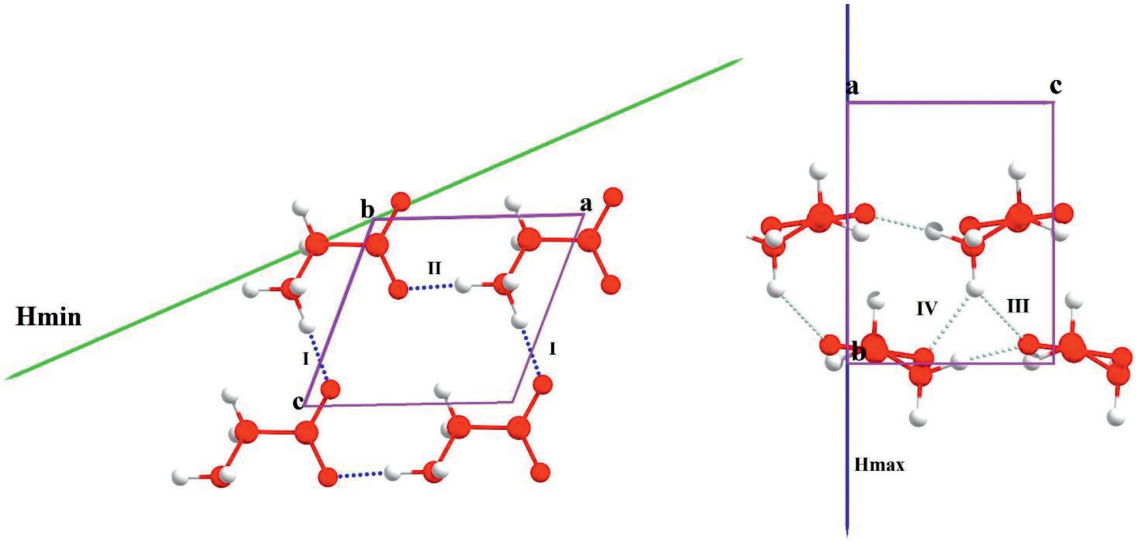


Рис. 8. Визуализация пространственных значений максимальной и минимальной сжимаемости при гидростатическом сжатии. Зеленая ось соответствует направлению минимальной сжимаемости, синяя ось – максимальной сжимаемости

Fig. 8. Visualization of the spatial dependences of the maximum and minimum compressibility under hydrostatic compression. The green axis corresponds to the direction of minimum hydrostatical compressibility, the blue axis corresponds to maximum hydrostatic compressibility

Более слабые Н-связи дают незначительный вклад в сопротивление деформациям в направлении ***b*** элементарной ячейки (табл. 1, рис. 1). Направление минимальной гидростатической сжимаемости соответствует сжатию кристалла в плоскости молекулярных слоев (***a*** × ***c***) под углом (24,6°) относительно связи C1-C2. Это можно объяснить тем, что более сильные Н-связи I и II дают значительный вклад в сопротивление деформациям вдоль молекулярных слоев. Стоит отметить, что угол между H_{min} и связью II составляет 20,9°, а между H_{min} и связью I – 86,4°. Это может свидетельствовать о том, что больший вклад в сопротивление этим деформациям вносит связь II. Отрицательная линейная сжимаемость связана с наличием как относительно «жестких» (сильных связей типа I, II), так и «мягких» Н-связей (III, IV), как было отмечено выше. Hmin лежит в плоскости (***a*** × ***c***), анизотропное сжатие которой соответствует

изменению угла β. Поэтому вклад отдельных связей (I и II) в H_{min} дифференцировать сложно. С увеличением давления максимальная гидростатическая сжимаемость уменьшается, что сопровождается увеличением величин $E_{св}$ при сжатии соответствующих связей. После фазового перехода гидростатическая сжимаемость не меняет своей анизотропии, но изменяется по значению; H_{max} также уменьшается, что сопровождается постепенной симметризацией бифуркационной водородной связи и выравнивания ее компонентов III и IV при дальнейшем гидростатическом сжатии β'-формы после ее образования до 1.7 ГПа.

Заключение

В данной работе установлена взаимосвязь между изменением микроскопического квантового давления, макроскопической сжимаемостью и геометрическими и энергетическими характеристиками водородных связей, формирующими структуру кристаллов β-глицина.

Сжатие кристаллов β-глицина под действием внешнего давления сопровождается изменением внутреннего квантового давления в межмолекулярном пространстве. С одной стороны, это приводит к упрочнению водородных связей (уменьшению расстояния H…O и увеличению энергии связи). С другой стороны, это ведет к изменению макроскопических свойств – гидростатической сжимаемости в направлениях, соответствующим направлениям H-связей, и объемной сжимаемости кристалла в целом.

Обратимый фазовый переход β-глицина при 0,76 ГПа в фазу высокого давления, β'-глицин, является примером фазового перехода первого рода, при котором не происходит разрушения монокристалла. Он представляет интерес для молекулярных кристаллов и твердых тел, которые предполагается использовать в качестве функциональных материалов, например, в составе биопьезосенсоров [50]. Обнаружено, что при увеличении внешнего давления в глицине происходит переключение слабых водородных связей, которое приводит к изменению электронного континуума, сопровождающегося поворотом каждого второго цвиттер-иона. Благодаря этому повороту параметр ***c*** и объем элементарной ячейки увеличиваются вдвое. При этом относительно сильные водородные связи, образующие молекулярные слои, удерживают кристаллическую структуру от более значительной перестройки, а кристалл – от разрушения. При повышении давления выше точки фазового перехода слабые связи симметризуются, что может быть одной из причин высокой устойчивости β'-глицина в условиях дальнейшего гидростатического сжатия.

Методы неорбитальной квантовой кристаллографии, в частности, использование такого дескриптора, как квантовое электронное давление, позволяют характеризовать химические связи разного типа, используя ценную информацию о химической связи, которая содержится в электронной плотности. Отметим, что, в отличие от многих других дескрипторов связывания, внутреннее квантовое электронное давление имеет четкий физический смысл и напрямую связано с классическим рассмотрением деформируемых сред. Применение квантово-химических методов с опорой на экспериментальные данные об изменении положений атомов в кристаллической структуре при повышении давления позволяет получать детальную информацию об изменениях электронной плотности, в том числе на водородных связях, даже исходя из экспериментальных данных порошковой дифракции, которые сами по себе не дают достоверных сведений о координатах атомов водорода.

Список литературы

1. **Tsirelson V.** Early days of quantum crystallography: a personal account // Journal of Computational Chemistry. 2018. Vol. 39(17). P. 1029–1037.
2. **Tsirelson V., & Stash A.** Orbital-free quantum crystallography: view on forces in crystals // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2020, 76(5). 769–778.

3. **Genoni A., & Macchi P.** Quantum crystallography in the last decade: developments and outlooks // Crystals, 2020, 10(6), 473.
4. **Grabowsky S., Genoni A., Thomas S. P., & Jayatilaka D.** The advent of quantum crystallography: form and structure factors from quantum mechanics for advanced structure refinement and wavefunction fitting // 21stCentury Challenges in Chemical Crystallography II: Structural Correlations and Data Interpretation, 2020, 65–144.
5. **Grabowsky S., Genoni A., & Bürgi H. B.** Quantum crystallography // Chemical Science, 2017. 8(6), 4159–4176.
6. **Kartashov S. V., Shteingolts S. A., Stash A. I., Tsirelson V. G., & Fayzullin R. R.** Electronic and Crystal Packing Effects in Terms of Static and Kinetic Force Field Features: Picolinic Acid N-Oxide and Methimazole // Crystal Growth & Design, 2023, 23(3), 1726–1742.
7. **Riffet V., Labet V., & Contreras-García J.** A topological study of chemical bonds under pressure: solid hydrogen as a model case // Physical Chemistry Chemical Physics, 2017 19(38), 26381–26395.
8. **Evarestov R. A., & Kuzmin A.** Topological analysis of chemical bonding in the layered FePSe3 upon pressure-induced phase transitions // Journal of Computational Chemistry, 2020, 41(31), 2610–2623.
9. **Tsirelson V. G., Stash A. I., & Tokatly I. V.** Quantum pressure focusing in solids: a reconstruction from experimental electron density // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2019, 75(2), 201–209.
10. **Zhurova E. A., Tsirelson V. G., Zhurov V. V., Stash A. I., & Pinkerton A. A.** Chemical bonding in pentaerythritol at very low temperature or at high pressure: an experimental and theoretical study // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, 2006, 62(3), 513–520.
11. **Matveychuk Y. V., Bartashevich E. V., Skalyova K. K., & Tsirelson V. G.** Quantum electronic pressure and crystal compressibility for magnesium diboride under simulated compression // Materials Today Communications, 2021, 26, 101952.
12. **Барташевич Е. В., Собалев С. А., Матвейчук Ю. В., & Цирельсон В. Г.** Моделирование сжимаемости изоструктурных галогенсодержащих кристаллов на макро- и микроуровнях // Журнал структурной химии, 2021, 62, 1607–1620.
13. **Bartashevich E., Sobalev S., Matveychuk Y., & Tsirelson V.** Variations of quantum electronic pressure under the external compression in crystals with halogen bonds assembled in Cl_3-, Br_3-, I_3^- synthons // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2021, 76(4), 514–523.
14. **Coudert F. X., & Fuchs A. H.** Computational characterization and prediction of metal–organic framework properties // Coordination Chemistry Reviews, 2016, 307, 211–236.
15. **Zhou X., Feng Z., Zhu L., Xu J., Miyagi L., Dong H., Sheng H., Wang Y., Li Q., Ma Y., Zhang H., Yan J., Tamura N., Kunz M., Lutker K., Huang T., Hughes D., Huang X., Chen, B.** High-pressure strengthening in ultrafine-grained metals // Nature, 2020, 579(7797), 67–72.
16. **Guerin S., Tofail S. A., & Thompson D.** Organic piezoelectric materials: milestones and potential // NPG Asia Materials, 2019, 11(1), 10.
17. **Shin D. M., Hong S. W., & Hwang Y. H.** Recent advances in organic piezoelectric biomaterials for energy and biomedical applications // Nanomaterials, 2020, 10(1), 123.
18. **Vijayakanth T., Liptrot D. J., Gazit E., Boomishankar R., & Bowen C. R.** Recent advances in organic and organic–inorganic hybrid materials for piezoelectric mechanical energy harvesting // Advanced Functional Materials, 2022, 32(17), 2109492.
19. **Naumov P., Chizhik S., Panda M. K., Nath N. K., & Boldyreva E.** Mechanically responsive molecular crystals // Chemical Reviews, 2015, 115(22), 12440–12490.
20. **Koshima H., Hasebe S., Hagiwara Y., & Asahi T.** Mechanically Responsive Organic Crystals by Light // Israel Journal of Chemistry, 2021, 61(11-12), 683–696.

21. **Colin-Molina A., Karothu D. P., Jellen M. J., Toscano R. A., Garcia-Garibay M. A., Naumov P., & Rodríguez-Molina B.** Thermosalient amphidynamic molecular machines: Motion at the molecular and macroscopic scales // Matter, 2019 1(4), 1033–1046.
22. **Naumov P., Chizhik S., Commins P., & Boldyreva E.** Bending, Jumping, and Self-Healing Crystals // Mechanically Responsive Materials for Soft Robotics, 2020 105–138.
23. **Desiraju G. R. & Steiner T.** The Weak Hydrogen Bond: In Structural Chemistry and Biology // Oxford University Press, 2001.
24. **Jeffrey G. A.** An introduction to hydrogen bonding // New York: Oxford university press, 1997, vol.12, 228.
25. **Dougherty R. C.** Temperature and pressure dependence of hydrogen bond strength: A perturbation molecular orbital approach // The Journal of Chemical Physics, 1998 109(17), 7372–7378.
26. **Sikka S. K., & Sharma S. M.** The hydrogen bond under pressure // Phase Transitions, 2008, 81(10), 907–934.
27. **Moon S. H., & Drickamer H. G.** Effect of pressure on hydrogen bonds on organic solids // The Journal of Chemical Physics, 1974, 61(1), 48–54.
28. **Malaspina L. A., Genoni A., Jayatilaka D., Turner M. J., Sugimoto K., Nishibori E., & Grabowsky S.** The advanced treatment of hydrogen bonding in quantum crystallography // Journal of Applied Crystallography, 2021, 54(3), 718–729.
29. **Shteingolts S. A., Stash A. I., Tsirelson V. G., & Fayzullin R. R.** Orbital-Free Quantum Crystallographic View on Noncovalent Bonding: Insights into Hydrogen Bonds, π···π and Reverse Electron Lone Pair··· π Interactions // Chemistry–A European Journal, 2021, 27(28), 7789–7809.
30. **Saunders L. K., Pallipurath A. R., Gutmann M. J., Nowell H., Zhang N., & Allan D. R.** A quantum crystallographic approach to short hydrogen bonds // CrystEngComm, 2021, 23(35), 6180–6190.
31. **Grabowsky S., Genoni A., & Bürgi H. B.** Quantum crystallography // Chemical Science, 2017, 8(6), 4159–4176.
32. **Tsirelson V., & Stash A.** Developing orbital-free quantum crystallography: the local potentials and associated partial charge densities // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2021, 77(4), 467–477.
33. **Katrusiak A.** High-Pressure X-ray Diffraction Studies on Organic Crystals // Crystal Research and Technology, 1991, 26(5), 523–531.
34. **Boldyreva E. V.** High-pressure studies of the hydrogen bond networks in molecular crystals // Journal of Molecular Structure, 2004, 700(1–3), 151–155.
35. **Katrusiak A.** Macroscopic and structural effects of hydrogen-bond transformations // Crystallography Reviews, 1996, 5(2), 133–175.
36. **Katrusiak A.** Macroscopic and structural effects of hydrogen-bond transformations: some recent directions // Crystallography Reviews, 2003, 9(2–3), 87–89.
37. **Katrusiak A., & Szafrański M.** Ferroelectricity in NH···N hydrogen bonded crystals // Physical Review Letters, 1999, 82(3), 576.
38. **Boldyreva E. V.** High-pressure studies of the anisotropy of structural distortion of molecular crystals // Journal of Molecular Structure, 2003 647(1-3), 159–179.
39. **Zakharov B. A., & Boldyreva E. V.** High pressure: a complementary tool for probing solid-state processes // CrystEngComm, 2019. 21(1), 10–22.
40. **Rychkov D. A., Stare J., & Boldyreva E. V.** Pressure-driven phase transition mechanisms revealed by quantum chemistry: L-serine polymorphs // Physical Chemistry Chemical Physics, 2017, 19(9), 6671–6676.

41. **Федоров И. А., Корабельников Д. В.** Первопринципное исследование сжимаемости и электронных свойств кристаллического пурина // Журнал структурной химии, 2022, 63(10), 1670–1677.
42. **Milašinović V., Molćanov K., Krawczuk A., Bogdanov N. E., Zakharov B. A., Boldyreva E. V., Jelsch C., Kojić-Prodić B.** Charge density studies of multicentre two-electron bonding of an anion radical at non-ambient temperature and pressure // IUCrJ, 2021, 8(4), 644–654.
43. **Bruce-Smith I. F., Zakharov B. A., Stare J., Boldyreva E. V., & Pulham C. R.** Structural properties of nickel dimethylglyoxime at high pressure: single-crystal X-ray diffraction and DFT studies // Journal of Physical Chemistry C, 2014, 118(42), 24705–24713.
44. **Gajda R., Zhang D., Parafiniuk J., Dera P., & Woźniak K.** Tracing electron density changes in langbeinite under pressure // IUCrJ, 2022, 9(1), 146–162.
45. **Matveychuk Y. V., Bartashevich E. V., & Tsirelson V. G.** How the H-bond layout determines mechanical properties of crystalline amino acid hydrogen maleates // Crystal Growth & Design, 2018, 18(6), 3366-3375.
46. **Bogdanov N. E., Korabel'nikov D. V., Fedorov I. A., Zakharov B. A., & Boldyreva E. V.** The effect of hydrostatic compression on the crystal structure of glycinium phosphate // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2022, 78(5), 756-762.
47. **Isono T., Kamo H., Ueda A., Takahashi K., Nakao A., Kumai R., Nakao H., Kobayashi K., Murakami Y., Mori H.** Hydrogen bond-promoted metallic state in a purely organic single-component conductor under pressure // Nature Communications, 2013, 4(1), 1344.
48. **Tse J. S., & Boldyreva E. V.** Electron density topology of crystalline solids at high pressure // Modern Charge-Density Analysis, 2012, Springer, Dordrecht, pp. 573–623;
49. **Korabel'nikov D. V., & Zhuravlev Y. N.** Semi-empirical and ab initio calculations for crystals under pressure at fixed temperatures: The case of guanidinium perchlorate. *RSC Advances*, 2020, *10*(69), 42204–42211.
50. **Boldyreva E.** Glycine: The gift that keeps on giving // Israel Journal of Chemistry, 2021, 61(11-12), 828–850.
51. **Iitaka Y.** The crystal structure of β-glycine // Acta Crystallographica, 1960, 13(1), 35–45.
52. **Iitaka Y.** The crystal structure of γ-glycine // Acta Crystallographica, 1961, 14(1), 1–10.
53. **Heredia A., Meunier V., Bdikin I. K., Gracio J., Balke N., Jesse S., Tselev A., Agarwal P. K., Sumpter B. G., Kalinin S. v., & Kholkin A. L.** Nanoscale Ferroelectricity in Crystalline γ-Glycine // Advanced Functional Materials, 2012, 22(14), 2996–3003.
54. **Guerin S., Stapleton A., Chovan D., Mouras R., Gleeson M., McKeown C., Noor M. R., Silien C., Rhen F. M. F., Kholkin A. L., Liu N., Soulimane T., Tofail S. A. M., & Thompson D.** Control of piezoelectricity in amino acids by supramolecular packing. //Nature Materials, 2018, 17(2), 180–186.
55. **Murli C., Sharma S. M., Karmakar S. I., & Sikka S. K.** α-Glycine under high pressures: a Raman scattering study // Physica B: Condensed Matter, 2003, 339(1), 23–30.
56. **Болдырева Е. В., Ивашевская С. Н., Сова Г., Ахсбахс Г., & Вебер Г. П.** Действие высокого давления на кристаллический глицин: образование ранее не известной полиморфной модификации. // Доклады Академии наук, 2004, 396(3), 358–361.
57. **Boldyreva E. V., Ivashevskaya S. N., Sowa H., Ahsbahs H., & Weber,H. P.** Effect of hydrostatic pressure on the γ-polymorph of glycine. A polymorphic transition into a new δ-form // Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2005, 220(1), 50–57.
58. **Goryainov S. V., Boldyreva E. V., & Kolesnik E. N.** Raman observation of a new (ζ) polymorph of glycine? // Chemical Physics Letters, 2006, 419(4–6), 496–500.
59. **Bull C. L., Flowitt-Hill G., De Gironcoli S., Küçükbenli E., Parsons S., Pham C. H., Playford H. Y., Tucker M. G.** ζ-Glycine: insight into the mechanism of a polymorphic phase transition // IUCrJ, 2017, 4(5), 569–574.

60. **Goryainov S. V., Kolesnik E. N., & Boldyreva E. V.** A reversible pressure-induced phase transition in β-glycine at 0.76 GPa // Physica B: Condensed Matter, 2005, 357(3–4), 340–347.
61. **Tumanov N. A., Boldyreva E. V., & Ahsbahs H.** Structure solution and refinement from powder or single-crystal diffraction data? Pros and cons: An example of the high-pressure β′-polymorph of glycine // Powder Diffraction, 2008, 23(4), 307–316.
62. **Freeman C.** The structure and energetics of glycine polymorphs based on first principles simulation using density functional theory // Chemical Communications, 1998, (22), 2455–2456.
63. **Rodríguez J. S., Costa G., Da Silva M. B., Silva B. P., Honório L. J., de Lima-Neto Santos R. R., Caentano E. S., Alves H. L., Freire V. N.** Structural and optoelectronic properties of the α-, β-, and γ-glycine polymorphs and the glycine dihydrate crystal: a DFT study // Crystal Growth & Design, 2019, 19(9), 5204–5217.
64. **Xavier Jr N. F., da Silva Jr. A. M., & Bauerfeldt G. F.** What Rules the Relative Stability of α-, β-, and γ-Glycine Polymorphs? // Crystal Growth & Design, 2020, 20(7), 4695–4706.
65. **Guerra D., Gomez L. A., Restrepo A., & David J.** New stable phases of glycine crystals // Chemical Physics, 2020, 530, 110645.
66. **Marom N., DiStasio Jr. R. A., Atalla V., Levchenko S., Reilly A. M., Chelikowsky J. R., Leiserowitz L., Tkatchenk, A.** Many-body dispersion interactions in molecular crystal polymorphism // Angewandte Chemie International Edition, 2013, 52(26), 6629–6632.
67. **Flores M. Z. S., Freire V. N., Dos Santos R. P., Farias G. A., Caetano E. W. S., De Oliveira M. C. F., Fernandez J. R. L., Scolfaro L. M. R., Bezzera M. J. B., Oliveira T. M., Bezzera G. A., Cavada B. S., Alves H. L.** Optical absorption and electronic band structure first-principles calculations of α-glycine crystals // Physical Review B, 2008, 77(11), 115104.
68. **Behzadi H., Hadipour N. L., & Mirzaei M.** A density functional study of 17O, 14N and 2H electric field gradient tensors in the real crystalline structure of α-glycine // Biophysical Chemistry, 2007 125(1), 179–183.
69. **Seyedhosseini E., Bdikin I., Ivanov M., Vasileva D., Kudryavtsev A., Rodriguez B. J., & Kholkin A. L.** Tip-induced domain structures and polarization switching in ferroelectric amino acid glycine // Journal of Applied Physics, 2015, 118(7), 072008.
70. **Lund A. M., Pagola G. I., Orendt A. M., Ferraro M. B., & Facelli J. C.** Crystal structure prediction from first principles: The crystal structures of glycine // Chemical Physics Letters, 2015, 626, 20–24.
71. **Stievano L., Tielens F., Lopes I., Folliet N., Gervais C., Costa D., & Lambert J. F.** Density Functional Theory modeling and calculation of NMR parameters: An ab initio study of the polymorphs of bulk glycine // Crystal Growth & Design, 2010, 10(8), 3657-3667.
72. **Moggach S. A., Marshall W. G., Rogers D. M., & Parsons S.** How focussing on hydrogen bonding interactions in amino acids can miss the bigger picture: a high-pressure neutron powder diffraction study of ε-glycine // CrystEngComm, 2015,17(28), 5315–5328.
73. **Szeleszczuk Ł., Pisklak D. M., & Zielińska-Pisklak M.** Can we predict the structure and stability of molecular crystals under increased pressure? First-principles study of glycine phase transitions. Journal of Computational Chemistry // 2018, 39(19), 1300–1306.
74. **Hinton J. K., Clarke S. M., Steele B. A., Kuo I. F. W., Greenberg E., Prakapenka V. B., Kunz M., Kroonblawd M. P., Stavrou E.** Effects of pressure on the structure and lattice dynamics of α-glycine: a combined experimental and theoretical study // CrystEngComm, 2019, 21(30), 4457-4464.
75. **Mei A., & Luo X.** The structural, electronic and optical properties of γ-glycine under pressure: a first principles study // RSC Advances, 2019, 9(7), 3877–3883.
76. **Chisholm J. A., Motherwell S., Tulip P. R., Parsons S., & Clark S. J.** An ab initio study of observed and hypothetical polymorphs of glycine // Crystal Growth & Design, 2005, 5(4), 1437–1442.

77. **Guerin S., Syed T. A. M., & Thompson D.** Deconstructing collagen piezoelectricity using alanine-hydroxyproline-glycine building blocks // Nanoscale, 2018 10(20), 9653–9663.
78. **Guerin S., Khorasani S., Gleeson M., O'Donnell J., Sanii R., Zwane R., Reilly A., Silien C., Tofail S., Liu N., Zaworotko M., Thompson D.** A piezoelectric ionic cocrystal of glycine and sulfamic acid // Crystal Growth & Design, 2021, 21(10), 5818–5827.
79. **Adamo C., & Barone V.** Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The PBE0 model // Journal of Chemical Physics, 1999, 110(13), 6158–6170.
80. **Pascale F., d'Arco P., Silvio Gentile F., & Dovesi R.** Strategies for the optimization of the structure of crystalline compounds // Journal of Computational Chemistry, 2022, 43(3), 184–196.
81. **Grimme S., Antony J., Schwabe T., & Mück-Lichtenfeld C.** Density functional theory with dispersion corrections for supramolecular structures, aggregates, and complexes of (bio) organic molecules // Organic & Biomolecular Chemistry, 2007 5(5), 741–758.
82. **Hill R.** The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. Proc. Phys. Soc., London, Sect. A 1952, 65, 349−354.
83. **Reuss A.** Calculation of the flow limits of mixed crystals on the basis of the plasticity of monocrystals. // Zeitschrift fuer Angewandte Mathematik Mechanik, 1929, 9, 49–58.
84. **Gaillac R., Pullumbi P., & Coudert F. X.** ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors // Journal of Physics: Condensed Matter, 2016, 28(27), 275201.
85. **Boldyreva E. V., Drebushchak T. N., & Shutova E. S.** Structural distortion of the α, β, and γ polymorphs of glycine on cooling // Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2003, 218(5), 366–376
86. **Kiely E., Zwane R., Fox R., Reilly A. M., & Guerin S.** Density functional theory predictions of the mechanical properties of crystalline materials // CrystEngComm, 2021, 23(34), 5697–5710.
87. **Azuri I., Meirzadeh E., Ehre D., Cohen S., Rappe A., Lahav M., Lubomirsky I., Kronik L.** Unusually large Young's moduli of amino acid molecular crystals // Angewandte Chemie International Edition, 2015, 54(46), 13566–13570.
88. **Hamilton W. C.** Hydrogen bonding in solids. Methods of Molecular Structure Determination // Frontiers in Chemistry, 1968.
89. **Housecroft C. E., & Sharpe A. G.** Inorganic chemistry, 2008, (Vol. 1). Pearson Education.
90. **Bader R. F. W.** Atoms in Molecules: a Quantum Theory // Clarendon Press, Oxford, 1990.
91. **Vener M. V., Egorova A. N., Churakov A. V., & Tsirelson V. G.** Intermolecular hydrogen bond energies in crystals evaluated using electron density properties: DFT computations with periodic boundary conditions // Journal of Computational Chemistry, 2012, 33(29), 2303–2309.
92. **Vener M. V., Levina E. O., Astakhov A. A., & Tsirelson V. G.** Specific features of the extra strong intermolecular hydrogen bonds in crystals: Insights from the theoretical charge density analysis // Chemical Physics Letters, 2015, 638, 233–236.
93. **Zakharov B. A., & Boldyreva E. V.** A high-pressure single-crystal to single-crystal phase transition in DL-alaninium semi-oxalate monohydrate with switching-over hydrogen bonds // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2013, 69(3), 271–280.
94. **Ландау Л. Д.; Лифшиц Е. М.** Теория упругости Т.7 // ФИЗМАТЛИТ, 2007, 9–25.
95. **Tao J., Vignale G., & Tokatly I. V.** Quantum stress focusing in descriptive chemistry // Physical Review Letters, 2008, 100(20), 206405.
96. **Tsirelson V. G., Stash A. I., & Tokatly I. V.** Bonding in molecular crystals from the local electronic pressure viewpoint // Molecular Physics, 2016, 114(7–8), 1260–1269.
97. **Rogers C. L., & Rappe A. M.** Geometric formulation of quantum stress fields // Physical Review B, 2002, 65(22), 224117.

98. **Tokatly I. V.** Quantum many-body dynamics in a Lagrangian frame: I. Equations of motion and conservation laws // Physical Review B, 2002, 71(16), 165104.
99. **Becke A. D.** Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // Physical Review A, 1988, 38(6), 3098.
100. **Wesolowski T. A., & Wang Y. A.** Recent progress in orbital-free density functional theory // World Scientific, 2013, 147–150.
101. **Киржниц Д. А.** Квантовые поправки к уравнению Томаса–Ферми // ЖЭТФ, 1957, 32(1), 115–123.
102. **Най Дж.** Физические свойства кристаллов. М.: Иностранная литература, 1960, С. 161–164.

References

1. **Tsirelson V.** Early days of quantum crystallography: a personal account // Journal of Computational Chemistry. 2018. Vol. 39(17). P. 1029–1037.
2. **Tsirelson V., & Stash A.** Orbital-free quantum crystallography: view on forces in crystals // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2020, 76(5). 769–778.
3. **Genoni A., & Macchi P.** Quantum crystallography in the last decade: developments and outlooks // Crystals, 2020, 10(6), 473.
4. **Grabowsky S., Genoni A., Thomas S. P., & Jayatilaka D.** The advent of quantum crystallography: form and structure factors from quantum mechanics for advanced structure refinement and wavefunction fitting // 21stCentury Challenges in Chemical Crystallography II: Structural Correlations and Data Interpretation, 2020. 65–144.
5. **Grabowsky S., Genoni A., & Bürgi H. B.** Quantum crystallography // Chemical Science, 2017. 8(6), 4159-4176.
6. **Kartashov S. V., Shteingolts S. A., Stash A. I., Tsirelson V. G., & Fayzullin R. R.** Electronic and Crystal Packing Effects in Terms of Static and Kinetic Force Field Features: Picolinic Acid N-Oxide and Methimazole // Crystal Growth & Design, 2023, 23(3), 1726-1742.
7. **Riffet V., Labet V., & Contreras-García J.** A topological study of chemical bonds under pressure: solid hydrogen as a model case // Physical Chemistry Chemical Physics, 2017 19(38), 26381-26395.
8. **Evarestov R. A., & Kuzmin A.** Topological analysis of chemical bonding in the layered FePSe3 upon pressure-induced phase transitions // Journal of Computational Chemistry, 2020, 41(31), 2610-2623.
9. **Tsirelson V. G., Stash A. I., & Tokatly I. V.** Quantum pressure focusing in solids: a reconstruction from experimental electron density // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2019, 75(2), 201-209.
10. **Zhurova E. A., Tsirelson V. G., Zhurov V. V., Stash A. I., & Pinkerton A. A.** Chemical bonding in pentaerythritol at very low temperature or at high pressure: an experimental and theoretical study // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, 2006, 62(3), 513-520.
11. **Matveychuk Y. V., Bartashevich E. V., Skalyova K. K., & Tsirelson V. G.** Quantum electronic pressure and crystal compressibility for magnesium diboride under simulated compression // Materials Today Communications, 2021, 26, 101952.
12. **Bartashevich E. V., Sobalev S. A., Matveychuk Y. V., Tsirelson V. G.** Simulation of the compressibility of isostructural halogen containing crystals on macro-and microlevels // Journal of Structural Chemistry, 2021, 62, 1607-1620;.
13. **Bartashevich E., Sobalev S., Matveychuk Y., & Tsirelson V.** Variations of quantum electronic pressure under the external compression in crystals with halogen bonds assembled in Cl3-, Br3-, I3- synthons // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2021, 76(4), 514-523.

14. **Coudert F. X., & Fuchs A. H.** Computational characterization and prediction of metal–organic framework properties // Coordination Chemistry Reviews, 2016, 307, 211-236.
15. **Zhou X., Feng Z., Zhu L., Xu J., Miyagi L., Dong H., Sheng H., Wang Y., Li Q., Ma Y., Zhang H., Yan J., Tamura N., Kunz M., Lutker K., Huang T., Hughes D., Huang X., Chen, B.** High-pressure strengthening in ultrafine-grained metals // Nature, 2020, 579(7797), 67-72.
16. **Guerin S., Tofail S. A., & Thompson D.** Organic piezoelectric materials: milestones and potential // NPG Asia Materials, 2019, 11(1), 10.
17. **Shin D. M., Hong S. W., & Hwang Y. H.** Recent advances in organic piezoelectric biomaterials for energy and biomedical applications // Nanomaterials, 2020, 10(1), 123.
18. **Vijayakanth T., Liptrot D. J., Gazit E., Boomishankar R., & Bowen C. R.** Recent advances in organic and organic–inorganic hybrid materials for piezoelectric mechanical energy harvesting // Advanced Functional Materials, 2022, 32(17), 2109492.
19. **Naumov P., Chizhik S., Panda M. K., Nath N. K., & Boldyreva E.** Mechanically responsive molecular crystals // Chemical Reviews, 2015, 115(22), 12440-12490.
20. **Koshima H., Hasebe S., Hagiwara Y., & Asahi T.** Mechanically Responsive Organic Crystals by Light // Israel Journal of Chemistry, 2021, 61(11-12), 683-696.
21. **Colin-Molina A., Karothu D. P., Jellen M. J., Toscano R. A., Garcia-Garibay M. A., Naumov P., & Rodríguez-Molina B.** Thermosalient amphidynamic molecular machines: Motion at the molecular and macroscopic scales // Matter, 2019 1(4), 1033-1046.
22. **Naumov P., Chizhik S., Commins P., & Boldyreva E.** Bending, Jumping, and Self-Healing Crystals // Mechanically Responsive Materials for Soft Robotics, 2020 105-138.
23. **Desiraju G. R. & Steiner T.** The Weak Hydrogen Bond: In Structural Chemistry and Biology // Oxford University Press, 2001.
24. **Jeffrey G. A.** An introduction to hydrogen bonding // New York: Oxford university press, 1997, vol.12, 228.
25. **Dougherty R. C.** Temperature and pressure dependence of hydrogen bond strength: A perturbation molecular orbital approach // The Journal of Chemical Physics, 1998 109(17), 7372-7378.
26. **Sikka S. K., & Sharma S. M.** The hydrogen bond under pressure // Phase Transitions, 2008, 81(10), 907-934.
27. **Moon S. H., & Drickamer H. G.** Effect of pressure on hydrogen bonds on organic solids // The Journal of Chemical Physics, 1974, 61(1), 48-54.
28. **Malaspina L. A., Genoni A., Jayatilaka D., Turner M. J., Sugimoto K., Nishibori E., & Grabowsky S.** The advanced treatment of hydrogen bonding in quantum crystallography // Journal of Applied Crystallography, 2021, 54(3), 718-729.
29. **Shteingolts S. A., Stash A. I., Tsirelson V. G., & Fayzullin R. R.** Orbital-Free Quantum Crystallographic View on Noncovalent Bonding: Insights into Hydrogen Bonds, $\pi\cdots\pi$ and Reverse Electron Lone Pair$\cdots\pi$ Interactions // Chemistry–A European Journal, 2021, 27(28), 7789-7809.
30. **Saunders L. K., Pallipurath A. R., Gutmann M. J., Nowell H., Zhang N., & Allan D. R.** A quantum crystallographic approach to short hydrogen bonds // CrystEngComm, 2021, 23(35), 6180-6190.
31. **Grabowsky S., Genoni A., & Bürgi H. B.** Quantum crystallography // Chemical Science, 2017, 8(6), 4159-4176.
32. **Tsirelson V., & Stash A.** Developing orbital-free quantum crystallography: the local potentials and associated partial charge densities // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2021, 77(4), 467-477.
33. **Katrusiak A.** High-Pressure X-ray Diffraction Studies on Organic Crystals // Crystal Research and Technology, 1991, 26(5), 523-531.

34. **Boldyreva E. V.** High-pressure studies of the hydrogen bond networks in molecular crystals // Journal of Molecular Structure, 2004, 700(1-3), 151-155.
35. **Katrusiak A.** Macroscopic and structural effects of hydrogen-bond transformations // Crystallography Reviews, 1996, 5(2), 133-175.
36. **Katrusiak A.** Macroscopic and structural effects of hydrogen-bond transformations: some recent directions // Crystallography Reviews, 2003, 9(2-3), 87-89.
37. **Katrusiak A., & Szafrański M.** Ferroelectricity in NH⋯N hydrogen bonded crystals // Physical Review Letters, 1999, 82(3), 576.
38. **Boldyreva E. V.** High-pressure studies of the anisotropy of structural distortion of molecular crystals // Journal of Molecular Structure, 2003 647(1-3), 159-179.
39. **Zakharov B. A., & Boldyreva E. V.** High pressure: a complementary tool for probing solid-state processes // CrystEngComm, 2019. 21(1), 10-22.
40. **Rychkov D. A., Stare J., & Boldyreva E. V.** Pressure-driven phase transition mechanisms revealed by quantum chemistry: L-serine polymorphs // Physical Chemistry Chemical Physics, 2017, 19(9), 6671-6676.
41. **Fedorov I. A., Korabelnikov D. V.** Ab initio study of the compressibility and electronic properties of crystalline purine // Journal of Structural Chemistry, 2022, 63(10), 1670-1677; (in russ.)
42. **Milašinović V., Molćanov K., Krawczuk A., Bogdanov N. E., Zakharov B. A., Boldyreva E. V., Jelsch C., Kojić-Prodić B.** Charge density studies of multicentre two-electron bonding of an anion radical at non-ambient temperature and pressure // IUCrJ, 2021, 8(4), 644-654.
43. **Bruce-Smith I. F., Zakharov B. A., Stare J., Boldyreva E. V., & Pulham C. R.** Structural properties of nickel dimethylglyoxime at high pressure: single-crystal X-ray diffraction and DFT studies // Journal of Physical Chemistry C, 2014, 118(42), 24705-24713.
44. **Gajda R., Zhang D., Parafiniuk J., Dera P., & Woźniak K.** Tracing electron density changes in langbeinite under pressure // IUCrJ, 2022, 9(1), 146-162.
45. **Matveychuk Y. V., Bartashevich E. V., & Tsirelson V. G.** How the H-bond layout determines mechanical properties of crystalline amino acid hydrogen maleates // Crystal Growth & Design, 2018, 18(6), 3366-3375.
46. **Bogdanov N. E., Korabel'nikov D. V., Fedorov I. A., Zakharov B. A., & Boldyreva E. V.** The effect of hydrostatic compression on the crystal structure of glycinium phosphate // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2022, 78(5), 756-762.
47. **Isono T., Kamo H., Ueda A., Takahashi K., Nakao A., Kumai R., Nakao H., Kobayashi K., Murakami Y., Mori H.** Hydrogen bond-promoted metallic state in a purely organic single-component conductor under pressure // Nature Communications, 2013, 4(1), 1344.
48. **Tse J. S., & Boldyreva E. V.** Electron density topology of crystalline solids at high pressure // Modern Charge-Density Analysis, 2012, Springer, Dordrecht, pp. 573-623;
49. **Korabel'nikov D. V., & Zhuravlev Y. N.** Semi-empirical and ab initio calculations for crystals under pressure at fixed temperatures: The case of guanidinium perchlorate. *RSC Advances*, 2020, *10*(69), 42204-42211.
50. **Boldyreva E.** Glycine: The gift that keeps on giving // Israel Journal of Chemistry, 2021, 61(11-12), 828-850.
51. **Iitaka Y.** The crystal structure of β-glycine // Acta Crystallographica, 1960, 13(1), 35-45.
52. **Iitaka Y.** The crystal structure of γ-glycine // Acta Crystallographica, 1961, 14(1), 1-10.
53. **Heredia A., Meunier V., Bdikin I. K., Gracio J., Balke N., Jesse S., Tselev A., Agarwal P. K., Sumpter B. G., Kalinin S. v., & Kholkin A. L.** Nanoscale Ferroelectricity in Crystalline γ-Glycine // Advanced Functional Materials, 2012, 22(14), 2996–3003.
54. **Guerin S., Stapleton A., Chovan D., Mouras R., Gleeson M., McKeown C., Noor M. R., Silien C., Rhen F. M. F., Kholkin A. L., Liu N., Soulimane T., Tofail S. A. M., & Thompson D.**

Control of piezoelectricity in amino acids by supramolecular packing. //Nature Materials, 2018, 17(2), 180–186.

55. **Murli C., Sharma S. M., Karmakar S. I., & Sikka S. K.** α-Glycine under high pressures: a Raman scattering study // Physica B: Condensed Matter, 2003, 339(1), 23-30.
56. **Boldyreva E. V., Ivashevskaya S. N., Sowa H., Ahsbahs H., Weber H. P.** Effect of high pressure on crystalline glycine: A new high-pressure polymorph // Doklady Physical Chemistry, 2004, vol. 396, pp. 111-114;
57. **Boldyreva E. V., Ivashevskaya S. N., Sowa H., Ahsbahs H., & Weber,H. P.** Effect of hydrostatic pressure on the γ-polymorph of glycine. A polymorphic transition into a new δ-form // Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2005, 220(1), 50-57.
58. **Goryainov S. V., Boldyreva E. V., & Kolesnik E. N.** Raman observation of a new (ζ) polymorph of glycine? // Chemical Physics Letters, 2006, 419(4-6), 496-500.
59. **Bull C. L., Flowitt-Hill G., De Gironcoli S., Küçükbenli E., Parsons S., Pham C. H., Playford H. Y., Tucker M. G.** ζ-Glycine: insight into the mechanism of a polymorphic phase transition // IUCrJ, 2017, 4(5), 569-574.
60. **Goryainov S. V., Kolesnik E. N., & Boldyreva E. V.** A reversible pressure-induced phase transition in β-glycine at 0.76 GPa // Physica B: Condensed Matter, 2005, 357(3-4), 340-347.
61. **Tumanov N. A., Boldyreva E. V., & Ahsbahs H.** Structure solution and refinement from powder or single-crystal diffraction data? Pros and cons: An example of the high-pressure β′-polymorph of glycine // Powder Diffraction, 2008, 23(4), 307-316.
62. **Freeman C.** The structure and energetics of glycine polymorphs based on first principles simulation using density functional theory // Chemical Communications, 1998, (22), 2455-2456.
63. **Rodríguez J. S., Costa G., Da Silva M. B., Silva B. P., Honório L. J., de Lima-Neto Santos R. R., Caentano E. S., Alves H. L., Freire V. N.** Structural and optoelectronic properties of the α-, β-, and γ-glycine polymorphs and the glycine dihydrate crystal: a DFT study // Crystal Growth & Design, 2019, 19(9), 5204-5217.
64. **Xavier Jr N. F., da Silva Jr. A. M., & Bauerfeldt G. F.** What Rules the Relative Stability of α-, β-, and γ-Glycine Polymorphs? // Crystal Growth & Design, 2020, 20(7), 4695-4706.
65. **Guerra D., Gomez L. A., Restrepo A., & David J.** New stable phases of glycine crystals // Chemical Physics, 2020, 530, 110645.
66. **Marom N., DiStasio Jr. R. A., Atalla V., Levchenko S., Reilly A. M., Chelikowsky J. R., Leiserowitz L., Tkatchenk, A.** Many-body dispersion interactions in molecular crystal polymorphism // Angewandte Chemie International Edition, 2013, 52(26), 6629-6632.
67. **Flores M. Z. S., Freire V. N., Dos Santos R. P., Farias G. A., Caetano E. W. S., De Oliveira M. C. F., Fernandez J. R. L., Scolfaro L. M. R., Bezzera M. J. B., Oliveira T. M., Bezzera G. A., Cavada B. S., Alves H. L.** Optical absorption and electronic band structure first-principles calculations of α-glycine crystals // Physical Review B, 2008, 77(11), 115104.
68. **Behzadi H., Hadipour N. L., & Mirzaei M.** A density functional study of 17O, 14N and 2H electric field gradient tensors in the real crystalline structure of α-glycine // Biophysical Chemistry, 2007 125(1), 179-183.
69. **Seyedhosseini E., Bdikin I., Ivanov M., Vasileva D., Kudryavtsev A., Rodriguez B. J., & Kholkin A. L.** Tip-induced domain structures and polarization switching in ferroelectric amino acid glycine // Journal of Applied Physics, 2015, 118(7), 072008.
70. **Lund A. M., Pagola G. I., Orendt A. M., Ferraro M. B., & Facelli J. C.** Crystal structure prediction from first principles: The crystal structures of glycine // Chemical Physics Letters, 2015, 626, 20-24.
71. **Stievano L., Tielens F., Lopes I., Folliet N., Gervais C., Costa D., & Lambert J. F.** Density Functional Theory modeling and calculation of NMR parameters: An ab initio study of the polymorphs of bulk glycine // Crystal Growth & Design, 2010, 10(8), 3657-3667.

72. **Moggach S. A., Marshall W. G., Rogers D. M., & Parsons S.** How focussing on hydrogen bonding interactions in amino acids can miss the bigger picture: a high-pressure neutron powder diffraction study of ε-glycine // CrystEngComm, 2015,17(28), 5315-5328.
73. **Szeleszczuk Ł., Pisklak D. M., & Zielińska-Pisklak M.** Can we predict the structure and stability of molecular crystals under increased pressure? First-principles study of glycine phase transitions. Journal of Computational Chemistry // 2018, 39(19), 1300-1306.
74. **Hinton J. K., Clarke S. M., Steele B. A., Kuo I. F. W., Greenberg E., Prakapenka V. B., Kunz M., Kroonblawd M. P., Stavrou E.** Effects of pressure on the structure and lattice dynamics of α-glycine: a combined experimental and theoretical study // CrystEngComm, 2019, 21(30), 4457-4464.
75. **Mei A., & Luo X.** The structural, electronic and optical properties of γ-glycine under pressure: a first principles study // RSC Advances, 2019, 9(7), 3877-3883.
76. **Chisholm J. A., Motherwell S., Tulip P. R., Parsons S., & Clark S. J.** An ab initio study of observed and hypothetical polymorphs of glycine // Crystal Growth & Design, 2005, 5(4), 1437-1442.
77. **Guerin S., Syed T. A. M., & Thompson D.** Deconstructing collagen piezoelectricity using alanine-hydroxyproline-glycine building blocks // Nanoscale, 2018 10(20), 9653–9663.
78. **Guerin S., Khorasani S., Gleeson M., O'Donnell J., Sanii R., Zwane R., Reilly A., Silien C., Tofail S., Liu N., Zaworotko M., Thompson D.** A piezoelectric ionic cocrystal of glycine and sulfamic acid // Crystal Growth & Design, 2021, 21(10), 5818-5827.
79. **Adamo C., & Barone V.** Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The PBE0 model // Journal of Chemical Physics, 1999, 110(13), 6158-6170.
80. **Pascale F., d'Arco P., Silvio Gentile F., & Dovesi R.** Strategies for the optimization of the structure of crystalline compounds // Journal of Computational Chemistry, 2022, 43(3), 184-196.
81. **Grimme S., Antony J., Schwabe T., & Mück-Lichtenfeld C.** Density functional theory with dispersion corrections for supramolecular structures, aggregates, and complexes of (bio) organic molecules // Organic & Biomolecular Chemistry, 2007 5(5), 741-758.
82. **Hill R.** The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. Proc. Phys. Soc., London, Sect. A 1952, 65, 349−354.
83. **Reuss A.** Calculation of the flow limits of mixed crystals on the basis of the plasticity of monocrystals. // Zeitschrift fuer Angewandte Mathematik Mechanik, 1929, 9, 49-58.
84. **Gaillac R., Pullumbi P., & Coudert F. X.** ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors // Journal of Physics: Condensed Matter, 2016, 28(27), 275201.
85. **Boldyreva E. V., Drebushchak T. N., & Shutova E. S.** Structural distortion of the α, β, and γ polymorphs of glycine on cooling // Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 2003, 218(5), 366-376
86. **Kiely E., Zwane R., Fox R., Reilly A. M., & Guerin S.** Density functional theory predictions of the mechanical properties of crystalline materials // CrystEngComm, 2021, 23(34), 5697–5710.
87. **Azuri I., Meirzadeh E., Ehre D., Cohen S., Rappe A., Lahav M., Lubomirsky I., Kronik L.** Unusually large Young's moduli of amino acid molecular crystals // Angewandte Chemie International Edition, 2015, 54(46), 13566–13570.
88. **Hamilton W. C.** Hydrogen bonding in solids. Methods of Molecular Structure Determination // Frontiers in Chemistry, 1968.
89. **Housecroft C. E., & Sharpe A. G.** Inorganic chemistry, 2008, (Vol. 1). Pearson Education.
90. **Bader R. F. W.** Atoms in Molecules: a Quantum Theory // Clarendon Press, Oxford, 1990.
91. **Vener M. V., Egorova A. N., Churakov A. V., & Tsirelson V. G.** Intermolecular hydrogen bond energies in crystals evaluated using electron density properties: DFT computations with periodic boundary conditions // Journal of Computational Chemistry, 2012, 33(29), 2303-2309.

92. **Vener M. V., Levina E. O., Astakhov A. A., & Tsirelson V. G.** Specific features of the extra strong intermolecular hydrogen bonds in crystals: Insights from the theoretical charge density analysis // Chemical Physics Letters, 2015, 638, 233-236.
93. **Zakharov B. A., & Boldyreva E. V.** A high-pressure single-crystal to single-crystal phase transition in DL-alaninium semi-oxalate monohydrate with switching-over hydrogen bonds // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 2013, 69(3), 271-280.
94. **L. D. Landau, Lifshitz E. M.,** A Course of Theoretical Physics. Theory of Elasticity, Vol. 7, 3rd ed. Butterworth Heinemann, Oxford, 1986, 19-24;
95. **Tao J., Vignale G., Tokatly I. V.** Quantum stress focusing in descriptive chemistry // Physical Review Letters, 2008, 100(20), 206405;
96. **Tsirelson V. G., Stash A. I., Tokatly I. V.** Bonding in molecular crystals from the local electronic pressure viewpoint // Molecular Physics, 2016, 114(7-8), 1260-1269;
97. **Rogers C. L., Rappe A. M.** Geometric formulation of quantum stress fields //Physical Review B, 2002, 65(22), 224117;
98. **Tokatly I. V.** Quantum many-body dynamics in a Lagrangian frame: I. Equations of motion and conservation laws // Physical Review B, 2002, 71(16), 165104;
99. **Becke A. D.** Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior// Physical Review A, 1988, 38(6), 3098;
100. **Wesolowski T. A., Wang Y. A.** Recent progress in orbital-free density functional theory // World Scientific, 2013, 147-150;
101. **Kirzhnits D. A.** Quantum corrections to the Thomas-Fermi equation // Soviet Phys. JETP, 1957, 5, 64–72;
102. **Nye J. F.** Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices. Oxford University Press,1985

Информация об авторах

Хайновский Марк Андреевич, студент

Болдырева Елена Владимировна, доктор химических наук

Цирельсон Владимир Григорьевич, доктор физико-математических наук

Information about the Authors

Mark A, Khainovsky, master student
Elena V. Boldyreva, doctor of chemical sciences
Vladimir G. Tsirelson, doctor of physical and mathematical sciences

Статья поступила в редакцию 02.04.2023; одобрена после рецензирования 10.04.2022; принята к публикации 10.04.2022

The article was submitted 02.04.2023; approved after reviewing 10.04.2022; accepted for publication 10.04.2022

Информация для авторов

«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, аффиляция, 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, ФИО авторов (полностью), 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

Иван Иванович Иванов

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук
Новосибирск, Россия
ivan@academ.org, https://orcid.org/xxxx-xxxx-xxxx-xxxx

Аннотация
Ключевые слова
Благодарности

Evaluation of Convective Mass Transfer

Ivan I. Ivanov

Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics
of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
Novosibirsk, Russian Federation
ivan@academ.org, https://orcid.org/xxxx-xxxx-xxxx-xxxx

Abstract
Keywords
Acknowledgements

Основной текст статьи

Список литературы / References (в порядке цитирования)

Сведения об авторе / Information about the Author

Иванов Иван Иванович, доктор физико-математических наук, профессор
Ivan I. Ivanov, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Professor
WoS Researcher ID
Scopus Author ID
SPIN

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 (Cyr), 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.

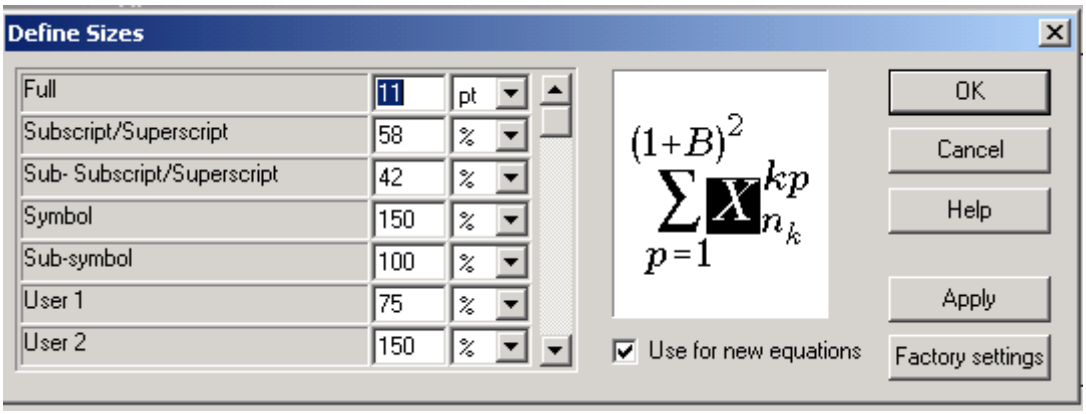
9. Число рисунков должно быть логически оправданным, качество – высоким. Файлы изображений должны находиться в том же каталоге, что и основной документ и иметь имена, соответствующие номерам рисунков в рукописи (например, 09.tif или 22a.jpg).

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...

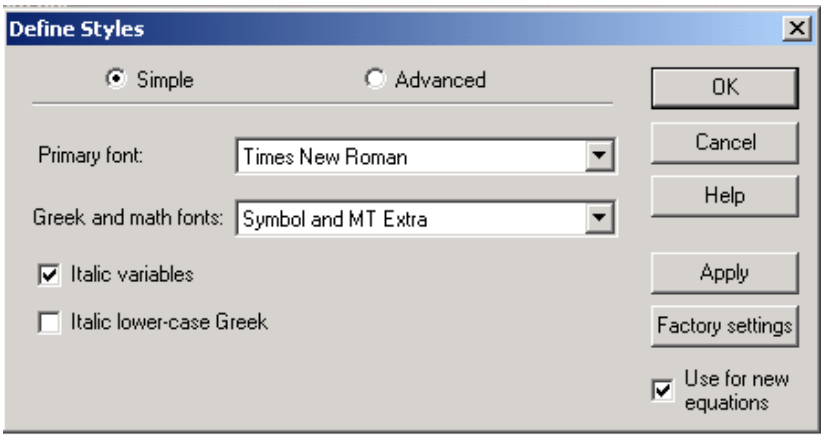
11. Формулы набираются в редакторе формул Microsoft Equation MathType в подбор к тексту или отдельной строкой по центру, **кегль 11 пт**.

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