

Том 13, номер 1

ISSN 2304-487X

ЯНВАРЬ – ФЕВРАЛЬ 2024

<https://vestnikmephi.elpub.ru>

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»



Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА «МИФИ»

Том 13 № 1 2024 ЯНВАРЬ - ФЕВРАЛЬ

Основан в июле 2012 г.
Выходит 6 раз в год
ISSN: 2304-487X

Главный редактор
М.Н. Стриханов

Редакционная коллегия:

А.В. Аксёнов, Pavel Bedrikovetsky,
С.Г. Гаранин, Vladimir S. Gerjikov, Н.Н. Евтихийев,
Yalchin Efendiev, Alexei I. Zhurov, Н.П. Калашников, Н.И. Каргин, С.А. Кащенко,
Н.А. Кудряшов (*заместитель главного редактора*),
Raytcho Lazarov, О.В. Нагорнов, А.Д. Полянин,
В.В. Цегельник, Б.Н. Четверушкин,
М.А. Чмыхов (*ответственный секретарь*), William E. Schiesser

Выпускающий редактор: Н.В. Ермолаева

Адрес редакции: 115409, Москва, Каширское ш., 31,
Вестник НИЯУ МИФИ
Интернет: <https://vestnikmephi.elpub.ru>
Электронная почта: vestnik@mephi.ru

Москва
НИЯУ МИФИ

СОДЕРЖАНИЕ

Том 13, № 1, 2024

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА

- Выбор адекватного потенциала взаимодействия для описания плоскостного каналирования релятивистских частиц**
Н.П. Калашиников, А.С. Ольчак 3
- Квазипериодические осцилляции в разреженной высокотемпературной плазме, вызванные дисперсией акустических волн**
Д.Б. Бембитов, Н.К. Шивидов, Б.Б. Михальев 11
- Выбор адекватных потенциала и методов расчета квантовых состояний аксиально каналированных электронов при высоких энергиях**
Н.П. Калашиников, А.С. Ольчак 16
-

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

- Многомерный анализ данных в задаче прогнозирования попадания кредитных организаций в зону риска**
Е.П. Акишина, В.В. Иванов, А.В. Крянев, А.С. Приказчикова 22
- Особенности распространения аэрозольных частиц в техногенных условиях**
А.Р. Каримов, М.А. Соломатин 30
-

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

- Моделирование свойств переноса изотопов гелия и водорода методами термодинамики и молекулярной динамики**
Ю.А. Богданова, И.В. Маклашова, А.Д. Трофимова, А.А. Егоров 40
-

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

- Анализ ватт-амперных характеристик светодиодов, изготовленных из различных материалов**
А.Р. Расул, К.Н. Орлова 52

Contents

Volume 13 Number 1, 2024

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL PHYSICS

- Selection of an adequate interaction potential to describe plane channeling of relativistic particles**
N.P. Kalashnikov, A.S. Olchak 3
- Quasi-periodic oscillations in a rarefied high-temperature plasma caused by the dispersion of acoustic waves**
D.B. Bembitov, N.K. Shividov, B.B. Mikhalyaev 11
- Selecting adequate capacity and methods calculation of quantum states of axially channeled electrons at high energies**
N.P. Kalashnikov, A.S. Olchak 16
-

MATHEMATICAL MODELS AND NUMERICAL METHODS

- Multidimensional data analysis in the task of predicting the entry of credit institutions into the risk zone**
E.P. Akishina, V.V. Ivanov, A.V. Kryanev, A.S. Prikazchikova 22
- Peculiarities of distribution aerosol particles in anthropogenic conditions**
A.R. Karimov, M.A. Solomatin 30
-

COMPUTER SIMULATION OF PHYSICAL AND TECHNOLOGICAL PROCESSES

- Modelling of the transfer properties of helium and hydrogen isotopes by thermodynamics and molecular dynamics methods**
Yu.A. Bogdanova, I.V. Maklashova, A.D. Trofimova, A.A. Egorov 40
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

- Analysis of watt-ampere characteristics of leds made from various materials**
A.R. Rasul, K.N. Orlova 52

УДК.539.412, 539.1.09

ВЫБОР АДЕКВАТНОГО ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ

Н.П. Калашиников^{1,}, А.С. Ольчак^{1,**}*

¹*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,*

Москва, 115409, Россия

**e-mail: kalash@mephi.ru*

***e-mail: asolchak@mephi.ru*

Поступила в редакцию: 05.12.2023

После доработки: 07.12.2023

Принята к публикации: 26.12.2023

В работе рассматривается плоскостное каналирование релятивистских частиц в сопутствующей системе отсчета (ССО), движущейся со скоростью, равной продольной компоненте скорости каналированной частицы. В ССО движение частицы при плоскостном каналировании будет одномерным, причем для электронов и позитронов с энергиями до нескольких ГэВ оно будет нерелятивистским, как в атоме водорода. Показано, что основные характеристики квантовых состояний поперечного движения частиц при плоскостном каналировании слабо чувствительны к функциональной зависимости параметров усредненного потенциала от поперечных координат. Для определения основных характеристик такого движения предлагается использовать приближенные методы квантования Бора–Зоммерфельда, позволяющие сделать такой расчет аналитически. Приближенный метод расчета квантовых состояний можно расширить и применить для рассмотрения поперечного движения, выходящего за рамки нерелятивистского приближения даже в сопутствующей системе отсчета. Найдены распределения допустимых состояний поперечного финитного движения по энергиям для нескольких вариантов модельных потенциалов. Показано, что, несмотря на разницу в структуре энергетических уровней, средние расстояния между энергетическими уровнями практически нечувствительны к выбору модельного потенциала. Найдены энергии уровней поперечного движения для случая, когда нерелятивистское приближение не применимо даже в сопутствующей системе отсчета.

Ключевые слова: когерентное взаимодействие, каналирование, монокристалл, сопутствующая система отсчета, электромагнитное излучение, квантовая механика, гамма-излучение.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.311

EDN CODOPS

ВВЕДЕНИЕ

Исследования явления каналирования быстрых заряженных частиц при движении вдоль плотноупакованных атомных (ионных) плоскостей в монокристаллах, как теоретические, так и экспериментальные, ведутся уже более полувека и интерес к этому явлению не ослабевает. Суть явления каналирования заключается в том, что, двигаясь вдоль плотноупакованной плоскости атомов, быстрая частица воспринимает плотность электрических зарядов, составляющих эту плоскость, усредненно («размазано» вдоль направления быстрого движения). Размазанный непрерывно вдоль плоскости заряд создает непрерывный, гладкий усредненный потенциал, зависящий только от расстояния до середины атомной плоскости. Такой усредненный потенциал образует потенциальный канал, в котором поперечное каналу движение заря-

женной частицы может оказаться финитным (замкнутым в пределах канала), а квантовый спектр разрешенных энергетических состояний поперечного движения может быть дискретным.

Впервые идея возможности такого рода поперечно-финитного движения – каналирования быстрых заряженных частиц (протонов, электронов, ионов) в кристалле была высказана в пионерской работе Й. Линдхарда [1], который показал, что связанные состояния поперечного движения в усредненном потенциале атомных плоскостей могут реализоваться, если углы влета частиц в кристаллические каналы не превышают так называемого критического угла каналирования (угол Линдхарда):

$$\theta_L = (2U_0/E)^{1/2}, \quad (1)$$

где E – релятивистская энергия частицы; U_0 – эффективная глубина потенциального канала,

ВЫБОР АДЕКВАТНОГО ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ

по порядку величины составляющая несколько десятков электрон-вольт для большинства кристаллов и кристаллографических направлений.

Вскоре после публикации [1] эффект каналирования был успешно обнаружен экспериментально, наблюдались и сопутствующие радиационные эффекты [2–4]. В последующие годы для описания как самого явления каналирования, так и разнообразных сопутствующих ему эффектов (радиационных, магнитных и др.) теоретики опробовали все возможные подходы: классический, квантовый, квазиклассический, нерелятивистский, ультрарелятивистский и др.). Уже в 1980-е гг. было опубликовано несколько обзорных статей [5–15], обобщавших результаты первых десятилетий исследования эффекта. Исследования не прекращались и в последующие годы. Явление каналирования оказалось очень многообразным и богатым на существенно разные частные случаи и сопряженные эффекты. Особый интерес исследователей всегда привлекало каналирование легких частиц (электронов, позитронов) с высокими релятивистскими энергиями, для которых характерны выражено квантовый (дискретный) характер спектра состояний поперечного движения и высокая интенсивность жесткого электромагнитного излучения в рентгеновском и гамма-диапазонах, возникающего при переходах между этими состояниями поперечного движения.

Несмотря на многолетние теоретические исследования, многие аспекты возникающих при каналировании радиационных и других сопутствующих эффектов остаются до сих пор не ясны. В частности, математические сложности до сих пор не позволяли вполне разобраться с описанием движения и сопутствующего излучения гамма-квантов электронами сверхвысоких энергий (выше десяти ГэВ), когда поперечное движение электрона в канале становится релятивистским, а высокие частоты излучаемых квантов не позволяют применить к его описанию дипольное приближение. Схожая проблема – трудности при расчете характеристик состояний движения электронов в канале. В теоретических работах преобладают непрозрачные численные расчеты, не позволяющие выявить общие закономерности.

В недавней серии работ [16–18] авторы нашли подход, позволяющий уловить основные особенности и закономерности каналированного движения и сопутствующих эффектов, не прибегая к численному счету. Подход подразумевает сочетание взаимодополняющих прибли-

жений, и, прежде всего, рассмотрение поперечного движения релятивистских каналированных частиц в так называемой *сопутствующей системе отсчета* (ССО), движущейся со скоростью, равной продольной компоненте скорости каналированной частицы. В ССО движение частицы при плоскостном каналировании будет одномерным, причем для электронов и позитронов с энергиями до нескольких ГэВ оно будет нерелятивистским, как в атоме водорода. В ССО, по сути, электрон в канале – это тот же атом водорода, но:

- с пониженной размерностью (одномерный);
- с возможностью варьировать форму и глубину потенциала, подбирая по-разному ориентированные каналы в разных по составу кристаллах;
- с возможностью в широких пределах варьировать энергию электрона

E (в ССО играющую роль его релятивистской массы), определяющую число и значения энергий допустимых состояний поперечного движения.

Уникальность эффекта каналирования состоит еще и в том, что классический и квантовый, нерелятивистский и релятивистский подходы при теоретическом анализе *взаимно дополняют* друг друга. Их можно и нужно применять согласованно и совместно. Важно, что получать проверяемые количественные результаты удастся аналитически, оставаясь в пределах точности возможных измерений. Важно и то, что на каналированных частицах можно наблюдать все богатство эффектов традиционной атомной физики (дискретный спектр энергетических состояний, излучение при переходах между состояниями, разновероятное (прямое, инверсное) заселение состояний, магнитные эффекты и т.д.), но при релятивистских энергиях и с возможностью в широком диапазоне варьировать параметры исследуемых квазиатомных систем.

В настоящей работе авторы рассматривают именно финитное движение с дискретным спектром энергий электронов и/или позитронов в плоскостном канале, делая упор на до сих пор мало исследованном случае особенно больших энергий, при которых поперечное движение электрона в канале перестает быть нерелятивистским.

АЛГОРИТМ РАСЧЕТА УСРЕДНЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА ПРИ ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ И КВАНТОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВИЖЕНИЯ В СОПУТСТВУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ ОТСЧЕТА

Расчет потенциала ионной плоскости можно выполнить, усреднив объемную зарядовую плотность $\rho(|\vec{r}|)$ составляющих ее атомов (ионов)

$$\langle \rho(x) \rangle = \int dz \int dy \rho(|\vec{r}|) / S, \quad (2)$$

где S – площадь плоскостной кристаллической ячейки, приходящейся на один атом в плотноупакованной кристаллической двумерной плоскости YZ , радиус-вектор \vec{r} отсчитывается от положения ядра атома (иона).

Чтобы найти усредненный потенциал плоскости (точнее – потенциальную энергию $U(x)$ электрона с зарядом e в поле, созданном усредненной зарядовой плотностью (1)), придется решить уравнение Пуассона:

$$\Delta U(x) = -\frac{e\langle \rho(x) \rangle}{\epsilon_0}. \quad (3)$$

В ССО волновые функции $\psi_n(x)$ поперечного движения частицы с релятивистской энергией $E \gg mc^2$ в одномерном потенциальном канале $U(x)$ задаются решениями релятивистского уравнения Шредингера

$$(\hbar^2 c^2 / 2E) \Delta \psi_n(x) = (\epsilon_n - U(x)) \psi_n(x), \quad (4)$$

где ϵ_n – собственные значения энергий поперечного движения, соответствующие собственным функциям $\psi_n(x)$ уравнения (3).

Сложность в том, что и посчитать интеграл (2), и решить уравнения (3) и тем более (4), как правило, можно только численно, да и сама за-

рядовая плотность отдельных атомов $\rho(|\vec{r}|)$ считается только численно, и/или задается в той или иной приближенной модели. Если мы хотим уловить общие закономерности и характеристики потенциала и движения электронов в нем, можно взять модельную форму потенциала $U(x)$, похожую по параметрам на численно считаемую, но позволяющую далее работать с ней аналитически.

РАСЧЕТ СОСТОЯНИЙ ПОПЕРЕЧНОГО ДВИЖЕНИЯ В ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛЕ ДЛЯ МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА КРОНИГА–ПЕННИ

Простейший модельный потенциал плоскостного канала, с которым можно работать аналитически, это т.н. потенциал Кронига–Пенни, в котором плоскостные каналы аппроксимируются прямоугольными потенциальными ямами:

$$U(x) = \tilde{U}(x) = \begin{cases} U_0, & na - R \leq x \leq na + R; \\ 0, & na + R < x < (n+1)a + R, \end{cases} \quad (5)$$

где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; U_0 – глубина усредненного потенциала в лабораторной системе.

Этот потенциал, сохраняя важные черты усредненного потенциала кристаллографических плоскостей, допускает простое аналитическое решение уравнения (4) в случае, когда вероятность подбарьерного прохождения частиц пренебрежимо мала, и позволяет правильно уловить основные закономерности движения частиц при плоскостном каналировании.

Собственные волновые функции поперечного движения для потенциала (4) имеют вид:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a-2R}} \left\{ \begin{array}{l} \sin\{p_n(x-R) + \gamma_n\}, \quad R \leq x < a-R; \\ \sin \gamma_n \exp(-\alpha_n R) [\exp(\alpha_n x) + (-1)^{n+1} \exp(-\alpha_n x) [\exp(-ika)], \quad |x| \leq R; \\ \exp(-ika) \sin\{p_n(x+a-R) + \gamma_n\}, \quad -a+R \leq x < -R. \end{array} \right\} \quad (6)$$

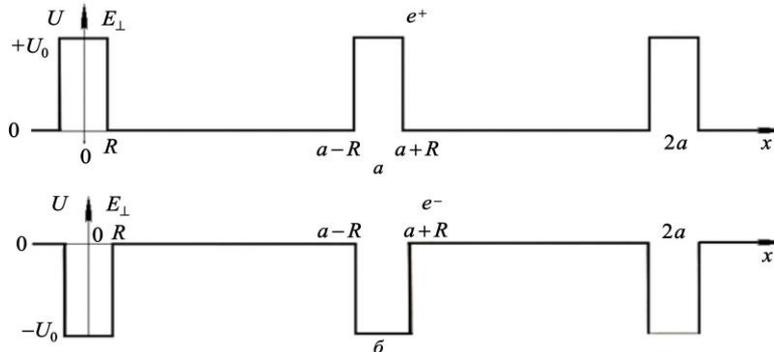


Рис. 1. Потенциал Кронига–Пенни для плоскостного каналирования положительно (а) и отрицательно (б) заряженных частиц. Здесь a – межплоскостное расстояние, $R \ll a$ – характерный радиус атомов в остоле кристаллической решетки

В выражении для u_n (6) параметры α_n и γ_n определяются соотношениями

$$\alpha_n = \sqrt{2MU_0 - p_n^2} = p, \quad (7)$$

$$\sqrt{\theta_{кр}^2 - \theta_n^2}, \quad \gamma_n = \arcsin(\theta_n^2/\theta_{кр}^2),$$

и условие квантования поперечного импульса $p_n = p\theta_n$ имеет вид

$$p_n(a - 2R) = \pi n - 2\gamma_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (8)$$

Волновые функции и условия квантования получены в предположении $a \gg R$, $\alpha R \gg 1$ и падающая частица имеет импульс, почти параллельный кристаллографической плоскости, т.е. $p_n \ll \alpha$. Условие $\alpha R \gg 1$ соответствует экспоненциально малой проницаемости потенциального барьера, описываемого усредненным потенциалом кристаллографической плоскости. Кроме того, условие $\alpha R \gg 1$ в соответствии с u_n обеспечивает экспоненциально малость вероятности обнаружения каналированной частицы вблизи узлов решетки. Полученные волновые функции $u_n(x)$ являются ортонормированными и их система удовлетворяет условию полноты.

Спектр поперечных энергий для разрешенных состояний поперечного движения с волновыми функциями (5) в потенциале Кронига–Пенни в пренебрежении туннелированием через барьер между соседними каналами задается выражением:

$$\varepsilon_n = (\pi\hbar c(n + 1/2)/b)^2/2E. \quad (9)$$

Здесь ширина канала $b = 2R$ – для электронов, или $b = a$ – для позитронов.

Точно такие же значения E_n для потенциала (5) можно получить, не решая уравнения (3) и не рассчитывая волновых функций, а просто применив квантово-классическое правило квантования Бора–Зоммерфельда:

$$\int p(x)dx = \int dx[2E(\varepsilon_n - U(x))]^{1/2} = 2\pi\hbar c(n + 1/2). \quad (10)$$

где интегрирование выполняется по классически допустимой (где $\varepsilon_n > U(x)$) области одного периода движения. Число состояний с поперечными энергиями, ниже потенциального барьера, составляет $N \sim (b/\pi\hbar c)(2EU_0)^{1/2}$.

РАСЧЕТ СОСТОЯНИЙ В ПЛОСКОСТНОМ КАНАЛЕ ДЛЯ ДРУГИХ МОДЕЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Совпадения собственных значений энергии поперечного движения, рассчитанных с помощью правила (10) с точными решениями уравнения (4), наблюдаются и для других модельных потенциалов, допускающих точные аналитические решения уравнения Шредингера. Например, для параболического потенциала

$$U(x) = U_0(2x/a)^2, \quad (11)$$

который, при соответствующем подборе параметра U_0 (глубина потенциальной ясы), аппроксимирует потенциалы межплоскостных каналов для положительно заряженных каналированных частиц (протонов или позитронов, например) неизбежно хорошо, поскольку вблизи минимума, а перекрытий убывающих полей, создаваемых атомными плотноупакованными плоскостями непараболической потенциальной функции, быть просто не может. Для любого параболического потенциала, как хорошо известно из квантовой механики, уровни энергии эквидистантны. Для потенциала (11) значения собственных уровней поперечной энергии

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_k(n + 1/2), \quad (12)$$

где $\omega_k = (2c/a)(2U_0/E)^{1/2} = 2\theta_{LC}/a$ – классическая частота колебаний частицы в потенциале (10).

Суммарное число разрешенных квантовых состояний для частицы с релятивистской энергией E в потенциале (10) составит примарно $N \sim U_0/\hbar\omega_k \sim (a/\hbar c)(EU_0)^{1/2}$, что по порядку величины соответствует результату для потенциала Кронига–Пенни. $N \gg 1$ при $E > mc^2$.

Чтобы получить реалистический потенциал плоскостного канала для отрицательно заряженных электронов, надо инвертировать параболический потенциал (11) и рассмотреть остроугольные каналы, образующиеся на стыках соседних межплоскостных перевернутых парабол (11), т.е., не между плоскостями, а вблизи атомных плоскостей, где зарядовая плотность, создаваемая ядрами атомов, положительна и сосредоточена в очень узкой области, отчего потенциальные стыки должны напоминать стыки сторон треугольника. Вблизи атомных плоскостей не будет ошибкой аппроксимировать потенциал «треугольной» функцией

$$U(x) \approx U_0 x/b; \quad |x| < b \sim a/4, \quad (13)$$

где параметр $b = a/4$, если точно рассчитать его, состыковав инвертированные параболические потенциалы (10), но лучше считать этот параметр (как и параметр U_0) подгоночным и настраивать его точное значение из соображений оптимального соответствия расчетов и измерений. Разрешенные значения поперечных энергий для состояний финитного движения в «треугольном» потенциале (11) $\varepsilon_n < U_0$ и задаются условием:

$$(\varepsilon_n/U_0)^{3/2} = (3\pi/4\sqrt{2})(\hbar c/b)(EU_0)^{-1/2}(n+1/2). \quad (14)$$

Уровни энергии электронов в потенциале (13) не эквидистантны $\varepsilon_n \sim n^{2/3}$, но общее число уровней с энергиями $\varepsilon_n < U_0$ в потенциале (13) по порядку величины такое же, как и для частиц в потенциалах (5), (11): $N \sim (b/\hbar c)(EU_0)^{1/2}$, что при релятивистских энергиях $E > mc^2$ также больше единицы.

ПЛОСКОСТНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ ЧАСТИЦ СВЕРХВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ – «ОДНОМЕРНЫЙ РЕЛЯТИВИСТСКИЙ АТОМ»

Успешное применение правила квантования Бора–Зоммерфельда к разным модельным потенциалам дает надежду, что если модифицировать это правило применительно к релятивистским энергиям поперечного движения, оно даст верную оценку для спектра и числа связанных состояний и в этом случае. Выход за рамки нерелятивистского приближения даже в ССО неизбежен при увеличении энергии электрона E до нескольких десятков гигаэлектрон-вольт, когда поперечные импульсы движущихся в канале частиц достигают релятивистских значений:

$$cp(x) = (2E(\varepsilon_n - U(x)))^{1/2} \sim (EU_0)^{1/2} > mc^2. \quad (15)$$

Корректировка правила квантования (10) для релятивистских энергий движения кажется очевидной: заменить выражение для поперечного импульса электрона (15) на вариант, применимый и в релятивистском случае. Ранее никто не пробовал это делать, видимо, потому, что правила квантования применялись в основном в атомной физике или в физике полупроводников, где релятивистские энергии движения электронов не встречаются. Эффект каналирования дает повод раздвинуть рамки применения правил квантования.

Самый простой случай – рассмотреть в ССО движение электрона в потенциале, имеющем вид прямоугольной ямы глубиной γU_0 и шириной b :

$$U(x) = 0 \text{ при } |x| < b/2; \quad (16)$$

$$U(x) = \gamma U_0 \text{ при } |x| > b/2.$$

Это аналог потенциала (5), но с увеличенной в γ -фактор раз при переходе из ЛСО в ССО глубиной потенциала:

$$U(x) \rightarrow \gamma U(x) = (E/mc^2) U(x).$$

При переходе в ССО изменится также и масштаб поперечных энергий:

$$\varepsilon_n \rightarrow \gamma \varepsilon_n.$$

В канале, где потенциал равен нулю, у электрона есть только кинетическая энергия и энергия покоя. Релятивистское выражение для его поперечного импульса в ССО в этом случае имеет вид

$$p_n c = ((mc^2 + \gamma \varepsilon_n)^2 - m^2 c^4)^{1/2} = (2E \varepsilon_n + \gamma^2 \varepsilon_n^2)^{1/2}, \quad (17)$$

где $(mc^2 + \gamma \varepsilon_n)$ – полная релятивистская энергия движения электрона в ССО, а поперечные энергии ε_n берутся из ЛСО, где $\varepsilon_n < U_0$. Если $\gamma \varepsilon_n \ll mc^2$, выражение (17), естественно, возвращается к «нерелятивистскому» выражению (10) $p_n c = (2E \varepsilon_n)^{1/2}$, и поперечные энергии задаются значениями (9). Если $\gamma \varepsilon_n > mc^2$, выражение (17) к (10) не сводится, а при очень больших энергиях $E \gg (mc^2)^2/U_0 \sim$ несколько десятков гигаэлектрон-вольт, сводится к линейному: $p_n c = \gamma \varepsilon_n$. Подставляя его в правило квантования (10), находим:

$$\int p dx = 2b \gamma \varepsilon_n / c \Rightarrow \Rightarrow \gamma \varepsilon_n = (\pi \hbar c / b)(n + 1/2), \quad \varepsilon_n \sim n. \quad (18)$$

Высокие уровни поперечной энергии в потенциале (16) при энергиях E больше десятка гигаэлектрон-вольт будут эквидистантны, как при более низких энергиях бывает только в потенциале параболическом. Расстояния между соседними уровнями составят $\Delta \varepsilon_n = (\pi \hbar c m / b E)$, а их общее число в потенциале, (16) будет примерно равно

$$N = EU_0 b / \pi \hbar c m \sim E. \quad (19)$$

Заметим, что при более низких энергиях число уровней росло с энергией не так быстро ($\sim \sqrt{E}$).

ВЫБОР АДЕКВАТНОГО ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ

Если потенциал $U(x)$ зависит от x не столь простым способом, как (16), можно модифицировать правило квантования (10), (18), учтя, что в выражении для полной релятивистской энергии движения $E_{CCO} = (mc^2 + \gamma \varepsilon_n)$ должно учитываться не абстрактное значение поперечной энергии ε_n , а лишь его превышение над значением потенциальной энергии $\varepsilon_n - U(x)$. Скорректированное выражение для импульса (17), который следует подставить в правило квантования (18), принимает вид

$$p_n = (2m\gamma(\varepsilon_n - U(x)) + \gamma^2(\varepsilon_n - U(x))^2 / c^2)^{1/2}. \quad (20)$$

В случае $\gamma \varepsilon_n \gg mc^2$ выражение (20) упрощается:

$$p_n c = \gamma(\varepsilon_n - U(x)). \quad (21)$$

Теперь с помощью скорректированного правила квантования

$$c \int p_n dx = \gamma \int (\varepsilon_n - U(x)) dx = 2\pi\hbar c (n + 1/2) \quad (22)$$

можно рассчитать разрешенные значения высоких поперечных энергий для реалистичных плоскостных потенциалов.

Параболический потенциал (11):

$$\gamma \varepsilon_n = U_0^{1/3} (3\pi\hbar c n / 2a)^{2/3}, \quad (23)$$

«Треугольный» потенциал: $U = U_0 |x|$,

$$\gamma \varepsilon_n = (\pi\hbar c n U_0 / 2b)^{1/2}. \quad (24)$$

Во всех потенциалах число уровней растет $\sim E$. Заметим, что в параболическом потенциале уровни уже не эквидистантны, и с ростом номера сгущаются.

ВЫВОДЫ

Выполненное рассмотрение показывает, что основные характеристики квантовых состояний поперечного движения релятивистских частиц при плоскостном каналировании слабо чувствительны к функциональной зависимости усредненного потенциала от поперечных координат. По этой причине представляется нецелесообразным гнаться за точным воспроизведением этой зависимости методами численного усреднения сложных потенциалов атомов и ионов решетки. Достаточно ограничиться выбором простого, но реалистичного модельного потенциала, например параболического – для положительно заряженных каналированных частиц или обратного параболического («треугольно-

го») – для отрицательно заряженных. Для выполнения такого расчета также не обязательно использовать сложные точные уравнения квантовой механики (релятивистское уравнение Шредингера, решение которого возможно лишь численно или в специальных функциях), но можно воспользоваться упрощенными приближенными методами квантования Бора–Зоммерфельда, позволяющими сделать аналитический расчет основных характеристик квантовых состояний. Более того приближенный метод расчета квантовых состояний можно расширить и применить для рассмотрения поперечного движения, выходящего за рамки нерелятивистского приближения. В следующей статье этой серии авторы надеются показать, что аналогичный подход может быть использован и при рассмотрении аксиального каналирования.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «ПРИОРИТЕТ – 2030».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лундхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц // УФН. 1969. Т. 99. № 2. С. 249–296.
2. Andersen S.K., Bell F., Frandsen F., Uggerhoj E. Electron channeling in Si, Ag and Au crystals // Physical Review B. 1973, V. 8. № 11. P. 4913–4925.
3. Andersen J.U., Bonderup E., Loegsgaard E. e.a. // NIM, 1982. V. 194. P. 209–224.
4. Belkacem A., Bologna G., Chevallier M., e.l. New Channeling Effects in the Radiative Emission of 150 GeV Electrons in a Thin Germanium Crystal // Physics Letters B, 1986. V. 177. № 2. P. 211–216.
5. Калашиников Н.П. Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах. М.: Атомиздат, 1981. 224 с.
6. Барышевский В.Г. Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях. Минск: Изд. БГУ им. В.И. Ленина, 1982. 256 с.
7. Воробьев С.А. Каналирование электронных пучков. М.: Энергоатомиздат, 1984. 96 с.
8. Оцук Е.Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.
9. Каган Ю.М., Кононец Ю.В. Теория эффекта каналирования // ЖЭТФ, 1970. Т. 58. № 1. С. 226–254.
10. Каган Ю.М., Кононец Ю.В. Теория эффекта каналирования. Влияние неупругих столкновений // ЖЭТФ, 1973. Т. 64. № 3. С. 1042–1064.

11. Коган Ю.М., Кононец Ю.В. Теория эффекта каналирования. Энергетические потери быстрых частиц // ЖЭТФ. Т. 66. № 5. С. 1693–1711.

12. Рябов В.А. Эффект каналирования. М.: Энергоатомиздат, 1994. 240 с.

13. Базылев В.А., Живаго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: ГРФМЛ. Наука, 1987. 272 с.

14. Байер В.Н., Катков В.М., Страховенко В.М. Электромагнитные процессы при высокой энергии в ориентированных кристаллах. Новосибирск: Наука СО РАН, 1989. 400 с.

15. Ахизер А.И., Шульга Н.Ф. Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: ГРФМЛ. Наука, 1993. 344 с.

16. Калашиников Н.П., Ольчак А.С. Классическое и квантовое описание эффекта каналирования как взаимно дополняющие приближения // Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2022. № 10. С. 107–112.

17. Калашиников Н.П., Ольчак А.С. Явление каналирования как реализация модели 1D и 2D атомов в сопутствующей системе координат // Новые технологии науки, техники, педагогики. Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Наука-Общество-Технологии-2022». М.: МПУ, 2022. С. 5–13.

18. Калашиников Н.П., Ольчак А.С. Классический подход для описания излучения каналированных частиц // Вестник НИЯУ МИФИ, 2021. Т. 10. № 2. С. 97–103.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2024, vol. 13, no. 1, pp. 3–10

SELECTION OF AN ADEQUATE INTERACTION POTENTIAL TO DESCRIBE PLANE CHANNELING OF RELATIVISTIC PARTICLES

N.P. Kalashnikov^{1,*}, A.S. Olchak^{1,**}

¹National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

*e-mail: kalash@mephi.ru

**e-mail: asolchak@mephi.ru

Received December 5, 2023; revised December 7, 2023; accepted December 26, 2023

The work considers planar channeling of relativistic particles in a comoving frame of reference moving at a speed equal to the longitudinal component of the velocity of the channeled particle. In SSO, the motion of a particle during planar channeling will be one-dimensional, and for electrons and positrons with energies up to several GeV it will be non-relativistic, as in the hydrogen atom. potential from transverse coordinates. To determine the main characteristics of such a movement, it is proposed to use approximate Bohr-Sommerfeld quantization methods, which make it possible to make such a calculation analytically. The approximate method for calculating quantum states can be extended to consider transverse motion beyond the nonrelativistic approximation, even in a comoving frame. The energy distributions of permissible states of transverse finite motion are found for several variants of model potentials. It is shown that, despite the difference in the structure of energy levels, the average distances between energy levels are practically insensitive to the choice of model potential. The energies of the transverse motion levels are found for the case when the nonrelativistic approximation is not applicable even in the comoving reference frame.

Keywords: coherent interaction, channeling, single crystal, accompanying reference frame, electromagnetic radiation, quantum mechanics, gamma radiation.

REFERENCES

1. Lindhard J. Vliyanie kristallicheskoj reshetki na dvizhenie bystryh zaryazhennyh chastic [The influence of the crystal lattice on the movement of fast charged particles]. UFN, 1969. Vol. 99. No. 2. Pp. 249–296 (in Russian).

2. Andersen S.K., Bell F., Frandsen F., Uggerhoj E. Electron channeling in Si, Ag and Au crystals. Physical Review B, 1973. Vol. 8. No. 11. Pp. 4913–4925.

3. Andersen J.U., Bonderup E., Loegsgaard E. e.a. NIM, 1982. Vol. 194. Pp. 209–224.

4. Belkacem A., Bologna G., Chevallier M., e.l. New Channeling Effects in the Radiative Emission of 150 GeV Electrons in a Thin Germanium Crystal. Physics Letters B, 1986. Vol. 177. No. 2. Pp. 211–216.

5. Kalashnikov N.P. Kogerentnye vzaimodejstviya zaryazhennyh chastic v monokristallah [Coherent interactions of charged particles in single crystals]. Moscow, Atomizdat Publ., 1981. 224 p.

ВЫБОР АДЕКВАТНОГО ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ

6. *Baryshevskij V.G.* Kanalirovanie, izluchenie i reakcii v kristallah pri vysokih energiayah [Channeling, emission and reactions in crystals at high energies]. Minsk, Izd. BGU im. V.I. Lenina Publ., 1982. 256 p.

7. *Vorob'ev S.A.* Kanalirovanie elektronnyh puchkov [Channeling of electron beams]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1984. 96 p.

8. *Ocuki E.H.* Vzaimodejstvie zaryazhennyh chastic s tverdymi telami [Interaction of charged particles with solids]. Moscow, Mir Publ., 1985. 280 p.

9. *Kagan Yu.M., Kononec Yu.V.* Teoriya effekta kanalirovaniya [Channeling effect theory]. ZHETF, 1970. Vol. 58. No. 1. Pp. 226–254 (in Russian).

10. *Kagan Yu.M., Kononec Yu.V.* Teoriya effekta kanalirovaniya. Vliyanie neuprugih stolknovenij [The theory of the channeling effect. Effect of inelastic collisions]. ZHETF, 1973. Vol. 64. No. 3. Pp. 1042–1064 (in Russian).

11. *Kagan Yu.M., Kononec Yu.V.* Teoriya effekta kanalirovaniya. Energeticheskie poteri bystryh chastic [The theory of the channeling effect. Energy losses of fast particles]. ZHETF. Vol. 66. No. 5. Pp. 1693–1711 (in Russian).

12. *Ryabov V.A.* Effekt kanalirovaniya [Channeling effect]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1994. 240 p.

13. *Bazylev V.A., Zhivago N.K.* Izluchenie bystryh chastic v veshchestve i vo vneshnih polyah [Radiation of fast particles in matter and in external fields]. Moscow, GRFML. Nauka Publ., 1987. 272 p.

14. *Bajer V.N., Katkov V.M., Strahovenko V.M.* Elektromagnitnye processy pri vysokoj energii v orientiro-

vannyh kristallah [Electromagnetic processes at high energy in oriented crystals]. Novosibirsk, Nauka SO RAN Publ., 1989. 400 p.

15. *Ahiezer A.I., Shul'ga N.F.* Elektrodinamika vysokih energij v veshchestve [Electrodynamics of high energies in matter]. Moscow, GRFML. Nauka Publ., 1993. 344 p.

16. *Kalashnikov N.P., Ol'chak A.S.* Klassicheskoe i kvantovoe opisaniya effekta kanalirovaniya kak vzaimno dopolnyayushchie priblizheniya [Classical and quantum descriptions of the channeling effect as mutually complementary approximations]. Poverhnost', rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya, 2022. No. 10. Pp. 107–112 (in Russian).

17. *Kalashnikov N.P., Ol'chak A.S.* YAvlenie kanalirovaniya kak realizaciya modeli 1D i 2D atomov v so- putstvuyushchej sisteme koordinat [The phenomenon of channeling as a realization of the model of 1D and 2D atoms in the accompanying coordinate system]. Novye tekhnologii nauki, tekhniki, pedagogiki. Materialy Vserossijskoj nauchno-prakticheskoy konferencii «Nauka-Obshchestvo-Tekhnologii-2022» [New technologies of science, technology, pedagogy. Materials of the All-Russian Scientific and Practical Conference «Science-Society-Technology-2022»]. Moscow, MPU Publ., 2022. Pp. 5–13 (in Russian).

18. *Kalashnikov N.P., Ol'chak A.S.* Klassicheskij podhod dlya opisaniya izlucheniya kanalirovannyh chastic [Classical approach to describe the radiation of channeled particles]. Vestnik NIYaU MIFI, 2021. Vol. 10. No. 2. Pp. 97–103 (in Russian).

УДК 533.95; 534.28

КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ В РАЗРЕЖЕННОЙ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ, ВЫЗВАННЫЕ ДИСПЕРСИЕЙ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН

Д.Б. Бембитов^{1,*}, Н.К. Шивидов¹, Б.Б. Михалеев¹

¹Калмыцкий государственный университет имени Б.Б. Городовикова, г. Элиста, 358000, Россия

*e-mail: dbembitov@gmail.com

Поступила в редакцию: 20.11.2023

После доработки: 20.11.2023

Принята к публикации: 23.01.2024

На основе учета эффектов теплопроводности и нагрева/радиационных потерь изучается дисперсия акустических волн в разреженной высокотемпературной плазме на примере плазмы солнечной короны. Для функции радиационных потерь используется аналитическая аппроксимация, построенная по значениям, найденным при помощи кода CHIANTI. Показано, что появление квазипериодических осцилляций в акустических волнах может быть объяснено специфическими свойствами дисперсии, связанными с наличием минимума групповой скорости в пространстве волновых чисел. Вейвлет-спектр акустических колебаний в этом случае имеет структуру, названную «бумерангом». Предложена процедура расчета периодов с использованием построенной дуги «бумеранга». Предполагается, что начальное возмущение плазмы имеет форму локализованного импульса, имеющего высокие дисперсионные качества в силу своего широкого спектра. Такой подход имеет основания, известно, например, что различного рода нестационарные процессы в солнечной короне генерируются под действием кратковременных импульсов со стороны конвективных ячеек. Спектр временного сигнала, рассматриваемого в некоторой точке наблюдения, получается непрерывный, и нахождение периодов производится по имеющимся в спектре локальным максимумам. В этом смысле понятие квазипериодических осцилляций отличается от традиционного, где имеется в виду наличие конечного или счетного количества периодов, между которыми имеется определенная связь. Расчеты проводятся на примере высокотемпературной плазмы солнечной короны, где квазипериодические осцилляции наблюдаются повсеместно и могут служить инструментом исследования физических свойств корональной плазмы.

Ключевые слова: плазма, теплопроводность и излучение плазмы, акустические волны, затухание и дисперсия волн, квазипериодические колебания.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.290

EDN FPSJNU

ВВЕДЕНИЕ

В наших предыдущих работах [1–2] была предложена модель неадиабатических акустических волн в разреженной высокотемпературной плазме, в которой были учтены эффекты теплопроводности и радиационных потерь. Для примера плазмы солнечной короны принимались классическая спитцеровская теплопроводность и функция излучения, построенная по известному коду CHIANTI [3]. В солнечной короне наблюдаются волны различного вида и различной природы [4–5], которые находят важное практическое применение в определении параметров корональной плазмы [6]. Как правило, они быстро затухают. Хорошо известно, что потери энергии волнами ведут не только к их затуханию, но и к дисперсии [7], этот эффект

применяется и в солнечной физике [8]. Квазипериодические колебания привлекают к себе особенное внимание, хотя бы потому, что содержат больше информации. Они наблюдаются, например, во время вспышек по осцилляциям интенсивности микроволнового излучения и объясняются возбуждением нескольких мод магнитных трубок [9–10]. В ситуациях, где наблюдаются волны сжатия, возможно объяснение дисперсии акустических волн [11]. Моделирование показывает, что под воздействием дисперсии из начального локализованного импульса могут возникать квазипериодические осцилляции, при этом вейвлет-спектр по своей форме напоминает бумеранг [12]. Мы показываем, что «бумеранг» возможен и в случае дисперсии акустических волн. Мы связываем его появление с минимумом групповой скорости и

КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ В РАЗРЕЖЕННОЙ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ,
ВЫЗВАННЫЕ ДИСПЕРСИЕЙ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН

предлагаем процедуру расчета появляющихся при этом пар периодов. Работа направлена на развитие теоретических основ исследований космической плазмы, разработку методов формулирования и решения обратных задач для нахождения параметров плазмы.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Волны изучаются в приближении одномерной гидродинамики, исходные уравнения записываются через плотность и температуру, которые принимаются в качестве базовых термодинамических параметров

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} = -\frac{R}{M} \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{T}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial v_x}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + (-1)T \frac{\partial v_x}{\partial x} = -\frac{(\gamma-1)M}{R\rho} \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{(\gamma-1)M}{R} [\rho\Lambda(T) - H]. \quad (3)$$

Исходная среда есть идеальный газ с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$ и молярной массой высокоионизованной водородной плазмы с гелиевой добавкой $M = 0,62m_p N_A \approx 0,62 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$. Эффект нагрева/радиационных потерь определяется выражением $\rho\Lambda(T) - H$, содержащим постоянную функцию нагрева H . Функция излучения строится кубическими сплайнами по найденным с помощью кода CHIANTI [3] табличным значениям, для просмотра которых мы отсылаем к работе [1]. В рассматриваемом ниже примере приводятся параметры из дисперсионного соотношения, которые вычисляются из функции излучения и коэффициента теплопроводности. Для высокотемпературной плазмы используем классическое выражение коэффициента с кулоновским логарифмом $\Lambda_C = 19.3$

$$\kappa(T) \approx 2.28 \cdot 10^{-6} T^{\frac{5}{2}} \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}. \quad (4)$$

Невозмущенная плазма имеет однородные плотность ρ_0 и температуру T_0 , $C_s = \sqrt{\gamma RT_0/M}$ – звуковая скорость. Частота и волновое число имеют безразмерные значения $\tilde{\omega}$, \tilde{k} и соответствующие масштабы $m(\omega) = 0.1 \text{ с}^{-1}$, $m(k) = 10^{-8} \text{ см}^{-1}$. Величина $\frac{m(\omega)}{m(k)} = m(C_s) = 10^7 \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$ есть масштаб звуковой скорости, характерный для температуры поряд-

ка одного МК. Дисперсионное соотношение в безразмерных величинах имеет следующий вид:

$$\tilde{\omega}^3 + iA\tilde{\omega}^2 - \tilde{\omega}\tilde{C}_s^2\tilde{k}^2 + iB = 0, \quad (5)$$

$$A = A_1\tilde{k}^2 + A_2,$$

$$B = [-(A_1\tilde{k}^2 + A_2) + A_3] \tilde{C}_s^2\tilde{k}^2/\gamma, \quad (6)$$

где параметры «неадиабатичности» имеют выражения

$$A_1 = \frac{(\gamma-1)Mm(k)^2}{R\rho_0m(\omega)} \kappa(T_0), \quad (7)$$

$$A_2 = \frac{(\gamma-1)M}{Rm(\omega)} \rho_0\Lambda'(T_0), \quad (8)$$

$$A_3 = \frac{(\gamma-1)M}{RT_0m(\omega)} \rho_0\Lambda(T_0). \quad (9)$$

Асимптотическое в пределе больших волновых числах значение частоты

$$\tilde{\omega} \approx \tilde{v}_\infty\tilde{k} - i\tilde{\delta}_\infty, \quad \tilde{v}_\infty = \frac{\tilde{C}_s}{\sqrt{\gamma}}, \quad \tilde{\delta}_\infty = \frac{(\gamma-1)\tilde{C}_s^2}{2\gamma A_1}. \quad (10)$$

Нетрудно видеть, что при больших волновых числах фазовая скорость волны близка к изотермической звуковой скорости. Это означает высокую эффективность теплопроводности.

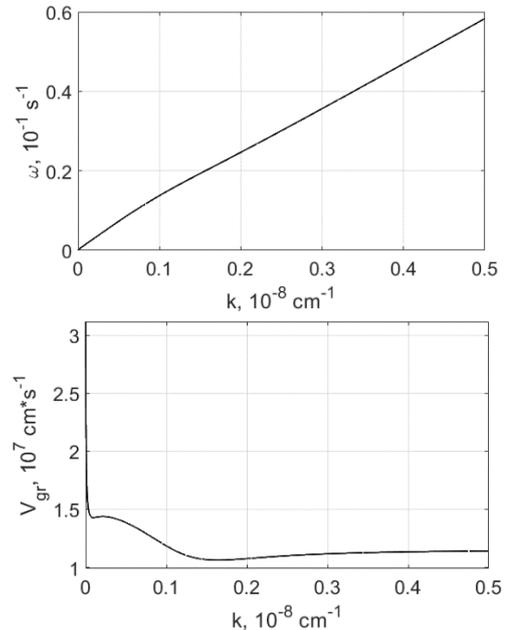


Рис. 1. Кривая частоты и групповая скорость при $T_0 = 1 \text{ МК}$ и $\rho_0 = 1.037 \times 10^{-15} \text{ г см}^{-3}$

На рис. 1 мы приводим пример дисперсионных кривых для случая, когда $A_1 = 11.0$, $A_2 = -0.000509$, $A_3 = 0.0128$. Обращаем внимание на два локальных минимума групповой скорости, один при $\tilde{k} = 0.164$, другой находит-

ся вблизи нуля, он менее выражен. Главный минимум обусловлен теплопроводностью, второй – нагревом/радиационными потерями. В данной работе нас будет интересовать первый.

ДИСПЕРСИЯ ВОЛН

Моделирование дисперсии производим, изучая распространение волнового пакета в виде локализованного начального импульса гауссовой формы.

На рис. 2 показан вейвлет-спектр колебаний на некотором удалении от начального положения импульса. Спектр колебаний довольно широк, его ядро своей формой напоминает бумеранг [12]. Появление бумеранга свидетельствует о наличии квазипериодических колебаний. На чем основан этот вывод? Очевидно, точка излома бумеранга дает колебания, которые последними приходят в точку наблюдения, и это есть

колебания, распространяющиеся с минимальной групповой скоростью. Несколько ранее приходят колебания, имеющие большую групповую скорость, но таких колебаний, судя по кривой групповой скорости, имеется два. Каждое такое колебание формируется узким пакетом, имеющим частоту, равную частоте несущей, которая определяется кривой частоты из рис. 1. Под узким мы понимаем пакет, имеющий узкий интервал волновых чисел. Два узких пакета, спектральные интервалы которых лежат по обе стороны от минимума, имеют равную групповую скорость, но различные несущие частоты. Они дают квазипериодические колебания. Данный анализ, приведенный в работе [12], имеет качественное значение и не дает возможности определить величины периодов, которые появляются в конкретном случае. Мы предлагаем процедуру их вычисления.

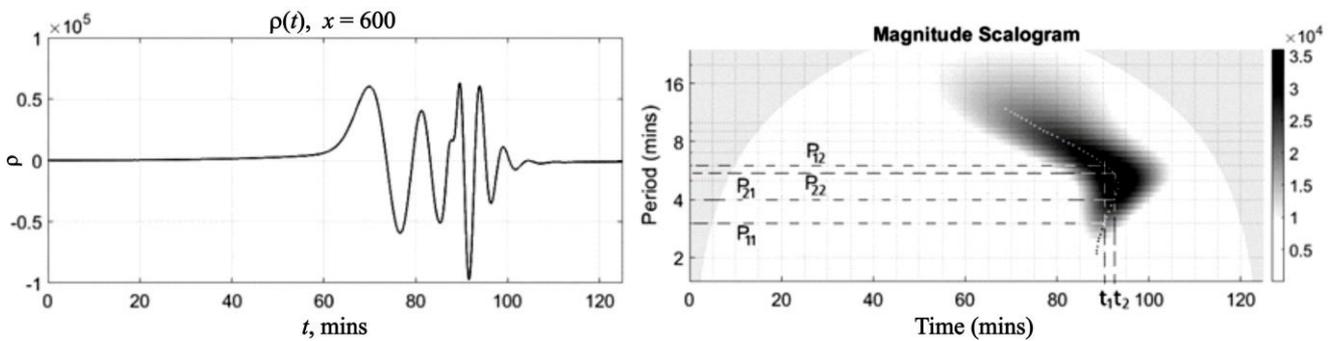


Рис. 2. Вид временного сигнала на расстоянии $x = 3 \times 10^{10}$ см (левая панель) и вейвлет-спектр сигнала (правая панель)

Поскольку пакет «размыт» не только в пространстве, но и во времени, излом бумеранга и другие его части имеют некоторую протяженность. Имеет смысл рассматривать его дугу, изображенную на рис. 2 (правая панель) точечной линией, под которой мы понимаем геометрическое место точек наибольшей плотности сигнала. В точке излома дуга имеет вертикальную касательную, в ней период колебаний равен 5 мин. С другой стороны, в точке минимума групповой скорости $k = 0.164 \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$ мы имеем частоту $\omega = 0.021 \text{ с}^{-1}$, или период в те же 5 мин. В каждый отдельный момент времени, например $t_1 = 90.5$, с помощью дуги мы находим два периода, $P_{11} = 3$ мин и $P_{12} = 6$ мин.

Возможных пар много, и, по всей видимости, наблюдение определенной пары связано с видом спектральной плотности сигнала. Можно рассмотреть обратный пример, когда по периодам можно получить параметры плазмы. В ра-

боте [13] приведены данные наблюдений волн сжатия в полярных шапках на Солнце в линии 171 \AA при температуре плазмы в 1 МК. Были обнаружены периоды в 22.4 и 17.1 мин, они могут быть получены из нашей модели при $T_0 = 1 \text{ МК}$ и $\rho_0 = 1.037 \times 10^{-15} \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$. В данном примере по заданным периодам мы оценили плотность плазмы. Такой подход соответствует основной задаче корональной сейсмологии. В рассмотренных примерах используется основной минимум групповой скорости, обусловленный теплопроводностью. Аналогично, возможно существование квазипериодических осцилляций, вызванных дисперсией в результате нагрева/радиационных потерь. Однако здесь значения периодов будут на порядок больше.

ВЫВОДЫ

Образование наблюдаемых квазипериодических осцилляций возможно в результате распа-

КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ В РАЗРЕЖЕННОЙ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ, ВЫЗВАННЫЕ ДИСПЕРСИЕЙ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН

да локализованного импульса на отдельные периодические составляющие. Данный процесс обычно изучается с применением вейвлет-анализа, где хорошо изучены примеры с выделенными периодами. Распад импульса возможен в результате дисперсии начального импульса под действием теплопроводности и нагрева/радиационных потерь. Дисперсия на минимуме групповой скорости дает пары периодов, что часто наблюдается в практике. Она может быть использована при определении параметров плазмы.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ (№075-03-2023-121/3 «Разработка новых наблюдательных и теоретических подходов в прогнозе космической погоды по данным наземных наблюдений»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бембитов Д.Б., Шивидов Н.К., Михальев Б.Б. Акустические волны в разреженной высокотемпературной плазме // Вестник НИЯУ МИФИ, 2022. Т. 11. № 4. С. 288.
2. Derteev S., Shividov N., Bembitov Dz., Mikhalyaev B. Damping and dispersion of non-adiabatic acoustic waves in a high-temperature plasma: A radiative-loss function // Physics. 2023. V. 5. P. 215.
3. Del Zanna G., Dere K.P., Young P.R., Landi E. CHIANTI – An atomic database for emission lines. XVI. Version 10, further extensions // The Astrophysical Journal, 2021. V. 909. P. 38.
4. De Moortel I. Longitudinal waves in coronal loops // Space Science Reviews, 2009. V. 149. P. 65.

5. Wang T.J. Waves in solar coronal loops. Low-frequency waves in space plasmas. / Ed. by Andreas Keiling, Dong-Hun Lee, Valery Nakariakov // Geophys. Monograph Series. Wiley, 2016. V. 216. P. 395.

6. De Moortel, I., Nakariakov, V.M.: 2012, Magneto-hydrodynamic waves and coronal seismology: an overview of recent results // Philosophical Transactions of the Royal Society A // V. 370. P. 3193.

7. Гинзбург В.Л. Об общей связи между поглощением и дисперсией звуковых волн // Акустический журнал, 1955. Т. 1. Вып. 1. С. 31.

8. Belov S.A., Molevich N.E., Zavershinskii D.L. Dispersion of slow magnetoacoustic waves in the active region fan loops introduced by thermal misbalance // Solar Physics, 2021. V. 296. P. 122.

9. Nakariakov V.M., Kolotkov D.Y., Kupriyanova E.G., Mehta T., Pugh C.E., Lee D.-H., Broomhall A.-M. Non-stationary quasi-periodic pulsations in solar and stellar flares // Plasma Physics and Controlled Fusion, 2019. V. 61. 014024. P. 9.

10. Куприянова Е.Г., Колотков Д.Ю., Накаряков В.М., Кауфман А.С. Квазипериодические пульсации в солнечных и звездных вспышках. Обзор // Солнечно-земная физика. 2020. Т. 6. № 1. С. 3.

11. Zavershinskii D.I., Kolotkov D.Y., Nakariakov V.M., Molevich N.E., Ryashchikov D.S. Formation of quasi-periodic slow magnetoacoustic wave trains by the heating/cooling misbalance // Physics of Plasmas, 2019. V. 26. 082113.

12. Kolotkov D.Y., Nakariakov V.M., Moss G., Shellard P. Fast magnetoacoustic wave trains: from tadpoles to boomerangs // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 2021. V. 505. P. 3505-3515.

13. Krishna Prasad S., Banerjee D., Van Doorselaere T. Frequency-dependent in propagating slow magneto-acoustic waves // The Astrophysical Journal, 2014. V. 789. P. 118.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2024, vol. 13, no. 1, pp. 11–15

QUASI-PERIODIC OSCILLATIONS IN A RAREFIED HIGH-TEMPERATURE PLASMA CAUSED BY THE DISPERSION OF ACOUSTIC WAVES

D.B. Bembitov^{1,}, N.K. Shividov¹, B.B. Mikhalyaev¹*

¹*Kalmyk State University named after B.B. Gorodovikov; Elista, Pushkin str., 11, 358000, Russia*

**e-mail: dbembitov@gmail.com*

Received November 20, 2023; revised November 20, 2023; accepted January 23, 2024

Based on the effects of thermal conductivity and heating/radiation losses, the dispersion of acoustic waves in a rarefied high-temperature plasma is studied using the example of the plasma of the solar corona. For the radiation loss function, an analytical approximation is used, based on the values found using the CHIANTI code. It is shown that the appearance of quasi-periodic oscillations can be explained by the specific properties of dispersion associated with the presence of a minimum group velocity in the space of wave numbers. The wavelet spectrum of acoustic vi-

brations in this case has a structure called “a boomerang”. A procedure for calculating periods using the constructed boomerang curve is proposed. It is assumed that the initial plasma disturbance has the form of a localized pulse having high dispersion qualities due to its wide spectrum. This approach has grounds, it is known, for example, that various kinds of non-stationary processes in the solar corona are generated under the action of short-term pulses from convective cells. The spectrum of the time signal considered at some point of observation is continuous, and the periods are determined based on the local maxima available in the spectrum. In this sense, the concept of quasi-periodic oscillations differs from the traditional one, which refers to the presence of a finite or countable number of periods between which there is a certain relationship. Calculations are carried out on the example of high-temperature plasma of the solar corona, where quasi-periodic oscillations are observed everywhere and can serve as a tool for studying the physical properties of coronal plasma.

Keywords: plasma, thermal conductivity and radiation of the plasma, acoustic waves, dispersion and damping of waves, quasi-periodic oscillations.

REFERENCES

1. *Bembitov D.B., Shividov N.K., Mihalyaev B.B.* Akusticheskie volny v razrezhennoj vysokotemperaturnoj plazme. [Acoustic waves in rarefied high-temperature plasma]. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2022. Vol. 11. No. 4. P. 288 (in Russian).
2. *Derteev S., Shividov N., Bembitov Dz., Mikhalyaev B.* Damping and dispersion of non-adiabatic acoustic waves in a high-temperature plasma: A radiative-loss function. *Physics*, 2023. Vol. 5. P. 215.
3. *Del Zanna G., Dere K.P., Young P.R., Landi E.* CHIANTI – An atomic database for emission lines. XVI. Version 10, further extensions. *The Astrophysical Journal*, 2021. VI. 909. P. 38.
4. *De Moortel I.* Longitudinal waves in coronal loops. *Space Science Reviews*, 2009. Vol. 149. P. 65.
5. *Wang T.J.* Waves in solar coronal loops / Low-frequency waves in space plasmas. / Ed. by Andreas Keiling, Dong-Hun Lee, Valery Nakariakov. *Geophys. Monograph Series*. Wiley, 2016. Vol. 216. P. 395.
6. *De Moortel, I., Nakariakov, V.M.* 2012, Magneto-hydrodynamic waves and coronal seismology: an overview of recent results. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*. Vol. 370. P. 3193.
7. *Ginzburg V.L.* Ob obshchej svyazi mezhdu pogloshcheniem i dispersiej zvukovyh voln [On the general relationship between absorption and dispersion of sound waves]. *Akusticheskij zhurnal*, 1955. Vol. 1. Iss. 1. P. 31 (in Russian).
8. *Belov S.A., Molevich N.E., Zavershinskii D.L.* Dispersion of slow magnetoacoustic waves in the active region fan loops introduced by thermal misbalance. *Solar Physics*, 2021. Vol. 296. P. 122.
9. *Nakariakov V.M., Kolotkov D.Y., Kupriyanova E.G., Mehta T., Pugh C.E., Lee D.-H., Broomhall A.-M.* Non-stationary quasi-periodic pulsations in solar and stellar flares. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 2019. Vol. 61. 014024. P. 9.
10. *Kupriyanova E.G., Kolotkov D.Yu., Nakaryakov V.M., Kaufman A.S.* Kvaziperiodicheskie pul'sacii v solnechnyh i zvezdnyh vspyskakh. Obzor [Quasiperiodic pulsations in solar and stellar flares. Review]. *Solnechno-zemnaya fizika*, 2020. Vol. 6. No. 1. P. 3 (in Russian).
11. *Zavershinskii D.I., Kolotkov D.Y., Nakariakov V.M., Molevich N.E., Ryashchikov D.S.* Formation of quasi-periodic slow magnetoacoustic wave trains by the heating/cooling misbalance. *Physics of Plasmas*. 2019. Vol. 26. P. 082113.
12. *Kolotkov D.Y., Nakariakov V.M., Moss G., Shellard P.* Fast magnetoacoustic wave trains: from tadpoles to boomerangs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2021. Vol. 505. Pp. 3505–3515.
13. *Krishna Prasad S., Banerjee D., Van Doorselaere T.* Frequency-dependent in propagating slow magneto-acoustic waves. *The Astrophysical Journal*, 2014. Vol. 789. P. 118.

УДК.539.412, 539.1.09

ВЫБОР АДЕКВАТНЫХ ПОТЕНЦИАЛА И МЕТОДОВ РАСЧЕТА КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ АКСИАЛЬНО КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

Н.П. Калашиников^{1,*}, А.С. Ольчак^{1,**}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Москва, 115409, Россия

*e-mail: kalash@mephi.ru

**e-mail: asolchak@mephi.ru

Поступила в редакцию: 18.01.2024

После доработки: 19.01.2024

Принята к публикации: 06.02.2024

В работе рассматривается движение релятивистских частиц (электронов) вдоль плотноупакованных цепочек атомов в монокристаллах (аксиальное каналирование). Движение электронов рассматривается в сопутствующей системе отсчета (ССО), которая сама движется со скоростью, равной продольной оси каналирования компоненте скорости каналированной частицы. В ССО движение аксиально-каналированной частицы является двумерным (плоским), причем для электронов с энергиями до нескольких гигаэлектрон-вольт оно будет нерелятивистским, как в атоме водорода. Квантовые характеристики движения определяются энергией частицы (она играет роль массы электрона в двумерном «атоме»), а также параметрами усредненного потенциала атомной цепочки, зависящими от кристаллографического направления и химического состава кристалла. Аксиальное каналирование вполне можно рассматривать как уникальную модель релятивистского двумерного атома с управляемыми параметрами. В работе показано, что основные характеристики квантовых состояний поперечного движения частиц при аксиальном каналировании слабо чувствительны к функциональной зависимости параметров усредненного потенциала от поперечных координат. Для расчета таких характеристик удобно использовать приближенный метод квантования Бора, позволяющий получить результат аналитически. Модифицированный метод квантования Бора можно применить для расчета характеристик поперечного движения, выходящего даже в ССО за рамки нерелятивистского приближения. В работе рассчитаны энергетические спектры допустимых состояний поперечного орбитального движения для нескольких вариантов модельных аксиально-симметричных потенциалов. Показано, что, несмотря на различия в структуре, средние расстояния между энергетическими уровнями слабо нечувствительны к выбору модели потенциала. Найдены энергии уровней как для случая, когда для описания поперечного движения в ССО применимо нерелятивистское приближение, так и в ситуации, выходящей за рамки нерелятивистского приближения.

Ключевые слова: когерентное взаимодействие, каналирование, монокристалл, сопутствующая система отсчета, электромагнитное излучение, квантовая механика, гамма-излучение.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.312

EDN GVIWB

ВВЕДЕНИЕ

В этой статье авторы продолжают систематическое рассмотрение движения релятивистских частиц вдоль выделенных направлений в монокристаллах (каналирование). В предшествующей публикации [1] обсуждался выбор потенциала для описания и расчета квантовых характеристик поперечного движения заряженной частицы в режиме плоскостного каналирования. В настоящей статье анализируется осевое (аксиальное) каналирование, когда электроны движутся по спиралевидным траекториям

вокруг цепочек атомов, описываемых усредненным аксиально симметричным потенциалом. В поперечной направлению каналирования плоскости движение каналированных электронов является орбитальным и финитным, подобно движению электронов в атомах, что позволяет рассматривать такое движение как уникальную исследовательскую модель релятивистского двумерного атома с управляемыми параметрами, поскольку характеристики движения электрона в осевом канале задаются его релятивистской энергией (она играет роль массы электрона в двумерном «атоме» и в эксперименте ее

ВЫБОР АДЕКВАТНЫХ ПОТЕНЦИАЛА И МЕТОДОВ РАСЧЕТА КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ АКСИАЛЬНО КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

можно менять, управляя этой массой), а также параметрами усредненного потенциала атомной цепочки, которые зависят от выбора кристаллографического направления и химического состава кристалла.

Особенность предложенного авторами подхода состоит в сочетании нескольких взаимодополняющих аналитических методов описания движения релятивистских микрочастиц в симметричных потенциалах для получения адекватных расчетных результатов без обращения к непрозрачным численным методам. В комплект применяемых методов входят следующие.

- Использование сопутствующей системы отсчета (ССО), которая сама движется со скоростью, равной продольной оси каналирования компоненте скорости каналированной частицы. В ССО движение аксиально-каналированной частицы является двумерным (плоским). Для электронов с энергиями до нескольких гигаэлектрон-вольт оно будет нерелятивистским, но для больших энергий нерелятивистское приближение в ССО перестает быть допустимым.

- Использование полуклассических методов квантования Бора и Бора–Зоммерфельда, позволяющих аналитически рассчитать спектр разрешенных состояний поперечного движения как в плоскостном, так и в аксиальном случаях. Эти методы квантования можно расширить, сделав их применимыми даже для случая, когда поперечное движение перестает быть нерелятивистским даже в ССО.

- Использование классического и полуклассического приближений для аналитического расчета заселенностей квантовых состояний поперечного движения и интенсивности жесткого электромагнитного излучения, возникающего при переходах между этими состояниями.

АЛГОРИТМ РАСЧЕТА УСРЕДНЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА ПРИ АКСИАЛЬНОМ КАНАЛИРОВАНИИ И КВАНТОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВИЖЕНИЯ В СОПУТСТВУЮЩЕЙ СИСТЕМЕ ОТСЧЕТА

Расчет усредненного аксиально-симметричного потенциала цепочки атомов можно выполнить, усреднив по продольному направлению z объемную зарядовую плотность $\rho(|\vec{r}'|)$ составляющих ее атомов (ионов):

$$\langle \rho(r) \rangle = \int dz \rho(|\vec{r}'|)/d, \quad (1)$$

где d – межатомное расстояние для выбранного кристаллографического направления; аргумент

r в усредненной зарядовой плотности – расстояние до оси каналирования, радиус-вектор \vec{r}' в подинтегральном выражении для зарядовой плотности атома отсчитывается от положения ядра атома (иона).

Чтобы найти усредненный потенциал цепочки атомов (точнее – потенциальную энергию $U(r)$ электрона с зарядом e в поле, созданном усредненной зарядовой плотностью (2)), придется решить уравнение Пуассона в цилиндрических координатах [2]:

$$\Delta U(r) = -e \langle \rho(r) \rangle / \epsilon_0 \quad (2)$$

В ССО волновые функции $\psi_{n,l}(r)$ поперечного движения частицы с релятивистской энергией $E \gg mc^2$ в двумерном потенциальном канале $U(r)$ задаются решениями релятивистского уравнения Шредингера (также в цилиндрических координатах)

$$(\hbar^2 c^2 / 2E) \Delta \psi_{n,l}(r) = (\epsilon_n - U(r)) \psi_{n,l}(r), \quad (3)$$

где ϵ_n – собственные значения энергий поперечного движения, определяемые главным квантовым числом n и соответствующие собственным функциям $\psi_{n,l}(r)$ уравнения (3); l – орбитальное квантовое число, определяющее направленный вдоль оси каналирования квантованный момент импульса электрона L_l при заданной главным квантовым числом n энергии ϵ_n поперечного движения.

Сложность состоит в том, что и посчитать интеграл (1) с похожей на реальную плотностью распределения заряда в атоме, и тем более решить потом уравнения (2) и (3) удастся только в специальных функциях [2] или численно, да и сама зарядовая плотность отдельных атомов $\rho(|\vec{r}'|)$ считается только численно и/или задается в той или иной приближенной модели. Если мы хотим уловить общие закономерности и характеристики потенциала и движения электронов в нем, удобнее и проще сразу взять модельную форму потенциала $U(r)$, похожую по параметрам на численно считаемую, но позволяющую далее работать с ней аналитически.

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ В АКСИАЛЬНОМ КАНАЛЕ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

К сожалению, моделей, допускающих аналитический квантовый расчет по схеме (2), (3), не так много. Можно, например, взять потенциальную двумерную «кулоновскую» функцию

$$U(\rho) = -b \frac{Ze^2 R_{T-F}}{\rho a}, \quad (4)$$

где R_{T-F} – радиус Томаса–Ферми, требующий сложного расчета для каждого типа атомов; b – подгоночный, безразмерный параметр порядка единицы.

Расходящаяся в нуле функция (1) весьма далека от реального усредненного потенциала цепочки атомов, который, при учете тепловых колебаний ионного остова кристалла, обязан быть ограничен в нуле, однако некоторые характерные свойства движения в режиме аксиального каналирования она позволяет выявить. Анализ решения волнового уравнения (3) с потенциалом (4)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l^2}{r^2} R \right) = (U(r) - \varepsilon) R \quad (5)$$

можно найти, например, в [3], где показано, что энергия частицы в двумерном потенциале (4) может принимать значения

$$\varepsilon_n = - \frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 \left(n + |l| + \frac{1}{2} \right)^2}, \quad (6)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$, $|l| = 0, 1, 2, \dots$, что лишь незначительно отличается от известной формулы для обычного трехмерного атома водорода (формула Бора–Зоммерфельда, [4]).

В [3] приведены также волновые функции состояний с квантовыми числами n, l :

$$\Psi_{nl}(r, \varphi) = e^{il\varphi} \frac{1}{\sqrt{r}} e^{-\gamma \frac{r}{a}} \left(\frac{r}{a} \right)^{|l| + \frac{1}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \left(\frac{r}{a} \right)^k, \quad (7)$$

однако дальнейший аналитический расчет характеристик движения и сопровождающего его электромагнитного излучения в квантовом подходе даже с таким упрощенным потенциалом, как (4), практически невозможен.

ПРИМЕНЕНИЕ ПРАВИЛА КВАНТОВАНИЯ БОРА-ЗОММЕРФЕЛЬДА ДЛЯ РАСЧЕТА КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ДВИЖЕНИЯ ПРИ АКСИАЛЬНОМ КАНАЛИРОВАНИИ

Если мы хотим уловить общие закономерности и характеристики движения электронов в поле усредненного аксиально-симметричного потенциала, разумно воспользоваться приближенными аналитическими методами расчета квантовых состояний. Для двумерного движения таким упрощенным методом является правило квантования Бора [5–6], предложенное еще до создания полноценной квантовой механики и успешно позволившее точно рассчитать спектр

энергетических состояний атома водорода. Суть правила Бора – энергии разрешенных квантовых состояний орбитального движения в центральном поле соответствуют энергиям движения электронов по круговым классическим орбитам с моментами импульса L_n , кратными целому числу постоянных Планка:

$$L_n = m v_n r_n = \hbar n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8)$$

Причем орбитальные скорости v_n и радиусы r_n круговых орбит подчиняются классическому условию

$$m v_n^2 / r_n = -dU(r)/dr, \quad (9)$$

где производная $dU(r)/dr$ берется в точке $r = r_n$ и равна силе, действующей на частицу, движущуюся по круговой орбите радиуса r_n в поле $U(r)$.

Круговой орбите радиуса r_n соответствует максимально возможный момент импульса ($l = n$) при данной энергии движения ε_n , которая определяется условием

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= U(r_n) + m v_n^2 / 2 = \\ &= U(r_n) + (r_n / 2) / dU(r)/dr|_{r=r_n}. \end{aligned} \quad (10)$$

Кроме круговых орбит, электроны с той же энергией ε_n могут иметь вытянутые орбиты с меньшими моментами импульса $L_l = \hbar l$ (l – орбитальное квантовое число, $0 < l < n$).

Для кулоновского потенциала притяжения $U(r) = -a/r$ условия (8), (10), как в трехмерном, так и в двумерном случае, приводят к известным [5–6] значениям энергий квантовых состояний (как в атоме водорода):

$$\varepsilon_n = -a/2r_n = -a^2/m\hbar^2 n^2. \quad (11)$$

Однако, как уже отмечалось, расходящийся в нуле кулоновский потенциал мало похож на реальный усредненный потенциал атомной цепочки, который должен быть ограничен в нуле и скорее напоминать геометрический конус:

$$U(r) = -U_0 \exp(-r/R), \text{ или } U = U_0 r/R, \quad r < R, \quad (12)$$

где R – характерный радиус экранирования кулоновского потенциала ядра атома (радиус атома).

Для потенциалов, подобных (12), которые, в отличие от кулоновского, ограничены снизу некоторым минимальным значением, правило Бора–Зоммерфельда (8) следует модифицировать так, чтобы учесть квантовую невозможность состояния покоя, диктуемую принципом неопределенности [4]:

$$L_n = \hbar(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

ВЫБОР АДЕКВАТНЫХ ПОТЕНЦИАЛА И МЕТОДОВ РАСЧЕТА КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ АКСИАЛЬНО КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

Заметим, что для параболического потенциала $U(r) = kr^2/2$ условия (10), (13) приводит к результату, соответствующему точным решениям уравнения Шредингера $\varepsilon_n = n \hbar(k/m)^{1/2}$. Можно надеяться, что применение правил (10), (13) даст адекватные значения и для потенциалов, приближенных к реальному усредненному потенциалу атомных цепочек, вдоль которых движутся каналированные электроны. В частности, для «конусообразного» потенциала (12) условия квантования (10), (13) приводят к трансцендентному уравнению

$$\begin{aligned} z_n^{3/2} \exp(-z_n/2) &= bn; \\ z_n &= r_n/R; b = \hbar c(EU_0)^{-1/2}/R, \end{aligned} \quad (14)$$

которое для подбарьерных состояний с радиусами орбит $r_n < R$ ($z_n < 1$) имеет простые аналитические решения: $r_n = R(bn)^{2/3}$. Параметр $b = \hbar c(EU_0)^{-1/2}/R$ при релятивистских энергиях электронов всегда мал: $b \ll 1$. Заметим, что число состояний с радиусами орбит $r_n < R$ примерно соответствует числу состояний в плоскостном потенциале той же глубины U_0 : $N \sim (EU_0)^{1/2} R / \hbar c$.

Поперечные энергии ε_n в потенциале (12) для подбарьерных каналированных состояний с радиусами орбит $r_n < R$ определяются выражением, похожим на то, что задает энергии состояний в «треугольном» потенциале при плоскостном каналировании [1]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= mv_n^2/2 + U(r_n) = 3\gamma U_0 r_n / 2R = \\ &= (3/2 mc^2)(n \hbar c EU_0 / R)^{2/3}. \end{aligned} \quad (15)$$

АКСИАЛЬНОЕ КАНАЛИРОВАНИЕ ЧАСТИЦ СВЕРХВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ – «ДВУМЕРНЫЙ РЕЛЯТИВИСТСКИЙ АТОМ»

Успешное применение правила квантования Бора–Зоммерфельда к модельным потенциалам дает надежду, что если модифицировать это правило применительно к релятивистским энергиям поперечного движения, оно даст верную оценку для спектра и числа связанных состояний и в этом случае. Выход за рамки нерелятивистского приближения даже в ССО неизбежен при увеличении энергии электрона E до нескольких гигаэлектрон-вольт, когда поперечные импульсы движущихся в канале частиц достигают релятивистских значений:

$$cp(x) = (2E(\varepsilon_n - U(x))^{1/2} \sim (EU_0)^{1/2} > mc^2. \quad (16)$$

Корректировка правила квантования (10), (13) для релятивистских энергий движения электрона в ССО кажется очевидной – классическое условие устойчивости орбиты радиуса r заменить на вариант, применимый и в релятивистском случае [5]:

$$R = cp_t / |edU/dr| = Rcp_t / \gamma eU_0, \quad (17)$$

где p_t – поперечный импульс электрона в сопутствующей системе отсчета. Далее применяем правило квантования Бора для момента импульса

$$L_n = p_t r_n = \gamma eU_0 r_n^2 / Rc = n \hbar, \quad (18)$$

находим радиусы разрешенных орбит,

$$r_n = \sim (n \hbar Rc / \gamma eU_0)^{1/2}, \quad (19)$$

и энергии разрешенных энергетических состояний с квантовыми числами n :

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= cp_n + eU(r_n) = \\ &= 2\gamma eU_0 r_n / R = 2(n \hbar c \gamma eU_0 / R)^{1/2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Заметим, что релятивистским энергиям поперечного движения в любом случае соответствуют большие квантовые числа $n \gg 1$, при которых добавка $\hbar/2$ в правиле квантования (18) перестает быть существенной, а расстояния между уровнями энергии при больших n

$$d\varepsilon_n / dn = \sim (\hbar c \gamma eU_0 / Rn)^{1/2} \quad (21)$$

убывают быстрее, чем при малых n ($d\varepsilon_n / dn \sim n^{-1/3}$, см. (15)).

Общее число связанных состояний в потенциальном канале при ультрарелятивистских энергиях может достигать

$$N \sim R \gamma eU_0 / \hbar c. \quad (22)$$

ВЫВОДЫ И ЗАВЕРШАЮЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Выполненное рассмотрение показывает, что основные характеристики квантовых состояний поперечного движения релятивистских частиц при осевом каналировании также слабо чувствительны к функциональной зависимости усредненного потенциала от поперечных координат, как и при каналировании плоскостном. Точное воспроизведение этой зависимости методами численного усреднения сложных потенциалов атомов и ионов решетки нецелесообразно. Достаточно ограничиться выбором простого, но реалистичного модельного потенциала, например конусообразного. Для выполнения такого расчета также не обязательно использовать сложные точные уравнения квантовой ме-

ханики (релятивистское уравнение Шредингера, решение которого возможно лишь численно или в специальных функциях), но воспользоваться модифицированным приближенным методом квантования Бора, позволяющим сделать аналитический расчет основных характеристик квантовых состояний [7–8]. Этот метод удастся применить и для рассмотрения поперечного движения, выходящего за рамки нерелятивистского приближения.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках Программы стратегического академического лидерства «ПРИОРИТЕТ – 2030».

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Калашиников Н.П., Ольчак А.С. Выбор адекватного потенциала взаимодействия для описания плос-

костного каналирования релятивистских частиц // Вестник НИЯУ «МИФИ», 2024. Т. 13. № 1 [в печати].

2. Калашиников Н.П. Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах. М.: Атомиздат, 1981. 224 с.

3. Воробьев С.А. Каналирование электронных пучков. М.: Энергоатомиздат, 1984. 96 с.

4. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука. ГРФМЛ, 1989. 768 с.

5. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика. Т. II. Теория поля. М.: Наука. ГРФМЛ, 1988. 512 с.

6. Фано У., Фано Л. Физика атомов и молекул. М.: Наука. ГРФМЛ, 1980. 658 с.

7. Калашиников Н.П., Ольчак А.С. Классическое и квантовое описания эффекта каналирования как взаимно дополняющие приближения // Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2022. № 10. С. 107–112.

8. Калашиников Н.П., Ольчак А.С. Классический подход для описания излучения каналированных частиц // Вестник НИЯУ «МИФИ», 2021. Т.10. № 2. С. 97–103.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2024, vol. 13, no. 1, pp. 16–21

SELECTING ADEQUATE CAPACITY AND METHODS CALCULATION OF QUANTUM STATES OF AXIALLY CHANNLED ELECTRONS AT HIGH ENERGIES

N.P. Kalashnikov^{1,*}, A.S. Olchak^{1,**}

¹National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409, Russia

*e-mail: kalash@mephi.ru

**e-mail: asolchak@mephi.ru

Received January 18, 2024; revised January 19, 2024; accepted February 6, 2024

The work examines the movement of relativistic particles (electrons) along close-packed chains of atoms in single crystals (axial channeling). The motion of electrons is considered in the accompanying reference frame (CFR), which itself moves with a speed equal to the longitudinal axis of the channeling and the velocity component of the channeled particle. In SSO, the motion of an axially channeled particle is two-dimensional (flat), and for electrons with energies up to several GeV it will be non-relativistic, as in the hydrogen atom. The quantum characteristics of motion are determined by the energy of the particle (it plays the role of the mass of the electron in a two-dimensional “atom”), as well as by the parameters of the average potential of the atomic chain, which depend on the crystallographic direction and chemical composition of the crystal. Axial channeling can be considered as a unique model of a relativistic two-dimensional atom with controlled parameters. The work shows that the main characteristics of quantum states of transverse motion of particles during axial channeling are weakly sensitive to the functional dependence of the parameters of the average potential on transverse coordinates. To calculate such characteristics, it is convenient to use Bohr’s approximate quantization method, which allows one to obtain the result analytically. The modified Bohr quantization method can be used to calculate the characteristics of transverse motion, which even goes beyond the nonrelativistic approximation even in SSO. In this work, the energy spectra of permissible states of transverse orbital motion are calculated for several variants of model axially symmetric potentials. It is shown that,

ВЫБОР АДЕКВАТНЫХ ПОТЕНЦИАЛА И МЕТОДОВ РАСЧЕТА КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ АКСИАЛЬНО КАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

despite differences in structure, the average distances between energy levels are slightly insensitive to the choice of potential model. The level energies were found both for the case when a nonrelativistic approximation is applicable to describe the transverse motion in the SSO, and in a situation that goes beyond the nonrelativistic approximation.

Keywords: coherent interaction, channeling, single crystal, accompanying reference frame, electromagnetic radiation, quantum mechanics, gamma radiation.

REFERENCES

1. *Kalashnikov N.P., Ol'chak A.S.* Vybor adekvatnogo potentsiala vzaimodejstviya dlya opisaniya ploskostnogo kanalirovaniya relyativistskih chastic. [Selecting adequate interaction potential to describe planar channeling of relativistic particles]. Vestnik NI-YAU «MIFI», 2024. Vol. 13. No. 1 [in the press].
2. *Kalashnikov N.P.* Kogerentnye vzaimodejstviya zaryazhennyh chastic v monokristallah [Coherent interactions of charged particles in single crystals]. Moscow, Atomizdat Publ., 1981. 224 p.
3. *Vorob'ev S.A.* Kanalirovanie elektronnyh puchkov [Channeling of electron beams]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1984. 96 p.
4. *Landau L.D., Livshic E.M.* Teoreticheskaya fizika. T. III. Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya. [Theoretical physics. vol. III. Quantum mechanics. Non-relativistic theory]. Moscow, Nauka. GRFML Publ., 1989. 768 p.
5. *Landau L.D., Livshic E.M.* Teoreticheskaya fizika. T. II. Teoriya polya. [Theoretical physics. Vol. II. Field theory]. Moscow, Nauka. GRFML Publ., 1988. 512 p.
6. *Fano U., Fano L.* Fizika atomov i molekul. [Physics of atoms and molecules]. Moscow, Nauka. GRFML Publ., 1980. 658 p.
7. *Kalashnikov N.P., Ol'chak A.S.* Klassicheskoe i kvantovoe opisaniya effekta kanalirovaniya kak vzaimno dopolnyayushchie priblizheniya [Classical and quantum descriptions of the channeling effect as mutually complementary approximations]. Poverhnost', rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya, 2022. No. 10. Pp. 107–112 (in Russian).
8. *Kalashnikov N.P., Ol'chak A.S.* Klassicheskij podhod dlya opisaniya izlucheniya kanalirovannyh chastic [Classical approach to describe the radiation of channeled particles]. Vestnik NIYaU MIFI, 2021. Vol. 10. No. 2. Pp. 97–103 (in Russian).

УДК 004.62

МНОГОМЕРНЫЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ В ЗАДАЧЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОПАДАНИЯ КРЕДИТНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ В ЗОНУ РИСКА

Е.П. Акишина¹, В.В. Иванов^{1,2}, А.В. Крянев^{1,2*}, А.С. Приказчикова²

¹Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, 141980, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

*e-mail: AVKryanev@mephi.ru

Поступила в редакцию: 10.12.2023

После доработки: 10.12.2023

Принята к публикации: 26.12.2023

Исследование экономических процессов базируется на изучении большого числа параметров. В связи с чем для проведения анализа исследуемых явлений и решения прогностических задач возникает необходимость применения методов многомерного анализа данных. В статье рассматривается проблема идентификации подозрительных, с точки зрения финансовой состоятельности, кредитных организаций, осуществляющих свою деятельность на российском рынке. Настоящее исследование нацелено на разработку методики многомерного анализа данных для выявления подозрительных кредитных организаций и прогнозирования отзыва у них лицензий. Для решения указанной задачи предлагается использовать иерархические и итерационные методы кластерного анализа, а также метод главных компонент. На основе этих методов разработана методика формирования зоны риска, позволяющая прогнозировать отзыв лицензий у кредитных организаций. Для определения количества кластеров применялся метод кластеризации Варда, а также метод локтя, метод силуэтов, метод Дэвиса–Боулдина. Совместное использование методов кластерного анализа и метода главных компонент позволили продемонстрировать робастность предложенной методики. В настоящем исследовании использовались данные формы банковской отчетности № 101.

Ключевые слова: методы кластерного анализа, метод k -средних, метод главных компонент, евклидово расстояние, кредитная организация, отзыв лицензий.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.302

EDN HUDHFW

ВВЕДЕНИЕ

Исследование экономических процессов базируется на изучении большого числа параметров. В связи с чем для проведения анализа исследуемых явлений и решения прогностических задач возникает необходимость применения методов многомерного анализа данных [1].

В настоящей работе для исследования деятельности банков на российском рынке использовались методы кластерного анализа и метод главных компонент.

Можно выделить два вида методов кластерного анализа: иерархические и итерационные. Иерархические методы предназначены для разбиения исходных данных на группы (кластеры) таким образом, чтобы элементы, входящие в одну группу, были максимально «схожи», а элементы из разных групп были максимально «отличными» друг от друга. К итерационным методам относится, в частности, метод k -сред-

них, с помощью которого вычисляются характеристики кластеров [2].

Авторами работы [3] показано, что совместное применение методов кластерного анализа и метода главных компонент [4] позволяет существенно сократить размерность анализируемых данных без заметной потери качества информации.

Настоящее исследование нацелено на разработку методики многомерного анализа данных для выявления подозрительных кредитных организаций и прогнозирования отзыва у них лицензий.

1. ПРИМЕНЕНИЕ КЛАСТЕРНОГО АНАЛИЗА

Ранее, в работах [5, 6], нами анализировалась банковская сфера в России, а именно незаконная активность отдельных ее звеньев. Признаковое пространство, характеризующее операционную деятельность банков, исследовалось с

МНОГОМЕРНЫЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ В ЗАДАЧЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОПАДАНИЯ КРЕДИТНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ В ЗОНУ РИСКА

помощью искусственных нейронных сетей и деревьев решений.

В настоящей работе анализировались данные о 469 кредитных организациях (из которых 111 банки с отозванной лицензией) с января 2019 по декабрь 2021 г., выборка содержит 22 финансовых показателя из формы банковской отчетности № 101. Кроме того, в выборке присутствует категориальный признак «Отзыв» («1» – у банка отозвана лицензия, «0» – действующий банк) и поле «Причина», в котором указана причина отзыва лицензии у банка в случае прекращения его деятельности.

1.1. Оценка количества кластеров

На первом шаге исследования для проведения кластеризации всех объектов определим подходящее количество кластеров. Для этого применим метод иерархической кластеризации Варда [7]. В этом методе используется мера сходства между объектами. Примем в качестве такой меры – евклидово расстояние, которое является геометрическим расстоянием в многомерном пространстве между объектами, и вычисляется следующим образом (1):

$$S(x, y) = \sum_i \sqrt{(x_i - y_i)^2}, \quad (1)$$

где x_i, y_i – координаты точек (объектов), между которыми рассчитывается расстояние, $i = 1, 2, \dots, k, k$ – количество измерений [8].

В результате применения метода Варда в программе Statistica [9] ко всем объектам исследования построена дендрограмма (рис. 1), на которой видно, что при межкластерном расстоянии 60 (красная линия) объекты образуют четыре кластера.

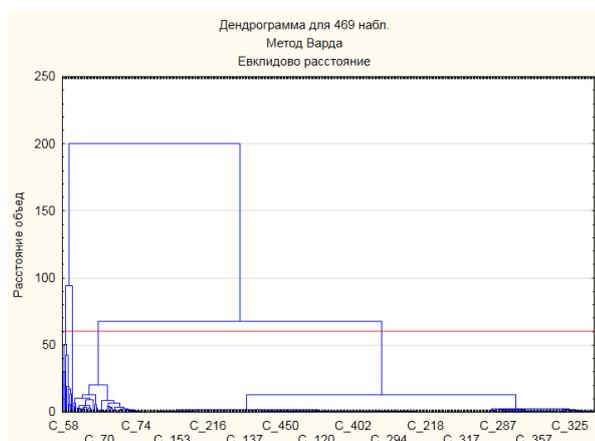


Рис. 1. Применение метода Варда

Кроме метода Варда, нами были рассмотрены метод локтя, метод силуэтов, метод Девиса-Боулдина [10]. Результаты применения этих методов и метода Варда представлены в табл. 1.

Таблица 1. Оценка числа кластеров разными методами

Метод оценки числа кластеров	Количество кластеров
Метод Варда	4
Метод локтя	6
Метод силуэтов	2
Метод Девиса-Боулдина	5

Так как методы локтя, силуэтов и Девиса-Боулдина не дали однозначного ответа для оценки числа кластеров, остановим свой выбор на методе Варда и примем это число за 4. Далее перейдем к методу k -средних.

1.2. Применение метода кластеризации k -средних и формирование зоны риска

В методе k -средних кластерного анализа необходимо заранее задать число кластеров, для чего используем результат метода Варда – четыре. Из исходного множества данных случайным образом выбираются k -наблюдений, которые будут служить начальными центрами кластеров. Для каждого наблюдения исходных данных определяется ближайший к нему центр. Далее вычисляется центр масс каждого кластера. Затем объекты разбиваются на группы вновь в соответствии с тем, к какому из новых центров каждый объект оказался ближе, оценив это по метрике евклидова расстояния. Таким образом, минимизируется суммарное квадратичное отклонение объектов кластеров от центров этих кластеров:

$$V = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in S_i} (x - \mu_i)^2, \quad (2)$$

где k – число кластеров; S_i – полученные кластеры, $i = 1, 2, \dots, k$, а μ_i – центры масс всех векторов x из кластера S_i [11].

После применения метода k -средних оценим качество разбиения на кластеры, для чего используем критерий различия (t -критерий Стьюдента). Результаты оценки представлены на рис. 2. Значение p (p -уровень статистической значимости) менее чем 0.05 говорит о значимом различии между полученными кластерами.

перемен.	Дисперсионный анализ					
	Между SS	сс	Внутри SS	сс	F	значим. р
Уставный капитал, RUB	280,4523	3	187,5477	465	231,782	0,000000
Чистые активы, RUB	447,0295	3	20,9705	465	3304,147	0,000000
Счета в Банке России, RUB	452,8242	3	15,1758	465	4624,965	0,000000
Коррсчета (НОСТРО), RUB	266,3827	3	201,6173	465	204,791	0,000000
Ценные бумаги, RUB	435,4265	3	32,5735	465	2071,965	0,000000
Кредиты, RUB	444,3893	3	23,6107	465	2917,329	0,000000
Кредиты организациям, RUB	450,2507	3	17,7493	465	3931,915	0,000000
Кредиты физическим лицам, RUB	437,7573	3	30,2427	465	2243,592	0,000000
Кредиты другим банкам (МБК), RUB	229,5782	3	238,4218	465	149,251	0,000000
Основные средства, RUB	379,9812	3	88,0188	465	669,142	0,000000
Учтенные векселя, RUB	344,9544	3	123,0456	465	434,538	0,000000
Прибыль (убыток) до налогообложения, RUB	376,0106	3	91,9894	465	633,569	0,000000
Коррсчета (ЛОРО), RUB	311,1045	3	156,8955	465	307,346	0,000000
Кредиты других банков (МБК), RUB	146,5341	3	321,4659	465	70,654	0,000000
Средства клиентов, RUB	451,0007	3	16,9993	465	4112,242	0,000000
Средства организаций на расчетных счетах, RUB	444,8062	3	23,1938	465	2972,566	0,000000
Депозиты юридических лиц, RUB	444,2574	3	23,7427	465	2900,262	0,000000
Вклады физических лиц, RUB	450,8257	3	17,1744	465	4068,742	0,000000
Облигации, RUB	340,2688	3	127,7312	465	412,911	0,000000
Векселя, RUB	362,2844	3	105,7156	465	531,181	0,000000
Резервы на возможные потери, RUB	378,6928	3	89,3072	465	657,252	0,000000
Капитал, RUB	431,6939	3	36,3061	465	1843,012	0,000000

Рис. 2. Результаты дисперсионного анализа в пакете Statistica при реализации метода *k*-средних

В табл. 2 представлен состав кластеров после проведения первого этапа кластеризации, включающего метод Варда и метод *k*-средних. Из табл. 2 видно, что в кластеры 1, 2 и 3 попали крупные и благонадежные организации.

Таблица 2. Состав кластеров после первого этапа кластерного анализа

№ кластера	Состав
1	ПАО «Сбербанк»
2	АО «Газпром», АО «ВТБ»
3	АО «Альфа-банк», ПАО «Росбанк», АО «Россельхозбанк», ПАО Банк «ФК Открытие», ПАО «Промсвязьбанк», ПАО «Московский кредитный банк», НКО АО «НРД», НКО АО «НКЦ»
4	Остальные банки

Анализ средних значений финансовых показателей объектов для разных кластеров (рис. 3) показал, что средние значения показателей для объектов четвертого кластера значительно ниже значений показателей для других кластеров.

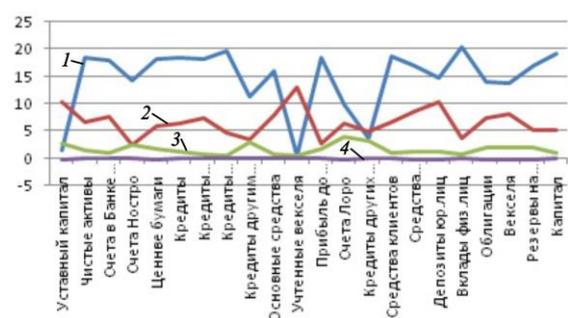


Рис. 3. График средних значений показателей объектов каждого кластера после первого этапа кластеризации: 1 – первый кластер; 2 – второй кластер; 3 – третий кластер; 4 – четвертый кластер

Из табл. 3 видно, что все неблагонадежные объекты сосредоточились в четвертом кластере (111 объектов).

Таблица 3. Количество благонадежных и неблагонадежных объектов после применения методов кластерного анализа на первом этапе

№ кластера	Количество благонадежных	Количество неблагонадежных	Общее количество
1	1	0	1
2	2	0	2
3	8	0	8
4	335	111	446

Таким образом, на первом этапе кластеризации мы можем выделить четвертый кластер, как целевой для дальнейшего анализа, и сосредоточиться на объектах, содержащихся в нем.

Реализуем аналогичную процедуру кластерного анализа теперь для объектов четвертого кластера: применим метод Варда, определим число кластеров и затем применим метод *k*-средних. Указанные ранее шаги кластеризации мы будем последовательно применять к самому многочисленному кластеру до тех пор, пока не получим кластер, который содержит соизмеримое количество благонадежных и неблагонадежных объектов.

В настоящем исследовании было проведено пять этапов кластеризации, по окончании которых осталось 194 объекта, разделенных на семь кластеров. Из табл. 4 видно, что кластер № 1 содержит сбалансированное количество благонадежных и неблагонадежных объектов.

Таблица 4. Количество благонадежных и неблагонадежных объектов после пятого этапа кластеризации

№ кластера	Количество благонадежных	Количество неблагонадежных	Общее количество
1	62	42	104
2	0	3	3
3	14	4	18
4	26	6	32
5	4	2	6
6	7	7	14
7	13	4	17

2. АНАЛИЗ ЗОНЫ РИСКА

На следующем шаге исследования нами проводился анализ первого кластера, полученного на пятой итерации. В данном кластере содержатся 62 благонадежных объекта и 42 неблагонадежных. В связи с этим, в данный кластер попало большинство неблагонадежных объектов, мы назвали объекты первого кластера высокорисковыми, и именно они формируют зону высокого риска.

Далее на основе показателей 42 неблагонадежных объектов строится центроид зоны риска. Центроидом назовем точку в многомерном пространстве, каждая координата которой представляет собой математическое ожидание по каждой переменной. На рис. 4 приведена диаграмма Евклидовых расстояний от центроида зоны риска до всех объектов.

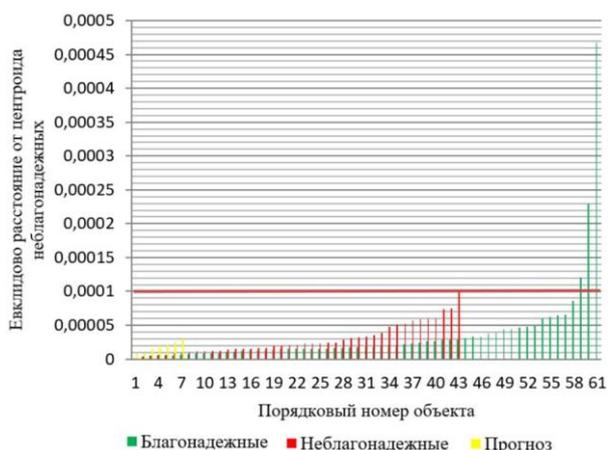


Рис. 4. Диаграмма евклидовых расстояний от центроида зоны риска до всех объектов

Из рис. 4 можно сделать предположение, что все благонадежные объекты, находящиеся на расстоянии меньше, чем 10^{-4} , являются подозрительными. В связи с этим именно указанные объекты должны быть подвергнуты экспертной проверке в первую очередь.

На рис. 5 приведены распределения евклидовых расстояний от центроида зоны риска до всех объектов.

Из рисунка видно, что большинство неблагонадежных объектов сосредоточено в первых пяти интервалах (всего 26 организаций) распределения. Это дает основание полагать, что благонадежные объекты из этих интервалов являются наиболее подозрительными с точки зрения их возможной несостоятельности или вовлеченности в противоправную деятельность.

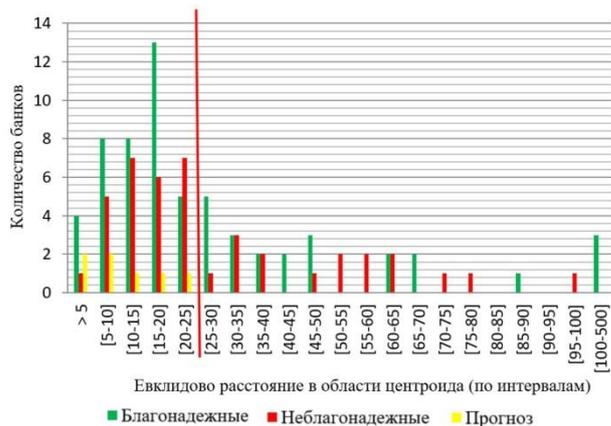


Рис. 5. Распределение евклидовых расстояний в области центроида (исходные данные)

Далее рассматривались два множества организаций: множество всех благонадежных организаций зоны риска и множество организаций, у которых по решению Банка России была отозвана лицензия в период с января 2022 по август 2023 г., всего 15 организаций. В результате пересечения указанных множеств были идентифицированы семь организаций:

$$k_1 = \frac{p_1}{n}, \quad (3)$$

где p_1 – идентифицированные организации; n – организации с отозванной в заданный период лицензией.

Таким образом, с использованием предложенной методики спрогнозировано 46.6 % фактов отзыва банковских лицензий.

Из диаграммы на рис. 4 видно, что все семь идентифицированных организаций (отмечены желтым цветом) оказались в зоне неблагонадежных организаций.

3. ПРИМЕНЕНИЕ КЛАСТЕРНОГО АНАЛИЗА К ДАННЫМ, ПОЛУЧЕННЫМ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ В ЭЛЕКТРОННОМ ВИДЕ И ФОРМИРОВАНИЕ ЗОНЫ РИСКА

В работе [3] показана практическая эффективность методов оценки количества кластеров после проведения метода главных компонент и формирования соответствующих главных компонент (ГК), на основе которых и осуществлялся кластерный анализ.

В основе метода ГК лежат всевозможные линейные преобразования исходных признаков. В результате применения метода к исходным данным сгенерированы 22 компоненты. На рис. 6 представлен график «каменистой осыпи»,

который демонстрирует вклад каждой главной компоненты в совокупную дисперсию. Из рисунка видно, что наибольший вклад дает первая главная компонента, а начиная с шестой компоненты вклад остальных незначителен. Поэтому можно использовать пять главных компонент (из сгенерированных 22), общая совокупность дисперсии которых составляет 96.4 %.

С целью оценки количества кластеров, на которое следует разбить совокупность анализируемых данных, применим к отобранным ГК метод Варда (рис. 7), метод Девиса–Боулдина (рис. 8), метод силуэтов (рис. 9) и метод локтя (рис. 10).

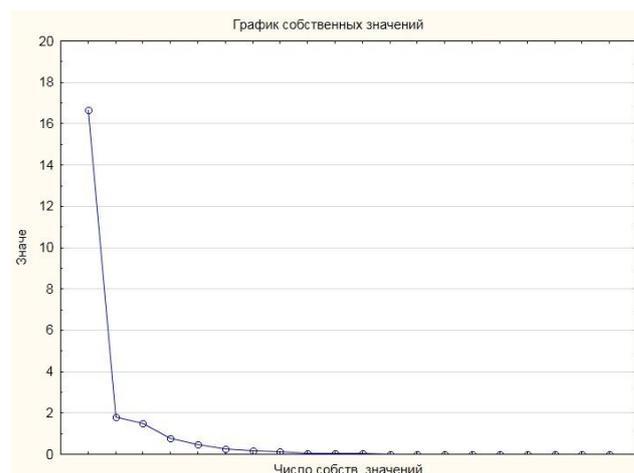


Рис. 6. График «каменистой» осыпи

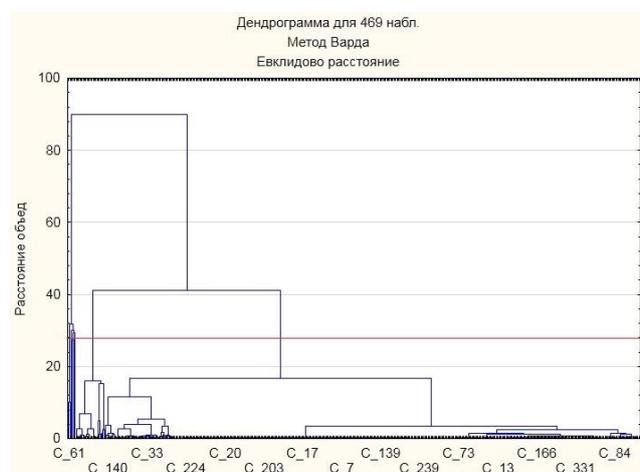


Рис. 7. Применение метода Варда

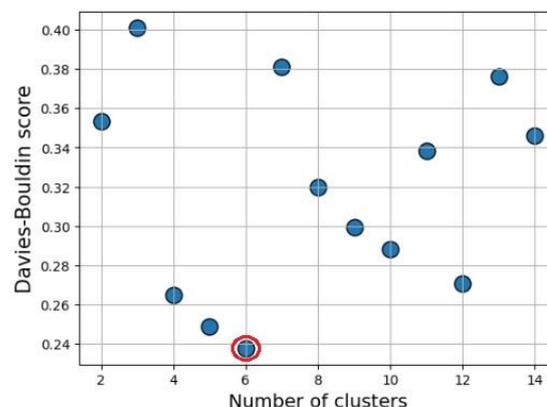


Рис. 8. Применение метода Девиса–Боулдина

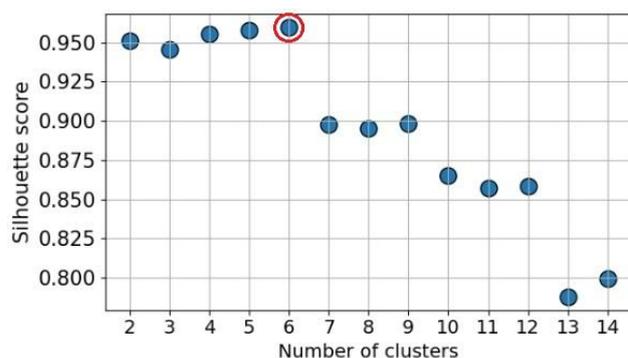


Рис. 9. Применение метода силуэтов

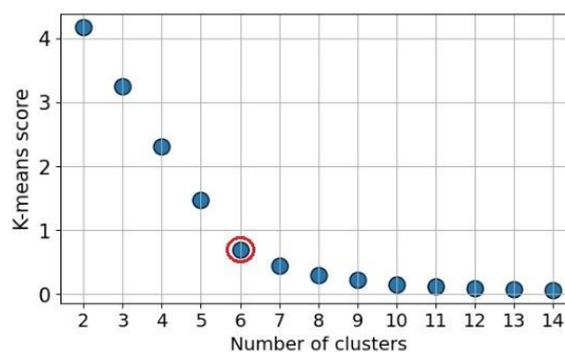


Рис. 10. Применение метода локтя

Результаты отработки методов оценки кластеров с использованием ГК представлены в табл. 5.

Исходя из результатов оценки, проведена кластеризация методом k -средних с числом кластеров 6. Результаты кластерного анализа первого этапа представлены в табл. 6.

Таблица 5. Оценка числа кластеров разными методами (ГК)

Метод оценки числа кластеров	Количество кластеров
Метод Варда	6
Метод локтя	6
Метод силуэтов	6
Метод Девиса–Боулдина	6

**МНОГОМЕРНЫЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ В ЗАДАЧЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ
ПОПАДАНИЯ КРЕДИТНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ В ЗОНУ РИСКА**

Таблица 6. Количество благонадежных и неблагонадежных объектов после применения методов кластерного анализа на первом этапе (ГК)

№ кластера	Количество благонадежных	Количество неблагонадежных	Общее количество
1	2	0	2
2	4	0	4
3	337	123	460
4	1	0	1
5	1	0	1
6	1	0	1

На рис. 11 представлен график средних значений пяти главных компонент для каждого из шести кластеров, из которого видно, что средние значения главных компонент для объектов третьего кластера расположены в зоне нуля.

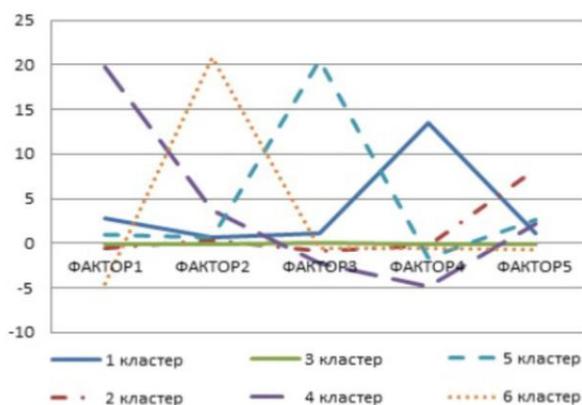


Рис. 11. График средних значений ГК объектов каждого кластера после первого этапа кластеризации

Из табл. 6 видно, что в третий кластер попало максимальное число неблагонадежных кредитных организаций. Повторим вышеописанную процедуру (оценка числа кластеров и кластеризация методом *k*-средних) для объектов третьего кластера. Указанные этапы кластеризации будем последовательно применять к самому многочисленному кластеру (аналогично тому, как делали с исходными данными) до тех пор, пока не получим кластер, который содержит соизмеримое количество благонадежных и неблагонадежных объектов.

Всего было проведено шесть этапов кластеризации, по окончании которых получено четыре кластера. Кластер № 1 (табл. 7) содержит сбалансированное количество благонадежных и неблагонадежных объектов.

Таблица 7. Количество благонадежных и неблагонадежных объектов после шестого этапа кластеризации

№ кластера	Количество благонадежных	Количество неблагонадежных	Общее количество
1	53	28	81
2	18	4	22
3	46	21	67
4	2	1	3

**4. АНАЛИЗ ЗОНЫ РИСКА
УСЕЧЕННЫХ ДАННЫХ**

На заключительном этапе исследования проводился анализ выделенного первого кластера, полученного в третьем разделе настоящей работы. В данном кластере содержатся 53 благонадежных объекта и 28 неблагонадежных. В связи с тем, что 53 благонадежных объектов попали в кластер с большим количеством неблагонадежных объектов, будем считать эти 53 объекта подозрительными. Они и будут формировать так называемую зону риска.

С использованием данных о неблагонадежных объектах строился центроид зоны риска. На рис. 12 приведена диаграмма евклидовых расстояний от центроида до всех объектов. В данном случае в зону высокого риска попадают все объекты (из них 37 благонадежных организаций), евклидово расстояние которых до центроида неблагонадежных менее чем $3 \cdot 10^{-3}$. Отметим, что неблагонадежный объект с евклидовым расстоянием 0.0068 был признан аномальным и не учитывался при формировании зоны риска.

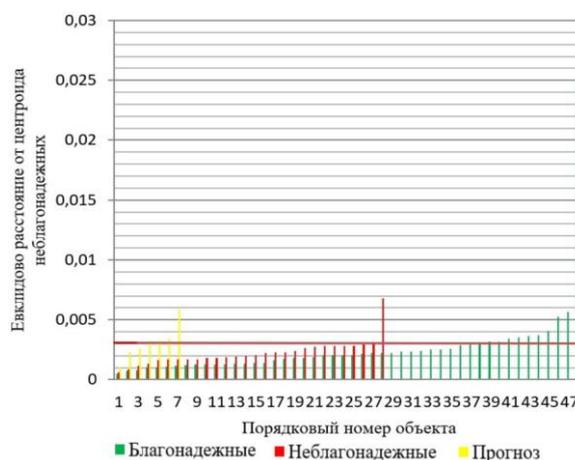


Рис. 12. Диаграмма евклидовых расстояний от центроида до всех объектов (ГК)

В ходе анализа состава зоны риска рассматривались два множества: множество всех благонадежных организаций зоны риска и множество организаций, у которых по решению Банка России была отозвана лицензия в период с января 2022 по август 2023 г., всего 15. В результате пересечения указанных множеств были идентифицированы шесть организаций.

Таким образом, применение разработанной методики с использованием данных, построенных с помощью метода главных компонент, позволило спрогнозировать 40 % фактов отзыва банковских лицензий:

$$k_2 = \frac{p_2}{n}, \quad (4)$$

где p_2 – идентифицированные организации; n – организации с отозванной в заданный период лицензией.

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

В заключение подведем итоги выполненного исследования:

- на основе методов кластерного анализа и метода главных компонент разработана методика для прогнозирования попадания кредитных организаций в зону риска;
- совместное использование методов кластерного анализа и метода ГК позволило продемонстрировать робастность предложенной методики;
- сформирована зона риска, в которую попало заметное количество благонадежных организаций, на которые, в первую очередь, необходимо обратить особое внимание;
- разработанная методика позволила спрогнозировать 40–47 % фактов отзыва лицензий у благонадежных кредитных организаций.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской

Федерации (проект государственного задания № FSWU-2023-0031).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Андерсон Т.* Введение в многомерный статистический анализ. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. 500 с.
2. *Дюран Б., Одделл П.* Кластерный анализ. М.: Статистика, 1977. 128 с.
3. *Dr. Tirthajyoti Sarkar.* Clustering and dimensionality reduction techniques combined. [Электронный ресурс]. URL: https://github.com/tirthajyoti/Machine-Learning-with-Python/blob/master/Clustering-Dimensionality-Reduction/Clustering_with_dim_reduction.ipynb (дата обращения: 07.07.2023).
4. *Айвазян С.А., Бухштабер В.М., Енюков И.С.* Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. М.: Финансы и статистика, 1989. 607 с. ISBN 5-279-00054-X.
5. *Акишина Е.П., Иванов В.В., Крянев А.В., Приказчикова А.С.* Сравнительный анализ методов деревьев решений и нейронных сетей в задаче классификации кредитных организаций // Вестник НИЯУ МИФИ, 2022. Т. 11. № 6. С. 442–449. <https://doi.org/10.26583/vestnik.2022.12>.
6. *Акишина Е.П., Иванов В.В., Приказчикова А.С.* Применение нейронных сетей и метода главных компонент для идентификации кредитных организаций, потенциально вовлеченных в процесс по легализации преступных доходов // Известия Исык-Кульского форума бухгалтеров и аудиторов стран Центральной Азии, 2022. № 2(37). С. 294–296.
7. *Murtagh F.* Ward's Hierarchical Agglomerative Clustering Method: Which Algorithms Implement Ward's Criterion. // Journal of Classification, 2014. № 31. P. 274–295.
8. *Айвазян С.А.* Многомерный статистический анализ в социально-экономических исследованиях // Экономика и математические методы, 1977. № 13 (5). С. 968–985.
9. StatSoft Inc., 2011. STATISTICA (data analysis software system), version 10. [Электронный ресурс]. URL: www.statsoft.com (дата обращения: 07.07.2023).
10. *Баймуратов И.Р.* Методы автоматизации машинного обучения. СПб.: Университет ИТМО, 2020. 40 с.
11. *Айвазян С.Л., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.* Прикладная статистика. Исследование зависимостей. М.: Издательство «Финансы и статистика», 1985. 488 с.

MULTIDIMENSIONAL DATA ANALYSIS IN THE TASK OF PREDICTING THE ENTRY OF CREDIT INSTITUTIONS INTO THE RISK ZONE

E.P. Akishina¹, V.V. Ivanov^{1,2}, A.V. Kryanev^{2,}, A.S. Prikazchikova²*

¹Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980 Russia

²National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, 115409 Russia

*e-mail: AVKryanev@mephi.ru

Received December 10, 2024; revised December 10, 2024; accepted December 26, 2024

The study of economic processes is based on the study of a large number of parameters. In this connection, in order to analyze the phenomena under study and solve prognostic problems, there is a need to use methods of multidimensional data analysis. The article examines the problem of identifying suspicious, from the point of view of financial solvency, credit institutions operating in the Russian market. This study is aimed at developing a methodology for multidimensional data analysis to identify suspicious credit institutions and predict the revocation of their licenses. To solve this problem, it is proposed to use hierarchical and iterative methods of cluster analysis, as well as the principal component method. Based on these methods, a methodology for forming a risk zone has been developed that makes it possible to predict the revocation of licenses from credit institutions. To determine the number of clusters, the Ward clustering method was used, as well as the elbow method, the silhouette method, and the Davis-Bouldin method. The combined use of cluster analysis methods and the principal component method made it possible to demonstrate the robustness of the proposed methodology. Data from Bank Reporting Form No. 101 were used in this study.

Keywords: cluster analysis methods, *k*-means method, principal component method, Euclidean distance, credit institution, license revocation.

REFERENCES

1. *Anderson T.* Vvedenie v mnogomernyj statisticheskij analiz. [Introduction to multivariate statistical analysis]. Moscow, State Publishing House of Physical and Mathematical Literature Publ., 1963. 500 p.
2. *Durand B., Odell P.* Klasternyj analiz. [Cluster analysis]. Moscow, Statistika Publ., 1977. 128 p.
3. *Dr. Tirthajyoti Sarkar.* Clustering and dimensionality reduction techniques combined. Available at: https://github.com/tirthajyoti/Machine-Learning-with-Python/blob/master/Clustering-Dimensionality-Reduction/Clustering_with_dim_reduction.ipynb (accessed 07.07.2023).
4. *Ajvazyan S.A., Buhshaber V.M., Enyukov I.S.* Prikladnaya statistika. Klassifikaciya i snizhenie razmernosti [Applied statistics. Classification and dimension reduction]. Moscow: Finansy i statistika Publ., 1989. 607 p. ISBN 5-279-00054-X.
5. *Akishina E.P., Ivanov V.V., Kryanev A.V., Prikazchikova A.S.* Cravnitel'nyj analiz metodov derev'ev reshenij i nejronnyh setej v zadache klassifikacii kreditnyh organizacij [Comparative analysis of decision tree and neural network methods in the problem of classification of credit institutions]. Vestnik NIYaU MIFI, 2022. Vol. 11. No. 6. Pp. 442–449. <https://doi.org/10.26583/vestnik.2022.12> (in Russian)
6. *Akishina E.P., Ivanov V.V., Prikazchikova A.S.* Primenenie nejronnyh setej i metoda glavnyh komponent dlya identifikacii kreditnyh organizacij, potencial'no vovlechennyh v process po legalizacii prestupnyh dohodov [Application of neural networks and the principal component method for identifying credit institutions potentially involved in the process of money laundering]. Izvestiya Issyk-Kul'skogo foruma buhgalterov i auditorov stran Central'noj Azii, 2022. No. 2(37). Pp. 294–296 (in Russian).
7. *Murtagh F.* Ward's Hierarchical Agglomerative Clustering Method: Which Algorithms Implement Ward's Criterion. Journal of Classification, 2014. No. 31. Pp. 274–295.
8. *Ayvazyan S.A.* Mnogomernyj statisticheskij analiz v social'no-ekonomicheskikh issledovaniyah [Multivariate statistical analysis in socio-economic research]. Ekonomika i matematicheskie metody, 1977. No. 13 (5). Pp. 968–985 (in Russian).
9. StatSoft Inc., 2011. STATISTICA (data analysis software system), version 10. Available at: www.statsoft.com (accessed 07.07.2023).
10. *Baimuratov I.R.* Metody avtomatizacii mashinnogo obucheniya [Methods for automating machine learning]. St. Petersburg, Universitet ITMO Publ., 2020. 40 p.
11. *Ajvazyan S.L., Enyukov I.S., Meshalkin L.D.* Prikladnaya statistika. Issledovanie zavisimostej [Applied statistics. Dependency research]. Moscow, Izdatel'stvo «Finansy i statistika» Publ., 1985. 488 p.

УДК 57.087

ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В ТЕХНОГЕННЫХ УСЛОВИЯХ

А.Р. Каримов¹, М.А. Соломатин^{1,*}

¹Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, 115409, Россия

*e-mail: mis4455@yandex.ru

Поступила в редакцию: 18.12.2023

После доработки: 22.01.2024

Принята к публикации: 06.02.2024

В работе обсуждается динамика аэрозолей в приложении к распространению воздушно-капельных вирусных инфекций в условиях, когда следует учитывать взаимное движение исследуемых объектов. Данная особенность наиболее сильно должна проявляться в городских условиях, где разнообразные транспортные потоки являются неотъемлемой частью среды обитания современного человека. Рассматривается движение отдельных частиц в двухмерной геометрии под действием силы тяжести и трения, а также внешнего электростатического поля. В рамках развиваемой модели исследуется влияние начальных условий, обусловленных физиологическими процессами дыхания, и состоянием окружающей среды на динамику распространения выдыхаемых аэрозолей. Произведена оценка расстояний, на которые могут распространиться аэрозольные частицы в зависимости от размеров и начальных скоростей частиц. Показано, что более крупные частицы распространяются на большие расстояния, тогда как более мелкие частицы «вморожены» в окружающую среду и могут распространяться только с потоками воздуха. В приложении к передаче вирусных инфекций это означает совершенно разные виды транспортировки вирусов в зависимости от размеров и вида дисперсной фазы. Полученные результаты были применены к анализу особенностей распространения вирусов в условиях метрополитена.

Ключевые слова: аэрозоль, сила Стокса, SARS-CoV-2.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.303

EDN NMDMSC

ВВЕДЕНИЕ

Распространение респираторных заболеваний зависит от множества факторов, включая транспортные потоки, которые являются неотъемлемой частью современной жизни человека и могут способствовать передаче вирусных инфекций. В настоящей работе обсуждается влияние взаимного движения людей на передачу различных вирусных инфекций, включая COVID-19.

Переносчиком большинства инфекций, включая коронавирусы, является твердая или жидкая фаза воздушного потока, возникающего при дыхании или кашле [1–3]. Это связано с тем, что характерные размеры дисперсной фазы могут меняться от микроскопических (10^{-9} м) до макроскопических (10^{-4} м) масштабов [4–6], тогда как размер вирусов лежит в диапазоне от 10^{-8} до $4 \cdot 10^{-7}$ м [7], т.е. достаточно крупные дисперсные частицы могут быть носителями достаточно большого числа вирусов. С другой стороны, более мелкие частицы должны достаточно быстро тормозиться силой трения, и

дальнейшее их распространение будет определяться собственными процессами переноса в окружающей атмосфере и действующими на них полями, а именно гравитационным полем Земли и внешними электростатическими полями, если система аэрозоль-вирус имеет дипольный момент.

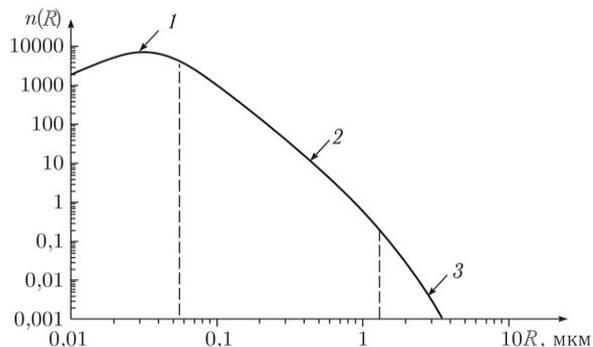


Рис. 1. Распределение аэрозольных частиц в атмосфере: 1 – частицы Эйткена; 2 – частицы Юнге; 3 – гигантские частицы [5, 6]

Говоря другими словами, при анализе распространения вирусов аэрозолями следует при-

нимать во внимание распределение частиц по размерам, а также их дипольные моменты.

Типичное распределение атмосферных аэрозолей представлено на рис. 1 [5, 6]. Как видно из графика, пик концентрации наблюдается для частиц между 10^{-8} и 10^{-6} м. При этом поражающий эффект будет зависеть от времени жизни на открытом воздухе и концентрации живых микроорганизмов во вдыхаемом воздухе [8–10], что напрямую определяется расстоянием до объекта поражения и скоростью вылетевшего аэрозоля, а значит, относительной скоростью людей. Например, наглядным примером такой ситуации, где необходимо учитывать относительную скорость людей, является взаимное движение людей на эскалаторах в метро.

Учитывая большую плотность людей и организацию людских потоков в современном городе, можно утверждать, что подобные факторы могут оказать значительное влияние на распространение вирусов в техногенных условиях. Поэтому для выявления роли размеров и начальных скоростей аэрозольных частиц, состояния окружающей среды было бы полезно проанализировать разлет дисперсной фазы в типичных условиях городской среды и обсудить влияние аэрозольной динамики на распространение вирусов.

В настоящей статье мы рассмотрим этот вопрос, используя простейшую двухмерную модель [9–13], описывающую динамику невзаимодействующих друг с другом аэрозольных частиц, движущихся только под действием силы тяжести и трения. Обсудим влияние начальных скоростей вылетающих частиц и их размеров на характер их разлета в пространстве (рис. 2), а значит, и на возможность распространения вирусов.

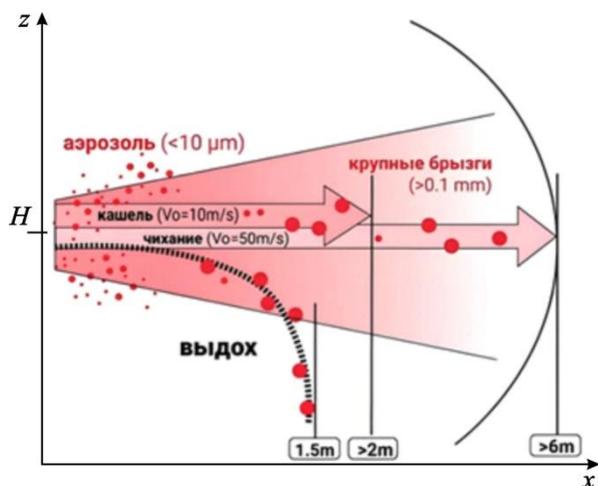


Рис. 2. Разлет дисперсной фазы при дыхательных процессах [8, 9]

Также данные результаты будут интересны с точки зрения определения соответствующих коэффициентов переходов в математических моделях распространения эпидемий, например, SEIR, SIR [14–16]. В настоящее время данные коэффициенты определяются из анализа эмпирической информации (см., например, [14, 17–19]), тогда как в рамках настоящей работы можно подойти к определению этих коэффициентов с теоретической стороны.

БАЛЛИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АЭРОЗОЛЕЙ

Чтобы наиболее простым образом учесть начальные условия, рассмотрим движение совокупности невзаимодействующих одинаковых частиц, имеющих сферическую форму, распространяющихся в воздухе с постоянной плотностью $\rho_{вз}$. Поскольку данные частицы отличаются только начальными кинематическими характеристиками, то для оценки основных характеристик разлета достаточно рассмотреть динамику одной частицы при разных начальных условиях. Ограничимся для простоты анализа движением частицы в двухмерной геометрии в плоскости XOZ , направив ось OZ от поверхности Земли, при этом ось OX лежит в плоскости параллельной поверхности Земли. Такая постановка задачи достаточно точно описывает струю выдыхаемого воздуха в сечении рта, как это показано на рис. 2. Другими словами, вместо граничной двухмерной задачи, где в сечении $x = 0$ заданы распределения скорости и плотности аэрозоля по высоте, рассмотрим начальную задачу о движении одной частицы, имеющей в начальный момент времени скорость (v_{x0}, v_{z0}) в точке $(x = 0, z = H)$. Также для упрощения анализа, положив $v_{x0} \gg v_{z0}$, ограничимся случаем, когда радиус дисперсной частицы R и ее характерная скорость (в обсуждаемом случае это v_{x0}) обеспечивают

$$Re = \rho_{вз} v_{x0} R / \eta \leq 1, \quad (1)$$

где η – коэффициент динамической вязкости воздуха.

Тогда сила трения определяется формулой Стокса $F_{тр} = -6\pi\eta Rv$, и динамика отдельной частицы описывается уравнениями:

$$\frac{dr}{dt} = v, \quad (2)$$

$$m \cdot \frac{dv}{dt} = -6\pi\eta R(v - U) - mg e_z + p\nabla \cdot E, \quad (3)$$

где $m = (4/3)\pi\rho_0R^3$ – масса аэрозольной частицы, выраженная через плотность дисперсной фазы ρ_0 ; g – ускорение свободного падения, направленное в противоположную сторону \mathbf{e}_z – орта оси OZ ; U – заданная скорость среды, в которой переносятся аэрозольные частицы; E – внешнее статическое электрическое поле; \mathbf{p} – дипольный момент аэрозоля. В данном случае вкладом вирусов в массу аэрозольной частицы пренебрегаем.

В настоящей работе ограничимся рассмотрением простейшего случая, когда $U_x = \text{const}$ и $U_z = \text{const}$, а $\mathbf{E} = E(z)\mathbf{e}_z$ представляет собой собственное электрическое поле Земли. Для оценки величины $E(z)$ воспользуемся моделью «сферический конденсатор», в котором нижний электрод – поверхность Земли, а верхний электрод – верхние слои атмосферы. В нормальных условиях Земля имеет отрицательный заряд, причем, вблизи ее поверхности электрическое поле составляет $E_0 = 130$ В/м [20–22]. В отсутствие грозных облаков и т.д. напряженность электрического поля уменьшается с высотой и обращается в нуль на поверхности верхнего электрода. Для относительно небольшого высотного диапазона можем предположить, что разность плотностей ионов и электронов δn в практически нейтральной атмосфере постоянна. В этом случае распределение электрического поля определяется уравнением

$$\frac{dE}{dz} = 4\pi e \delta n \quad (4)$$

с граничным условием $E(z=0) = E_0$.

Решение данного уравнения есть

$$E = E_0 \left(1 - \frac{z}{L}\right), \quad (5)$$

где величина $L = |E_0|/(4\pi e \delta n)$ представляет собой эффективную высоту атмосферы в используемой модели конденсатора.

При этом следует иметь в виду, что дипольная капля может быть ориентирована параллельно или антипараллельно \mathbf{E} , испытывая воздействие в направлении дипольного момента. Положив для простоты $\mathbf{p} \sim qR\mathbf{e}_z$, где q – заряд капли, для электростатической силы, действующей на каплю, получим

$$F_z = \mp 4\pi q e \delta n R. \quad (6)$$

Используя это соотношение, удобно переписать уравнения (2) – (3) в скалярной форме:

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\frac{(v_x - U_x)}{\tau}, \\ \frac{dx}{dt} = v_x, \\ \frac{dv_z}{dt} = -\frac{(v_z - U_z)}{\tau} - g \pm a, \\ \frac{dz}{dt} = v_z \end{cases} \quad (7)$$

при характерном времени торможения

$$\tau = \frac{2}{9} \frac{\rho_0 R^2}{\rho_{вз} \nu}, \quad (8)$$

где использовалась кинематическая вязкость, связанная с динамической вязкостью соотношением $\eta = \rho_{вз} \nu$, а величина

$$a = \frac{3qe\delta n}{\rho_0 R^2} \quad (9)$$

представляет собой ускорение капли в электростатическом поле. Поскольку интересующий нас пространственный диапазон здесь относительно невелик, можем предположить, что ускорение a остается постоянным. В результате, влияние заряда капли в нашей модели сводится просто к коррекции гравитационного ускорения. Однако, в зависимости от среды, диапазон a может быть довольно широким и включать случай $g \sim a$, когда проявляется сильное влияние электростатической составляющей ускорения капли. Такая ситуация может реализовываться, если заряд выдыхающего человека и локальное электрическое поле в окружающей среде будут увеличены в некоторых особых условиях, например, в лабораториях, фабриках, рядом с компьютерами и мобильными телефонами, а также во время грозы. Далее будем использовать эффективную гравитацию $g' \equiv g \pm a$, чтобы описать проявление электрической силы, которая может ослабить или даже доминировать над реальной гравитацией.

Решение системы уравнений (7) есть

$$v_x = (v_{x0} - U_x) \exp(-t/\tau) + U_x. \quad (10)$$

$$x(t) = U_x t + \tau(v_{x0} - U_x)[1 - \exp(-t/\tau)], \quad (11)$$

$$v_z(t) = (v_{z0} + \tau g - U_z) \exp(-t/\tau) + U_z - \tau g', \quad (12)$$

$$z(t) = H + \tau(v_{z0} + \tau g - U_z)[1 - \exp(-t/\tau)] \times [1 - \exp(-t/\tau)] + (U_z - \tau g')t. \quad (13)$$

Для того чтобы пояснить особенности динамики распространения вирусов, описываемой соотношениями (10)–(12), рассмотрим поведение аэрозоля на начальном промежутке $0 \leq$

$t < \tau$, где данные соотношения при учете только линейных по t/τ членов сводятся к

$$\begin{aligned} v_x(t) &= v_{x0} + (U_x - v_{x0}) \frac{t}{\tau}, \\ v_z(t) &= v_{z0} - tg' + (U_z - v_{z0}) \frac{t}{\tau} \end{aligned} \quad (14)$$

$$x(t) = tv_{x0}, \quad z(t) = H + tv_{z0} - g't^2/2. \quad (15)$$

Из соотношения (14) следует, что горизонтальная составляющая скорости аэрозоля изменяется от v_{x0} до скорости воздушного потока U_x , а вертикальная составляющая меняется от v_{z0} до $v_z = v_{z0} - \tau g'$. Поскольку при $t \sim \tau$ частица практически «забывает» всю информацию о своем начальном состоянии, дальнейшее ее распространение при $t > \tau$ определяется главным образом трением воздуха, эффективной гравитацией и скоростью фонового воздуха.

При этом следует иметь в виду, что влияние электрического поля будет значимым только для небольших частиц. Действительно, аэрозоль может удерживаться электрическим полем, если

$$mg \leq 4\pi qe\delta n R, \quad (16)$$

откуда для сферической частицы получаем критический радиус

$$R_* = \sqrt{3 qe\delta n / \rho_0}, \quad (17)$$

т.е. можно пренебречь электрической левитацией для частиц с $R > R_*$.

Как видно из (15), горизонтальное смещение частицы в первом порядке по времени определяется в основном начальной скоростью выдыхаемого воздуха. К моменту $t = \tau$ частица проходит расстояние

$$L_x = \frac{2}{9} \frac{\rho_0}{\rho_{вз}} \frac{R^2}{v} v_{x0}, \quad (18)$$

так что более крупные капли могут распространяться на большее расстояние. Это связано с тем, что сила трения, тормозящая частицу, пропорциональна ее радиусу R , а масса пропорциональна R^3 . В результате у более тяжелой частицы будет менее отрицательное ускорение, т.е. она будет тормозиться более медленно, а значит, пролетит на большее расстояние (см. рис. 2). С другой стороны, если для простоты положить $v_{z0} = 0$, то при $t = \tau$ вертикальное смещение частицы составит

$$L_z = |z(t) - H| = \frac{1}{2} g' \tau^2 = \frac{2}{81} \frac{\rho_0^2}{\rho_{вз}^2} \frac{g' R^4}{v^2}, \quad (19)$$

т.е., как и следовало ожидать, более крупные частицы достигают поверхности Земли раньше

более мелких частиц. Как уже отмечалось, в зависимости от местных условий, электрическая сила может уменьшить или даже изменить знак эффективного гравитационного ускорения g' . Далее будем полагать $g' \equiv g$, понимая, что эффект электрического поля может быть учтен путем изменения масштаба и знака g' , т.е. путем изменения масштаба L_z .

На начальном этапе распространения аэрозолей в качестве соответствующих пространственных характеристик удобно использовать L_x и L_z . Как видно из (18) и (19), L_x и L_z значительно увеличиваются с ростом R . Поэтому ограничимся оценкой разлета наиболее крупных частиц $R \geq R_0$, где $R_0 = 10^{-9}$ м, используя далее R_0 в качестве характерного пространственного масштаба задачи о распространении аэрозольных частиц, являющихся носителями вирусов.

ВЛИЯНИЕ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ И ТЕХНОГЕННЫХ УСЛОВИЙ НА ДИНАМИКУ АЭРОЗОЛЕЙ

В качестве примера использования данных соотношений, а также влияния техногенных условий на распространение вирусов воздушно-капельным путем, оценим динамику распространения аэрозолей в условиях метрополитена.

В основном физико-химические характеристики конденсированных частиц в выдыхаемом воздухе определяются физиологическими и патологическими процессами в респираторном тракте человека [8–12, 28], и, в зависимости от окружающих условий, из газовой фазы выдыхаемого воздуха происходит образование водного конденсата. При этом атмосферные аэрозольные частицы, включая вирусы, могут образовывать с такими каплями устойчивые соединения. Когда такие образования покидают организм, их жидкая фаза может испариться за достаточно короткое время. Например, согласно [29] время испарения водных аэрозольных частиц диаметром в несколько микрон составляет менее одной секунды. В результате останется только твердая фаза. Поэтому для грубых оценок имеет смысл рассматривать два предельных типа аэрозолей: жидкие капли, чья плотность близка к плотности воды при нормальных условиях (т.е. положим $\rho_0 = \rho_{в} = 997$ кг/м³), и твердые частицы, за характерную плотность которых возьмем плотность наиболее распространенного естественного аэрозоля – сажи (т.е. положим $\rho_0 = \rho_{сж} = 1800$ кг/м³).

Величины плотности и коэффициентов вязкости воздуха в температурном диапазоне от 0 до 20 °С приведены в табл. 1.

Таблица 1. Зависимость плотности и вязкости воздуха от температуры [23]

Температура, °С	$\rho_{\text{вз}}, \text{кг/м}^3$	$\eta \times 10^{-5}, \text{кг/(м} \cdot \text{с)}$	$\nu \times 10^{-5}, \text{м}^2/\text{с}$
0	1.29	1.72	1.33
+ 20	1.21	1.81	1.51

Как видно из данной таблицы, в рассматриваемом диапазоне температур изменение плотности и кинематической вязкости несущественно, поэтому в оценках можно ограничиться рассмотрением только случая $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$.

В начальной скорости аэрозольной частицы v_{x0} выделим составляющую v_d , связанную с физиологией дыхания (скорость потока выдыхаемого воздуха относительно человека) и составляющую v_t , обусловленную движением исследуемого объекта, т.е. запишем

$$v_{x0} = v_d + v_t, \quad (20)$$

где v_d может меняться в пределах $3 \leq v_d \leq 12 \text{ м/с}$; здесь нижний предел соответствует спокойному дыханию человека, а верхний предел – кашлю [24]. В рассматриваемом случае считается, что скорость аэрозольной частицы совпадает со скоростью выдыхаемого воздуха. При этом собственная скорость движения человека может меняться от $v_h = 3 \text{ м/с}$ при спокойной ходьбе до $v_h = 6 \text{ м/с}$ при беге. Кроме того, в v_t может входить скорость эскалатора, $v_e = 0.75 \text{ м/с}$.

Используя R_0 в качестве характерного пространственного масштаба задачи, соотношения (8) и (12) удобно переписать в безразмерной форме:

$$l_x = \frac{2 \rho_0}{9 \rho_{\text{вз}}} Re(R_0) r^2, \quad (21)$$

$$l_z = \frac{4}{81} \frac{\rho_0^2 R_0}{\rho_{\text{вз}}^2 L_*} r^4. \quad (22)$$

здесь $l_x = L_x/R_0$, $l_z = L_z/R_0$, $r = R/R_0$ и $L_* = \nu^2/gR_0^2$, а число Рейнольдса определено по R_0 , т.е. $Re(R_0) = R_0 v_{x0}/\nu$.

Как видно из данных соотношений, характерные расстояния l_x и l_z для твердых аэрозолей превышают аналогичные размеры жидких аэрозолей в $\kappa = \rho_{\text{сж}}/\rho_{\text{в}}$ и κ^2 раз соответственно.

На рис. 3 приведена зависимость l_x от размера капли для трех характерных значений Re , полученных при $v_{x0} = 3, 6, 12 \text{ м/с}$ соответственно. Данные кривые описывают разлет аэрозолей от спокойно дышащего, неподвижно-го человека ($Re = 0.2$) до кашляющего или относительно спокойно дышащего, но бегущего человека ($Re = 0.8$). Как видно из приведенных зависимостей, во всех режимах частицы размером $R \leq 40 \text{ мкм}$ распространяются на расстояние не более $L_x = 0.2 \text{ м}$. Наибольшую опасность представляют крупные частицы, имеющие размер $R \sim 100 \text{ мкм}$ и более, когда даже от спокойно дышащего и двигающегося шагом человека (кривая 2) аэрозоли распространяются на расстояние $L_x \geq 0.5 \text{ м}$, которое устанавливается за время порядка τ . Например, для частиц с $R = 100 \text{ мкм}$ согласно (5) получаем $\tau = 0.1 \text{ с}$, т.е. в большинстве повседневных случаев, представляющих потенциальную опасность переноса вирусных заболеваний воздушно-капельным путем, можно пренебречь временем установления τ . Такая ситуация может возникнуть, например, в зоне заражения на переполненных эскалаторах метро, где могут оказаться десятки людей. Если $L_x \geq 2 \text{ м}$, а такой случай может возникнуть для крупных частиц, распространяющихся от бегущего человека, у которого к тому же скорость выдоха $v_d \sim 10 \text{ м/с}$, то в зону поражения могут также попасть люди, находящиеся на соседней лестнице. Из этого следует необходимость ограничения скорости передвижения пассажиров, находящихся на эскалаторе.

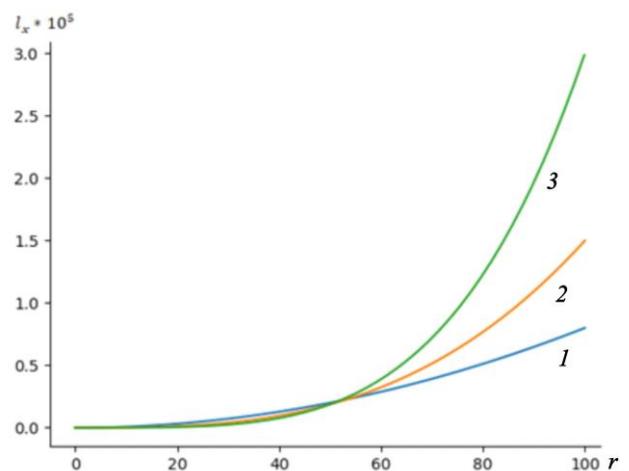


Рис. 3. Зависимость $l_x = L_x/R_0$ от размера частиц $r = R/R_0$ (здесь и далее $R_0 = 1 \text{ м}$), определяемая соотношением (21), при $Re = 0.2$ (кривая 1), $Re = 0.4$ (кривая 2) и $Re = 0.8$ (кривая 3) для жидких фракций аэрозолей

При этом микрочастицы размером до 5 мкм легко проходят через дыхательные пути человека и проникают в альвеолы, тогда как капли размером более 10 мкм преимущественно задерживаются в верхних дыхательных путях и бронхах [25]. Хотя капли $R \gg 10$ мкм не представляют непосредственной опасности для пострадавшего, тем не менее, они могут находиться в выдыхаемом воздухе при кашле и чихании и распадаться на более мелкие.

В целом подобная динамика прослеживается и с твердыми аэрозольными частицами (рис. 4). Правда, в этом случае за счет большей плотности они могут распространяться на существенно большие расстояния, для выбранной плотности $\rho_{сж}$ характерная величина L_x примерно в 2 раза превышает аналогичную длину жидкого аэрозоля. При этом, в отличие от жидких капель, твердые аэрозоли не распадаются на более мелкие, и поэтому механизм их распространения не может измениться. Но в любом случае, вне человеческого тела мелкие жидкие и твердые частицы микрометрового диапазона будут оседать медленно и могут пассивно распространяться на большие расстояния за счет конвективного переноса. Чтобы прояснить этот момент, рассмотрим вертикальное движение аэрозольных частиц.

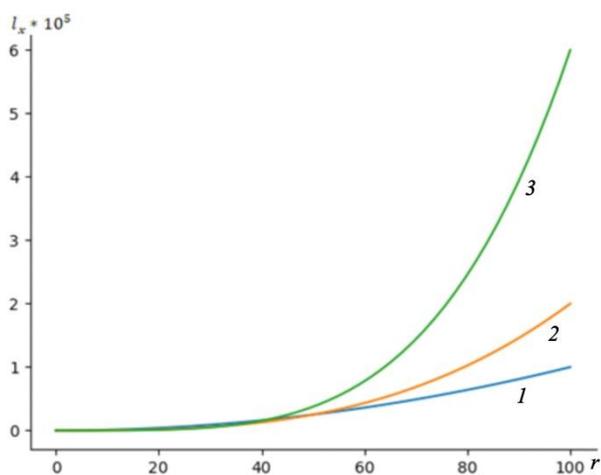


Рис. 4. Зависимость $l_x = L_x/R_0$ от размера частиц $r = R/R_0$, определяемая соотношением (21), при $Re = 0.2$ (кривая 1), $Re = 0.4$ (кривая 2) и $Re = 0.8$ (кривая 3) для твердых фракций аэрозолей

На рис. 5 представлены зависимости характерного вертикального смещения l_z от размеров аэрозоля r для твердой и жидкой фракции. Из данных графиков видно, что вплоть до $r \sim 40$ жидкие и твердые аэрозоли за время порядка $t \sim \tau$ смещаются одинаково на ничтожно малое расстояние. Основные отличия наблюдаются в

области $r \sim 100$. Так, за время $t \sim \tau$ крупные капли с $R \sim 100$ мкм смещаются по вертикали на $l_z \sim 10$ см, а твердые частицы такой же величины – на 175 см, тогда как жидкие аэрозоли с $R < 20$ мкм за это время падают всего на $l_z \sim 10$ мкм. Несмотря на малое горизонтальное смещение маленьких частиц, они остаются во взвешенном состоянии в воздухе в течение длительного времени. Такие частицы могут разноситься воздушными потоками, например, вентиляционными потоками в метрополитене, а также на них может сильно влиять локальное изменение электрического поля. Как видно из (15), $l_z \propto g'$, а поскольку g' в зависимости от q и E может меняться в широком диапазоне, то и l_z также имеет широкий диапазон, что указывает на важность учета внешнего электрического поля и необходимость организации соответствующей вытяжной вентиляции как на уровне стоящих, так сидящих пассажиров в вагонах метрополитена.

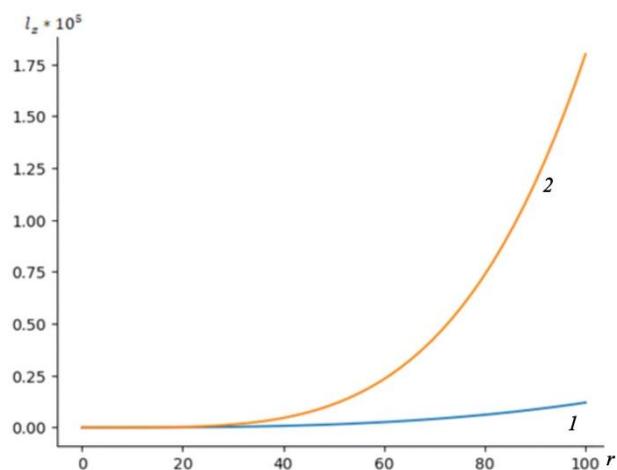


Рис. 5. Зависимость $l_z = L_z/R_0$ от размера частиц $r = R/R_0$, определяемая соотношением (22), для жидких фракций (кривая 1) и твердых фракций аэрозолей (кривая 2)

Более того, последние исследования вирусов [26, 27] SARS-CoV-2 показали, что данный вирус имеет строение, напоминающее структуру двойного электрического слоя (рис. 6). Учитывая особенности строения вирусов SARS-CoV-2, содержащего заряженные области, можно ожидать, что при определенных условиях система аэрозоль-вирус будет обладать огромным дипольным моментом, а значит, электростатическая часть ускорения g' будет определять динамику аэрозолей.



Рис. 6. Расположение электрически заряженных участков на поверхности коронавируса SARS-CoV-2: 1 – электрически заряженная +РНК вируса; 2 – электрически заряженные пепломеры; 3 – положительно заряженные участки белка; 4 – положительно заряженные участки на RBD SARS-CoV-2 [26]

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе исследовалось влияние начальных условий (размеров, дипольных моментов и начальных скоростей аэрозольных частиц, состояния окружающей среды) на динамику разлета частиц при малых скоростях под действием сил тяжести, внешних электрических полей и трения в приложении к распространению вирусных заболеваний, передающихся воздушно-капельным путем (например, SARS-CoV-2). При записи силы трения использовалась формула Стокса, справедливая при $Re < 1$, что накладывало естественные ограничения на масштабы рассматриваемых процессов. Все сделанные оценки следует трактовать как предварительные, поскольку в работе не обсуждалось распределение плотности аэрозоля по пространству и во времени, что является основным показателем распространения вирусов. Кроме того, поскольку капли могут сливаться или распадаться, а также конденсироваться или испаряться с течением времени, на них влияют локальные (обычно турбулентные в таких небольших масштабах) воздушные потоки, а более крупные аэрозольные частицы с большими дипольными моментами могут легко накапливать влагу из окружающего воздуха. Поэтому остаются вопросы, связанные с выживанием захваченных вирусов, а также как собственные поля электрических зарядов внутри как жидкого, так и твердого аэрозоля (если они существуют в виде системы аэрозоль-вирус) влияют на распространение и время жизни вируса.

При этом ключевым моментом является величина начальной скорости вылетающих частиц, определяемая физиологическими особенностями дыхания, поскольку данный фактор определяет допустимое расстояние L_x , на которое может пролететь частица, являющаяся переносчиком вирусов. Как следует из соотношений (12) и (13), более крупные частицы распространяются на большие расстояния, тогда как более мелкие частицы (см. рис. 3, 4, 5) по сути «вморожены» в окружающую среду и могут распространяться только с потоками воздуха. В результате со временем возможно их накопление в помещении, что может привести к непрямому инфицированию, даже если инфицированный человек более не находится в помещении. Отдельно стоит отметить, что твердые аэрозоли за счет большей плотности имеют значительно большее допустимое расстояние распространения. К тому же, крупные частицы ($R \sim 100$ мкм), обладая большей поверхностью, могут переносить большее число вирусов.

Более того, в случае заряженных аэрозолей при наличии неоднородных внешних электростатических полей, например естественного поля Земли, большую роль в процессах переноса начинает играть электростатическая часть ускорения g' , которая при определенных условиях может определять направление и расстояние распространения аэрозольной частицы. В приложении к передаче вирусных инфекций это означает совершенно разные виды транспортировки вирусов в зависимости от размеров и вида дисперсной фазы, что должно определять соответствующие способы борьбы с ними в зависимости от организации транспортных потоков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Scharfman B.E., Techet A.H., Bush J.W.M., Bourouiba L. Visualization of sneeze ejecta: steps of fluid fragmentation leading to respiratory droplets // *Experiments in Fluids*, 2016. V. 57. P. 24.
2. Alsved M., Bourouiba L., Duchaine C., et al. Natural sources and experimental generation of bioaerosols: Challenges and perspectives // *Aerosol Science and Technology*, 2019. V. 54. Pp. 547–571.
3. Grinshpun S.A., Clark J.M. Measurement and characterization of bioaerosols // *Journal of Aerosol Science*, 2005. V. 36. P. 553.
4. Kondratyev K.Y., Ivlev L.S., Krapivin V.F., Varotos C.A. *Atmospheric Aerosol Properties: Formation, Processes and Impacts*. Berlin: Springer-Verlag, 2006. 572 p.
5. Пискунов В.Н. Динамика аэрозолей. М.: Физматлит, 2010. 293 с.

6. *Ivlev L.S.* Atmospheric aerosols. Aerosols – Science and Technology / I. Agranovski ed. Wienheim: Wiley – VCH, 2010. 345 p.
7. *Филдс Б.Н., Найн Д.М., Мэрфи Ф.А., Харрисон С.* Вирусология. М.: Мир, 1989. Т. 3. 492 с.
8. *Huang S.* COVID-19. Why we should all wear masks-There is new scientific rationale. [Электронный ресурс]. URL: <https://medium.com/@Cancerwarrior/covid-19-why-we-should-all-wear-masks-there-is-new-scientific-rationale-280e08ceee71> (дата обращения 10.11.2023)
9. *Брусина Е.Б., Чезганова Е.А., Дроздова О.М.* Аэрогенный механизм передачи больничных патогенов // *Фундаментальная и клиническая медицина*, 2020. Т. 5. С. 97.
10. *Bourouiba L.* The fluid dynamics of disease transmission // *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2021. V. 53. P. 473.
11. *Фукс Н.А.* Механика аэрозолей. М.: Изд-во Академии наук СССР, 1955. 351 с.
12. *Karimov A.R., Stenflo L., Yu M.Y.* Dynamics of charged aerosols relevant to transmission of airborne infections // *Physica Scripta*, 2022. V. 97. P. 085007.
13. *Архинов В.А., Усанина А.С.* Движение аэрозольных частиц в потоке. Томск: Издательский Дом ТГУ, 2013. 252 с.
14. *Wang Z., Bauch C.T., Bhattacharyya S., d'Onofrio A., et al.* Statistical physics of vaccination // *Physics Reports*, 2016. V. 664. P. 1–113.
15. *Malchow H., Petrovskii S.V., Venturino E.* Spatiotemporal patterns in ecology and epidemiology: theory, models, and simulation. Chapman @Hall / CRC Press, Boca Ration, 2007. 464 p.
16. *Братусь А.С., Новожилов А.С., Платонов А.П.* Динамические системы и модели биологии. М.: Физматлит, 2010. 400 с.
17. *Kabanikhin S. I., Krivorotko O. I.* Mathematical modeling of the Wuhan COVID-2019 epidemic and inverse problems // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2020. V. 60. P. 1889–1899.
18. *Ghosh K., Ghosh A.K.* Study of COVID-19 epidemiological evolution in India with a multi-wave SIR model // *Nonlinear Dynamics*, 2022. V. 109. P. 47–55.
19. *Leonov A., Nagornov O., Tyufilin S.* Modeling of Mechanisms of Wave Formation for COVID-19 Epidemic // *Mathematics*, 2022. V. 11. № 1. P. 167.
20. *Israel H.* Atmospheric electricity. Jerusalem: Keter Press, 1973.
21. *Смирнов Б. М.* Электрический цикл в земной атмосфере // *Успехи физических наук*, 2014. Т. 184(11). С. 1153–1176.
22. *Williams E.* The global electrical circuit: A review // *Atmospheric Research*, 2009. V. 91. Pp. 140–152.
23. *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 721 с.
24. *Mahmoud S., Hosni M., Jones B., Shugart J.M., Hosni M.H., Mead K.R., et al.* Transport and containment of infectious disease expelled by coughing in an aircraft cabin // *ASHRAE Transactions*, 2020. V. 126. P. 375.
25. *Grippi M.A., Elias Jack A., Fishman Jay A., et al.* Fishman's Pulmonary Diseases and Disorders. New York: McGraw-Hill Education, 2015.
26. *Clausen T.M., Sandoval D.R., Spliid C.B., Pihl J., Perret H.R., Painter C.D., et al.* SARS-CoV-2 infection depends on cellular heparan sulfate and ACE2 // *Cell*, 2020. V. 183(4). Pp. 1043–1057.
27. *Каплуненко В.Г., Косинов Н.В., Скальный А.В.* Уязвимые электрически заряженные места SARS-CoV-2; электрическая модель вируса и роль микроэлементов в его инактивации // *Микроэлементы в медицине*, 2021. Т. 22. № 1. С. 3–20.
28. *Климанов И.А., Соодаева С.К.* Механизмы формирования конденсата выдыхаемого воздуха и маркеры оксидативного стресса при патологиях респираторного тракта // *Пульмонология*, 2009. № 2. С. 113–119.
29. *Stadnytskyi V., Bax C.E., Bax A., Anfinrud P.* The airborne lifetime of small speech droplets and their potential importance in SARS-CoV-2 transmission // *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2020. V. 117(22). P. 11875–11877.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2024, vol. 13, no. 1, pp. 30–39

PECULIARITIES OF DISTRIBUTION AEROSOL PARTICLES IN ANTHROPOGENIC CONDITIONS

A.R. Karimov¹, M.A. Solomatin^{1,}*

¹*National Research Nuclear University MEPHI, Moscow, 115409, Russia*

**e-mail: mis4455@yandex.ru*

Received December 18, 2023; revised January 22, 2024; accepted February 6, 2024

The paper discusses the dynamics of aerosols as applied to the spread of airborne viral infections in conditions where the mutual movement of the objects under study should be taken into account. This feature should be most strongly manifested in urban environments, where various traffic flows are an integral part of the habitat of modern man. The movement of individual particles in two-dimensional geometry under the influence of gravity and friction,

as well as an external electrostatic field, is considered. Within the framework of the developed model, the influence of initial conditions determined by the physiological processes of respiration and the state of the environment on the dynamics of the spread of exhaled aerosols is studied. An assessment was made of the distances over which aerosol particles can spread depending on the size and initial velocities of the particles. Larger particles have been shown to travel longer distances. While smaller particles are «frozen» into the environment and can only spread with air currents. When applied to the transmission of viral infections, this means completely different types of virus transportation depending on the size and type of dispersed phase. The results obtained were applied to the analysis of the characteristics of spread for viruses in metro.

Keywords: an aerosol; Stokes' drag; SARS-CoV-2.

REFERENCES

1. Scharfman B.E., Techet A.H., Bush J.W.M., Bourouiba L. Visualization of sneeze ejecta: steps of fluid fragmentation leading to respiratory droplets. *Experiments in Fluids*, 2016. Vol. 57. P. 24.
2. Alsved M., Bourouiba L., Duchaine C., et al. Natural sources and experimental generation of bioaerosols: Challenges and perspectives. *Aerosol Science and Technology*, 2019. Vol. 54. Pp. 547–571.
3. Grinshpun S.A., Clark J.M. Measurement and characterization of bioaerosols. *Journal of Aerosol Science*, 2005. Vol. 36. P. 553.
4. Kondratyev K.Y., Ivlev L.S., Krapivin V.F., Varotsova C.A. *Atmospheric Aerosol Properties: Formation, Processes and Impacts*. Berlin: Springer-Verlag, 2006. 572 p.
5. Piskunov V.N. Dinamika aerorozolej [Aerosol dynamics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010. 293 p. [in Russian].
6. Ivlev L.S. Atmospheric aerosols. *Aerosols – Science and Technology / Agranovski I. ed.* Wienheim, Wiley – VCH, 2010. 345 p.
7. Filds B.N., Najp D.M., Merfi F.A., Harrison S. *Virusologiya [Virology]*. Moscow, Mir Publ., 1989. Vol. 3. 492 p. [in Russian].
8. Huang S. COVID-19. Why we should all wear masks—There is new scientific rationale. Available at: <https://medium.com/@Cancerwarrior/covid-19-why-we-should-all-wear-masks-there-is-new-scientific-rationale-280e08ceee71> (accessed 10.11.2023).
9. Brusina E.B., Chezganova E.A., Drozdova O.M. Aerogenyj mekhanizm peredachi bol'nichnyh patogenov [Aerogenic mechanism of transmission of hospital pathogens]. *Fundamental'naya i klinicheskaya medicina*, 2020. Vol. 5. P. 97 (in Russian).
10. Bourouiba L. The fluid dynamics of disease transmission. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2021. Vol. 53. P. 473.
11. Fuks N.A. *Mekhanika aerorozolej [Aerosol mechanics]*. Moscow, Izd-vo Akademii nauk SSSR Publ., 1955. 351 p. [in Russian].
12. Karimov A.R., Stenflo L., Yu M.Y. Dynamics of charged aerosols relevant to transmission of airborne infections. *Physica Scripta*, 2022. Vol. 97. P. 085007.
13. Arkhipov V.A., Usanina A.S. Dvizhenie aerorozol'nyh chastic v potoke. [Motion of aerosol particles in the flow]. Tomsk, Izdatel'skij Dom TGU Publ., 2013. 252 p. [in Russian].
14. Wang Z., Bauch C.T., Bhattacharyya, S., d'Onofrio A., et al. Statistical physics of vaccination *Physics Reports* 2016. Vol. 664. Pp. 1–113.
15. Malchow H., Petrovskii S.V., Venturino E. *Spatiotemporal patterns in ecology and epidemiology: theory, models, and simulation*. Chapman & Hall / CRC Press, Boca Ration, 2007. 464 p.
16. Bratus' A.S., Novozhilov A.S., Platonov A.P. *Dinamicheskie sistemy i modeli biologii [Dynamic systems and models of biology]*. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010. 400 p. [in Russian].
17. Kabanikhin S.I., Krivorotko O.I. Mathematical modeling of the Wuhan COVID-2019 epidemic and inverse problems. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2020. Vol. 60. Pp. 1889–1899.
18. Ghosh K., Ghosh A.K. Study of COVID-19 epidemiological evolution in India with a multi-wave SIR model. *Nonlinear Dynamics*, 2022. Vol. 109. Pp. 47–55.
19. Leonov A., Nagornov O., Tyufilin S. Modeling of Mechanisms of Wave Formation for COVID-19 Epidemic. *Mathematics*, 2022. Vol. 11. No. 1. P. 167.
20. Israel H. *Atmospheric electricity*. Jerusalem: Keter Press, 1973.
21. Smirnov B. M. Elektricheskij cikl v zemnoj atmosfere [The electric cycle in the Earth's atmosphere]. *Uspekhi physicheskikh nauki*, 2014. Vol. 184(11). Pp. 1153–1176 (in Russian).
22. Williams E. The global electrical circuit: A review. *Atmospheric Research*, 2009. Vol. 91. Pp. 140–152.
23. Vargaftik N.B. *Spravochnik po teplofizicheskim svojstvam gazov i zhidkostej [Reference book on thermophysical properties of gases and liquids]*. Moscow, Nauka Publ., 1972. 721 p. [in Russian].
24. Mahmoud S., Hosni M., Jones B., Shugart J.M., Hosni M.H., Mead K.R., et al. Transport and containment of infectious disease expelled by coughing in an aircraft cabin. *ASHRAE Transactions*, 2020. Vol. 126. P. 375.
25. Grippi M.A., Elias Jack A., Fishman Jay A., et al. *Fishman's Pulmonary Diseases and Disorders*. New York: McGraw-Hill Education, 2015.
26. Clausen T.M., Sandoval D.R., Spliid C.B., Pihl J., Perret H.R., Painter C.D., et al. SARS-CoV-2 infection depends on cellular heparan sulfate and ACE2. *Cell*, 2020. Vol. 183(4). Pp. 1043–1057.
27. Kaplunenko V.G., Kosinov N.V., Skal'nyj A.V. Uyazvimye elektricheski zaryazhennye mesta SARS-CoV-2; elektricheskaya model' virusa i rol' mikroele-

mentov v ego inaktivacii [Vulnerable electrically charged areas of SARS-CoV-2; electrical model of the virus and the role of trace elements in its inactivation]. *Mikroelementy v medicine*, 2021. Vol. 22. No. 1. Pp. 3–20 (in Russian).

28. *Klimanov I.A., Soodaeva S.K.* Mekhanizmy formirovaniya kondensata vydyhaemogo vozduha i markery oksidativnogo stressa pri patologiyah respiratornogo trakta [Mechanisms of formation of exhaled air

condensate and markers of oxidative stress in pathologies of the respiratory tract]. *Pul'monologiya*, 2009. No. 2. Pp. 113–119 (in Russian).

29. *Stadnytskyi V., Bax C.E., Bax A., Anfinrud P.* The airborne lifetime of small speech droplets and their potential importance in SARS-CoV-2 transmission. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2020. Vol. 117(22). Pp. 11875–11877.

УДК 544.3.03, 536.23

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Ю.А. Богданова*, И.В. Маклашова, А.Д. Трофимова, А.А. Егоров

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

* e-mail: bogdanova.youlia@bk.ru

Поступила в редакцию: 31.10.2023

После доработки: 2.11.2023

Принята к публикации: 06.02.2024

В данной работе проанализированы аналитические выражения, имеющиеся в литературе, для расчета коэффициента вязкости и теплопроводности, полученные из кинетической теории Чепмена-Энскога. Предложена модификация выражений с учетом расчетного значения фактора сжимаемости $Z=PV/RT$, полученного в результате термодинамических расчетов с использованием теоретической модели уравнения состояния на основе теории возмущений. Для валидации модифицированных выражений рассмотрена модель Грина-Кубо для моделирования свойств переноса методом молекулярной динамики. Эта модель позволяет в рамках одного расчета одновременно вычислять как значение вязкости, так и теплопроводности, предварительно выполнив статирование системы в NpT -ансамбле. Проведено молекулярно-динамическое и термодинамическое моделирование свойств переноса индивидуальных изотопов гелия и водорода в области давлений 1–2000 атм и в интервале температур 200–3000 К. Определены значения коэффициентов вязкости и теплопроводности в рассматриваемом диапазоне давлений и температур. Показано, что применение модифицированных аналитических выражений для коэффициентов переноса позволяют рассчитать значения вязкости и теплопроводности изотопов гелия и водорода с учетом реального давления в системе в согласии с экспериментальными данными и результатами моделирования методом молекулярной динамики широком диапазоне изменения давлений и температур, включая сверхкритическую область.

Ключевые слова: свойства переноса, коэффициент теплопроводности, коэффициент вязкости, теория возмущений, межмолекулярный потенциал взаимодействия, уравнение состояния, флюиды, изотопы, гелий, водород.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.285

EDN РСУННУ

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время с развитием компьютерных технологий и высокопроизводительных вычислительных систем моделирование свойств веществ представляет большой интерес при решении практических задач в различных областях науки и промышленности. Широко известны полуэмпирические модели уравнений состояния (УРС), однако они имеют слабую физическую обоснованность, а также дают нереалистичные результаты в тех областях, где эмпирические константы не подбирались. В связи с этим актуальной является разработка теоретических моделей уравнения состояния, основанных на законах статистической физики и реалистичных потенциалах взаимодействия молекул. В свою очередь, достоинство методов молекулярной динамики – возможность моделирова-

ния атомных ансамблей как в условиях термического равновесия, так и при быстропротекающих неравновесных процессах.

Следовательно, реалистичное моделирование теплофизических свойств и свойств переноса веществ на основе теоретически обоснованных уравнений состояния и методами молекулярной динамики в тех областях, где проведение натуральных экспериментов невозможно, имеет фундаментальное научное значение и представляет значительный практический интерес для применения в различных областях науки и техники.

Таким образом, целью данной работы является анализ существующих аналитических выражений для расчета свойств переноса веществ, модификация аналитических выражений для расчета коэффициента вязкости и теплопроводности веществ, проведение молекулярно-

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

динамических расчетов для валидации термодинамических расчетов для газовых систем, содержащих изотопы гелия и водорода.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Теория возмущений, на основе которой стало возможным физически обоснованно рассчитывать термодинамические свойства флюидов при высоких давлениях, базируется на основных законах статистической механики в рамках следующих главных допущений. Рассматривается большой ансамбль молекул в заданном объеме V при известной температуре T . Считается, что все частицы взаимодействуют друг с другом посредством парного межмолекулярного потенциала. Понятие парного потенциала подразумевает, что взаимодействие двух частиц зависит только от их взаимного расположения и не зависит от положения каких-либо других частиц. Считается, что потенциал φ_{ij} взаимодействия молекулы i с молекулой j является сферически симметричным, т.е. зависит от единственной пространственной координаты r , представляющей собой расстояние между центрами инерции этих двух молекул: $\varphi_{ij} = \varphi_{ij}(r)$. Все парные потенциалы описывают взаимодействие, для которого характерно отталкивание при малых расстояниях и притяжение – при больших. Такие потенциалы позволяют на качественном уровне правильно описывать многие физические явления и свойства веществ.

Согласно теории возмущений энергия Гельмгольца (a , следовательно, и любая другая термодинамическая характеристика, получаемая путем дифференцирования энергии Гельмгольца) ансамбля молекул при заданных значениях температуры T и объема V представляет собой сумму двух составляющих. Первая из них – энергия Гельмгольца идеального газа при тех же T и V , а вторая – избыточная величина, обусловленная межмолекулярным взаимодействием. Одна из основных задач теорий возмущений как раз и состоит в точном определении избыточной энергии Гельмгольца.

К настоящему времени авторами для расчета теплофизических характеристик газовых смесей разработано теоретическое уравнение состояния [2] на основе теории возмущений KLR [1] с использованием различных потенциалов межатомного и межмолекулярного взаимодействия. Разработанная модель УРС позволяет рассчитывать теплофизические характеристики газо-

вых смесей и параметры уравнения состояния в широком диапазоне давления и температуры с высокой точностью и быстродействием.

В данной работе для описания межчастичного взаимодействия используется двухпараметрический потенциал Леннарда-Джонса:

$$\varphi = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где r – расстояние между центрами частиц; ε – глубина потенциальной ямы; σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Параметры σ и ε являются характеристиками атомов соответствующего вещества.

Авторами ранее были определены и валидированы параметры потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса для изотопов гелия и водорода (табл. 1), позволяющие с высокой точностью моделировать теплофизические свойства индивидуальных изотопов и их смесевых композиций.

Таблица 1. Наборы потенциальных параметров изотопов водорода и гелия

Изотоп	$T \leq 500$ К		$T > 500$ К	
	ε/k_B , К	σ , А	ε/k_B , К	σ , А
^4He	10.8	2.588	10.8	2.57
H_2	33.3	2.968	33.3	2.948
D_2	34.9	2.948	34.9	2.938

Методика расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности газов

Вязкость газа определяется парными соударениями составляющих его частиц. Молекулярно-кинетическая теория объясняет вязкость движением и взаимодействием молекул. В газах расстояния между молекулами существенно больше радиуса действия молекулярных сил, поэтому вязкость газов определяется главным образом молекулярным движением. Между движущимися относительно друг друга слоями газа происходит постоянный обмен молекулами, обусловленный их непрерывным хаотическим (тепловым) движением. Переход молекул из одного слоя в соседний, движущийся с иной скоростью, приводит к переносу от слоя к слою определенного количества движения. В результате медленные слои ускоряются, а более быстрые замедляются. Работа внешней силы, уравновешивающей вязкое сопротивление и под-

держивающей установившееся течение, полностью переходит в теплоту.

Вязкость газа слабо зависит от его плотности (давления), так как при сжатии газа общее количество молекул, переходящих из слоя в слой, увеличивается, но зато каждая молекула менее глубоко проникает в соседний слой и переносит меньшее количество движения (закон Максвелла). Для вязкости идеальных газов в молекулярно-кинетической теории дается следующее соотношение [3]:

$$\eta = \frac{1}{3} \rho \bar{v} \bar{l}, \quad (2)$$

где η – вязкость; ρ – плотность газа; \bar{v} – средняя скорость молекул; \bar{l} – средняя длина свободного пробега молекулы между двумя соударениями ее с другими молекулами. Так как возрастает с повышением температуры T (несколько возрастает также и \bar{l}), то вязкость газов увеличивается при нагревании (пропорционально). Для очень разреженных газов понятие «вязкость» теряет смысл.

Для плотных газов такое допущение не применимо. Теория вязкости плотных газов была предложена Энскогом [4], который предполагал, что передача количества движения в газе от слоя к слою осуществляется не только молекулами, центры которых проходят через разделяющую эти слои плоскость, но и молекулами, центры которых при столкновении находятся по обе стороны воображаемой плоскости раздела.

На основе литературного обзора [3–13] были проанализированы аналитические зависимости для вязкости в широком диапазоне изменения давления и температуры. Наиболее достоверными являются коэффициенты переноса, полученные из строгой кинетической теории Чепмена–Энскога с применением модели взаимодействия Леннарда-Джонса.

Аналитические выражения для расчета вязкости были проанализированы путем сравнения с имеющимися экспериментальными данными по вязкости отдельных изотопов водорода и гелия [3, 9, 10, 13, 14].

Для верификации выбраны следующие зависимости вязкости, дающие наиболее достоверные результаты. Это формула для расчета вязкости, полученная из уравнения Больцмана для твердых сфер [5]:

$$\eta_B = \frac{5}{16d^2} \cdot \sqrt{\frac{m}{\pi} k_B T}, \quad (3)$$

где $d(T, P)$ – диаметр твердых сфер; m – масса частицы; k_B – постоянная Больцмана. В [6] показано, что выражение (3) соответствует коэффициенту вязкости для идеального газа, состоящего из твердосферных частиц. Поэтому это выражение применимо лишь в области невысоких давлений, близких к атмосферному. В [8] для выражения (3) используется дополнительный числовой множитель 1.016, не имеющий физического обоснования. Наши исследования показали, что добавление этого множителя для расчета вязкости индивидуальных веществ не дает однозначного увеличения точности расчетов. Поэтому в данной работе используется классическое выражение (3), полученное из уравнения Больцмана.

Для плотных газов в области повышенных давлений в [6, 7, 8, 13] представлены аналитические выражения для расчета вязкости на основе модели твердых сфер. Все они записаны в различных переменных, однако приводят к идентичным результатам. В данной работе использовалось выражение, полученное в результате суммирования вязкости движения и вязкости за счет столкновений молекул, предложенное Энскогом для определения вязкости плотных газов [4, 13]:

$$\eta = \frac{\eta_B}{g(T, P)} \left[1 + \frac{4}{5} (4\xi g) + (4\xi g)^2 \left(\frac{4}{25} + \frac{48}{25\pi} \right) \right], \quad (4)$$

где $g = g(T, P)$ – функция распределения твердых сфер в точке контакта; $\xi = \frac{\pi}{6} \rho_N d^3$ – коэффициент упаковки твердых сфер; $\rho_N = N/V$ – численная плотность; d – диаметр твердых сфер.

Входящие в выражения (4) значения функции распределения $g(T, p)$ и диаметра d твердых сфер определяются согласно методике [15], которая является неотъемлемой частью модели УРС [2] на основе термодинамической теории возмущений.

Вклад величин, обусловленных движением и столкновением молекул, в значение вязкости (4) можно выразить следующим образом [4, 13]:

$$\eta_{\text{кин}} = \frac{\eta_B}{g(T, P)} \left[1 + \frac{4}{5} (4\xi g) \right], \quad (5)$$

$$\eta_{\text{столк}} = \frac{\eta_B}{g(T, P)} \left[(4\xi g)^2 \left(\frac{4}{25} + \frac{48}{25\pi} \right) \right]. \quad (6)$$

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Для верификации расчета вязкости индивидуальных веществ выбраны выражения (3)–(4), а также выражение (5), чтобы показать влияние вклада столкновений молекул в плотных газах в области повышенных давлений.

На основании выполненных в предыдущей работе исследований было показано, что при нормальном давлении все исследуемые выражения приводят к одинаковым результатам. Однако при увеличении давления расчеты на основе выражения (4) имеют более высокую точность по сравнению с выражениями (3) и (5). Также очевидно, что учет лишь движения частиц в области повышенных давлений является неверным, и необходимо дополнительно учитывать вклад от столкновений молекул, что было показано в [4, 13].

Наши исследования показали, что результаты расчетов коэффициента вязкости, согласно выражению (4), в области повышенных давлений превышают экспериментальные данные. Это обусловлено тем, что выражение (4) было разработано с использованием значений давления для потенциала жестких сфер. В данной работе аналитическое выражение (4) было скорректировано с учетом реального значения фактора сжимаемости $Z = PV/RT$, полученного на основе теоретической модели УРС [2]:

$$\eta = \frac{\eta_B}{g(T, P)} \times \left[1 + \frac{4}{5}(Z-1) + (Z-1)^2 \left(\frac{4}{25} + \frac{48}{25\pi} \right) \right], \quad (7)$$

где $Z = PV/RT$ – фактор сжимаемости.

Теплопроводность – один из видов переноса теплоты (энергии теплового движения микрочастиц) от более нагретых частей тела к менее нагретым, приводящий к выравниванию температуры. При теплопроводности перенос энергии в теле осуществляется в результате непосредственной передачи энергии от частиц (молекул, атомов, электронов), обладающих большей энергией, частицам с меньшей энергией.

На основе элементарной кинетической теории получены соотношения, связывающие теплопроводность и вязкость газов [4]:

$$\lambda = \frac{1}{3} \rho \bar{v} \bar{l} c_v = \eta \cdot c_v, \quad (8)$$

где η – вязкость; ρ – плотность газа; \bar{v} – средняя скорость молекул; \bar{l} – средняя длина свободного пробега молекулы между двумя соударениями

ее с другими молекулами; c_v – теплоемкость одной молекулы газа при постоянном объеме.

В данной работе для расчета коэффициента теплопроводности использовалось выражение, предложенное Энскогом [6]:

$$\lambda = \frac{15}{4} \cdot \frac{3k_B}{2m} \cdot \frac{\eta_B}{g(T, P)} \times \left[1 + \frac{6}{5}(4\xi g) + (4\xi g)^2 \left(\frac{9}{25} + \frac{32}{25\pi} \right) \right], \quad (9)$$

где $g = g(T, P)$ – функция распределения твердых сфер в точке контакта; $\xi = \frac{\pi}{6} \rho_N d^3$ – коэффициент упаковки твердых сфер; $\rho_N = N/V$ – численная плотность; d – диаметр твердых сфер; m – масса молекулы; k_B – постоянная Больцмана.

С учетом реального значения фактора сжимаемости данное выражение было модифицировано аналогично (9):

$$\lambda = \frac{15}{4} \cdot \frac{3k_B}{2m} \cdot \frac{\eta_B}{g(T, P)} \times \left[1 + \frac{6}{5}(Z-1) + (Z-1)^2 \left(\frac{9}{25} + \frac{32}{25\pi} \right) \right]. \quad (10)$$

Расчеты в данной работе в рамках термодинамического моделирования проводились на основе теоретической модели УРС [2] и выражений для (4), (7) – для вязкости и выражений для (9), (10) – для теплопроводности с целью исследования точности выбранных выражений.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование расчета термодинамических свойств и коэффициентов переноса проводилось с использованием программного пакета LAMMPS [16].

Рассматривается система с постоянным числом частиц N при заданном давлении p и температуре T . Под частицами подразумеваются одноатомные молекулы гелия или двухатомные молекулы водорода.

В качестве основы для выполнения расчетов свойств газов использовалась расчетная суперячейка в форме куба размером $20 \times 20 \times 20 \text{ \AA}$, содержащая 8000 частиц, равномерно распределенных по расчетной ячейке. Используются периодические граничные условия. Шаг интегри-

рования варьировался в зависимости от температуры от 4 фс (при 300 К) до 1 фс (при 3000 К). Общая длительность расчета составила от 1 до 4 нс (1000000 шагов расчета).

Вязкость является мерой способности флюида передавать импульс в направлении, перпендикулярном направлению скорости или импульса. Другими словами, это сопротивление флюида сдвигу, которое можно записать как

$$J = -\eta \nabla V_{\text{stream}},$$

где J – поток импульса в единицах импульса на площадь за время; V_{stream} – пространственный градиент скорости флюида, движущегося в другом направлении, по нормали к области, через которую течет импульс. Вязкость имеет значения, выраженные в единицах давления-времени (Па·с).

Теплопроводность является мерой способности материала передавать тепловую энергию в диффузионном режиме в соответствии с законом Фурье:

$$J = -\lambda \nabla T,$$

где J – тепловой поток в единицах энергии на площадь за время; а ∇T – пространственный градиент температуры. Таким образом, теплопроводность имеет размерность единицы энергии на расстояние за время на градус К и часто аппроксимируется как изотропная величина, т.е. как скаляр.

В программном пакете LAMMPS есть возможность реализовать шесть способов расчета вязкости и четыре метода расчета теплопроводности, включая как равновесные, так и неравновесные методы.

В данной работе для расчета коэффициентов переноса был выбран метод Грина–Кубо [17, 18], который позволяет одновременно рассчитать вязкость и теплопроводность в полностью равновесном моделировании.

Для вязкости выражение для вязкости на основе метода Грина–Кубо:

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle P_{xz}(t_0) P_{xz}(t_0 + t) \rangle_{t_0} dt,$$

которая связывает среднее значение автокорреляции по ансамблю тензора напряжения/давления к вязкости. Это можно сделать в полностью равновесном моделировании, в отличие от двух предыдущих неравновесных методов, где импульс непрерывно течет через область моделирования.

В случае расчета теплопроводности формула Грина–Кубо связывает среднее значение авто-

корреляции по ансамблю потока тепла к теплопроводности:

$$\lambda = \frac{V}{k_B T^2} \int_0^\infty \langle J_x(0) J_x(t) \rangle dt = \frac{V}{3k_B T^2} \int_0^\infty \langle \mathbf{J}(0) \cdot \mathbf{J}(t) \rangle dt.$$

Поток тепла можно рассчитать по флуктуациям потенциала на атом и кинетические энергии и тензор напряжений на атом в равновесной МД.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Изотопы гелия

Валидация выбранных аналитических выражений и методик молекулярно-динамического моделирования для расчета вязкости и теплопроводности гелия проведена на основе экспериментальных данных при 1 атм [3, 9, 14] и при повышенных давлениях [3, 14]. Результаты расчетов в сравнении с данными [3, 9, 14] для нормального давления представлены графически на рис. 1 – для вязкости и на рис. 2 – для теплопроводности в зависимости от температуры.

Для повышенных давлений представлены результаты расчетов вязкости на рис. 3 для изотерм 223, 273 и 473 К в зависимости от давления, результаты расчетов теплопроводности представлены на рис. 4 для изотерм 300, 500, 800 К в сравнении с экспериментальными данными.

В табл. 2–3 представлена статистика отклонений результатов расчета вязкости гелия по формулам (4) и (7) от данных [3, 9, 14].

Таблица 2. Статистика отклонений расчетных значений вязкости гелия от данных [3, 9, 14] при 1 атм (среднее/ максимальное значение, %) в диапазоне температур > 200 К

Выражение	223.15–1273.15 К [3]	200–2200 К [9]	200–2273 К [14]
(4)	3.64/7.98	5.62/9.24	6.84/11.18
(7)	3.64/7.98	5.62/9.24	6.84/11.18

Таблица 3. Статистика отклонений расчетных значений вязкости гелия от данных [3, 14] при повышенных давлениях (среднее/максимальное значение, %)

Выражение	223.15–298.15 К 7–70 МПа [3]	273.15–1273.15 К 0.1–50 МПа [14]
(4)	2.25/4.69	3.04/8.38
(7)	0.87/2.17	2.44/8.38

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА
МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

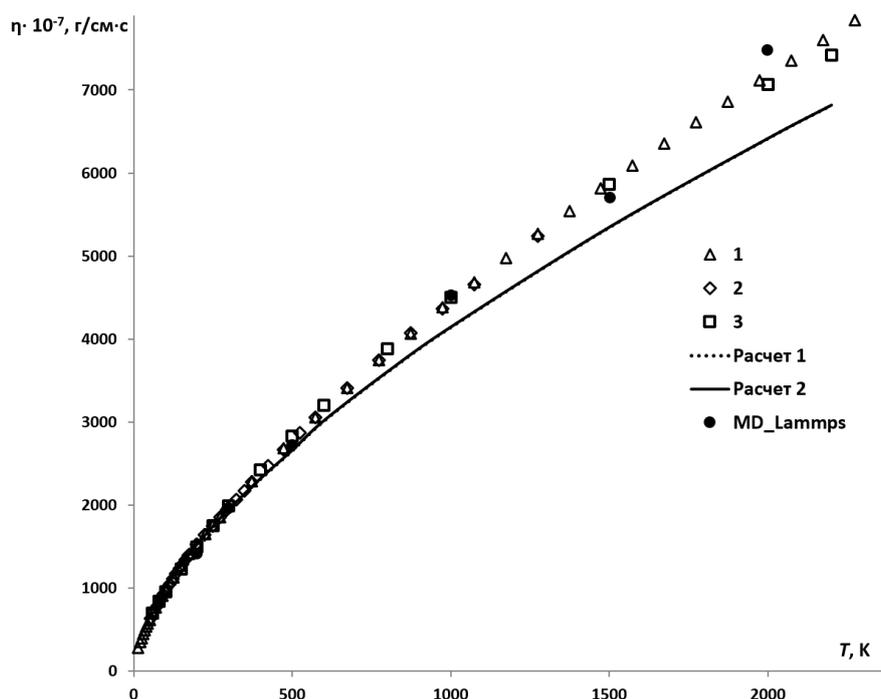


Рис. 1. Вязкость гелия в зависимости от температуры при 1 атм. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (4), расчет 2 – по формуле (7). Символы MD_Lammps – результаты МД-моделирования, остальные символы – экспериментальные данные: 1 – [14], 2 – [3], 3 – [9]

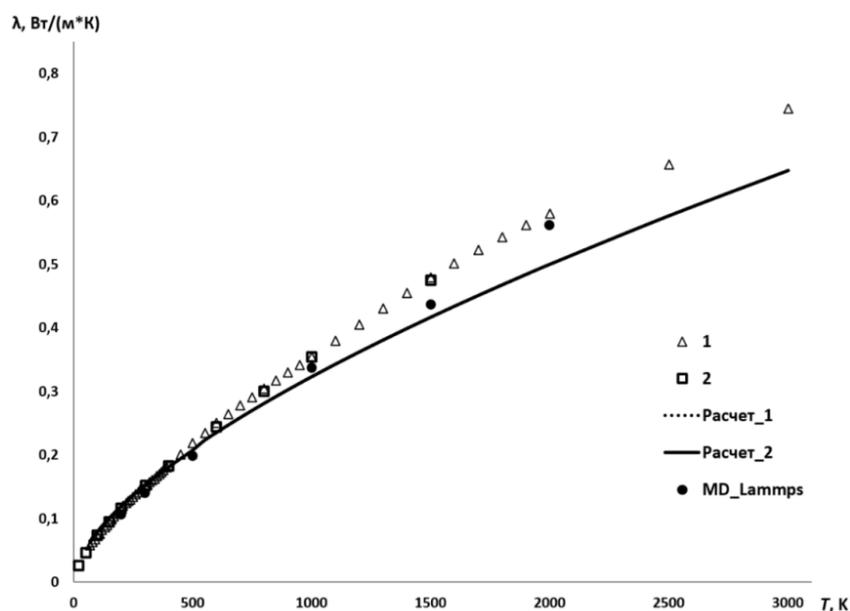


Рис. 2. Теплопроводность гелия в зависимости от температуры при 1 атм. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (9), расчет 2 – по формуле (10). Символы MD_Lammps – результаты МД-моделирования, остальные символы – экспериментальные данные: 1 – [14], 2 – [9]

Рис. 3–6 и табл. 2–5 показывают, что при нормальном давлении все исследуемые выражения для расчета вязкости и теплопроводности приводят к одинаковым результатам. Однако при увеличении давления расчеты на основе

модифицированных в данной работе выражений (7) и (10) имеют более высокую точность по сравнению с предыдущими выражениями (4) и (9).

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА
МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

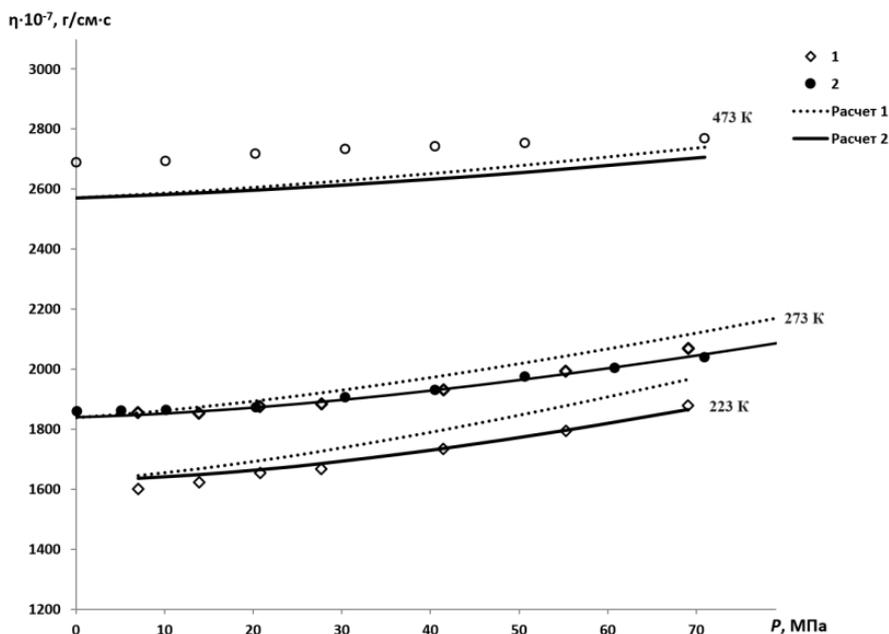


Рис. 3. Вязкость гелия в зависимости от давления на изотермах. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (4), расчет 2 – по формуле (7). Символы – экспериментальные данные: 1 – [14], 2 – [3]

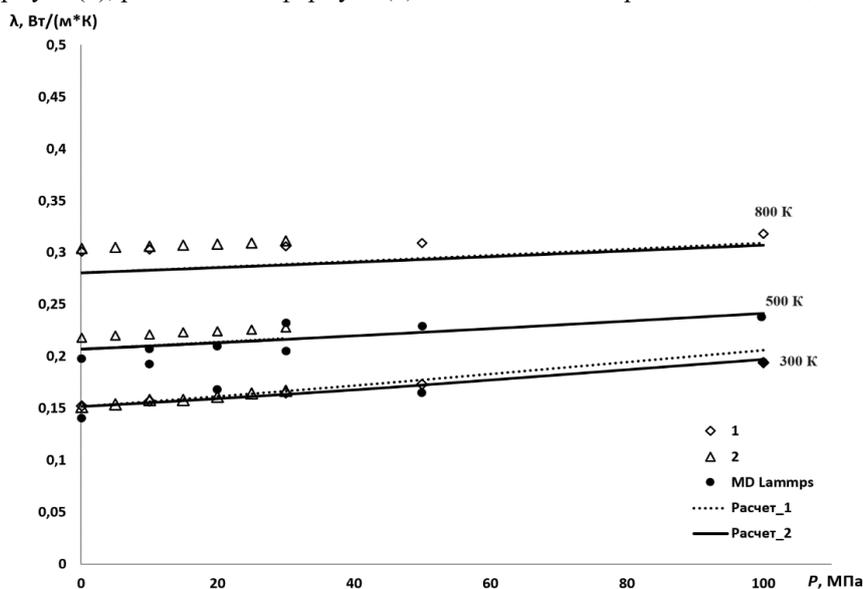


Рис. 4. Теплопроводность гелия в зависимости давления на изотермах. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (9), расчет 2 – по формуле (10). Символы MD_Lammpr – результаты МД-моделирования, остальные символы – экспериментальные данные: 1 – [14], 2 – [9]

В табл. 4–5 представлена статистика отклонений результатов расчета теплопроводности по формулам (9) и (10) от данных [9, 14].

Таблица 4. Статистика отклонений расчетных значений теплопроводности гелия от данных [9, 14] при 1 атм (среднее/ максимальное значение, %) в диапазоне температур > 200 К

Выражение	200–1500 К [9]	200–3000 К [14]
(9)	5.1/12.3	5.6/13.9
(10)	5.1/12.3	5.6/13.9

Таблица 5. Статистика отклонений расчетных значений теплопроводности гелия от данных [9, 14] при повышенных давлениях (среднее/максимальное значение, %)

Выражение	200–1500 К 0.1–100 МПа [9]	300–1500 К 0.1–30 МПа [14]
(9)	4.8/12.3	6.8/13.7
(10)	4.5/12.3	6.7/13.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Изотопы водорода

Верификация выбранных выражений (4), (7) для расчета вязкости изотопов водорода (H_2 и D_2) и выражений (9), (10) – для теплопроводности проведена на основе экспериментальных

данных при 1 атм [3, 9] и при повышенных давлениях [3, 10, 14].

Результаты расчетов вязкости в зависимости от температуры при давлении 1 атм для водорода и дейтерия представлены графически на рис. 5 и 6 соответственно.

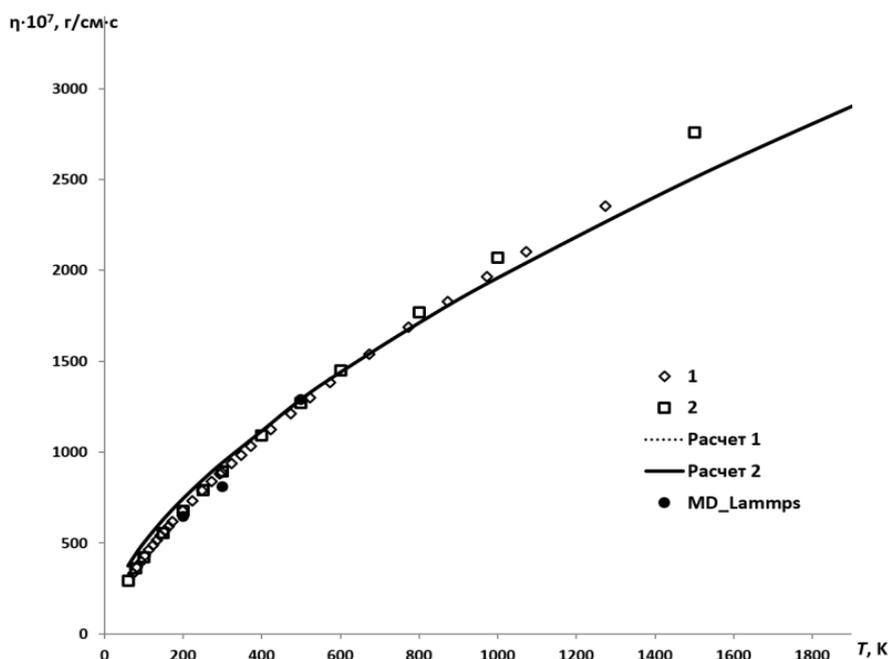


Рис. 5. Вязкость водорода H_2 в зависимости от температуры при 1 атм. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (4), расчет 2 – по формуле (7). Символы MD_Lammps – результаты МД-моделирования, остальные символы – экспериментальные данные: 1 – [3], 2 – [9]

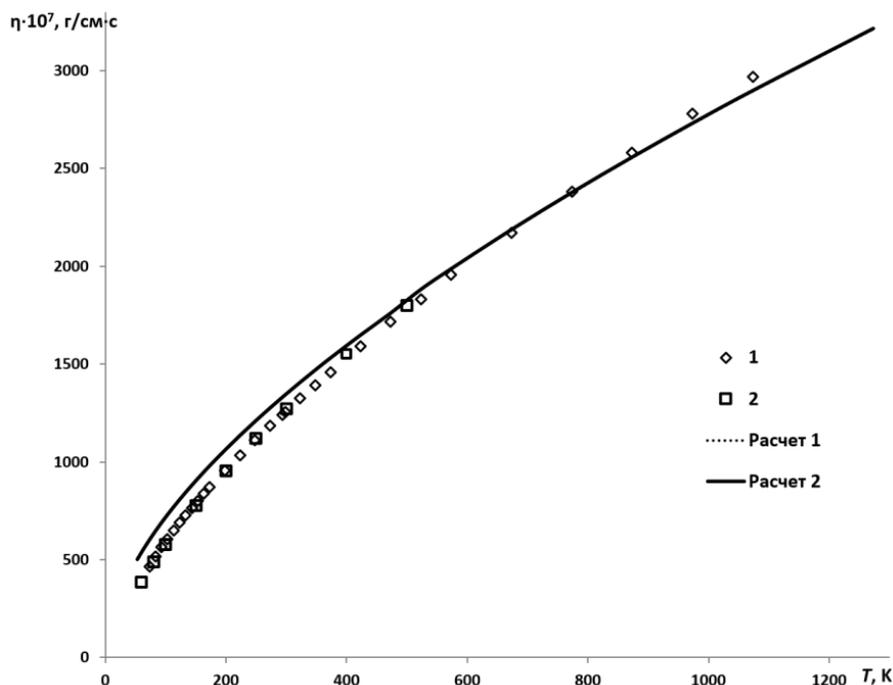


Рис. 6. Вязкость дейтерия D_2 в зависимости от температуры при 1 атм. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (4), расчет 2 – по формуле (7). Символы – экспериментальные данные: 1 – [3], 2 – [9]

В табл. 6–7 представлена статистика отклонений результатов расчета вязкости водорода и дейтерия по формулам (4) и (7) от данных [3, 9].

Таблица 6. Статистика отклонений расчетных значений вязкости водорода H₂ от данных [3, 9] при 1 атм (среднее/ максимальное значение, %)

Выражение	198.15–1273.15 К [3]	200–2000 К [9]
(4)	3.97/9.68	5.65/10.78
(7)	3.95/9.61	5.64/10.78

Таблица 7. Статистика отклонений расчетных значений вязкости водорода D₂ от данных [3, 9] при 1 атм (среднее/ максимальное значение, %)

Выражение	198.15–1273.15 К [3]	200–500 К [9]
(4)	4.28/9.67	5.97/11.6
(7)	4.26/9.61	5.93/11.53

Результаты расчетов вязкости H₂ в зависимости от давления на изотермах 300, 500, 1000 К представлены графически на рис. 7.

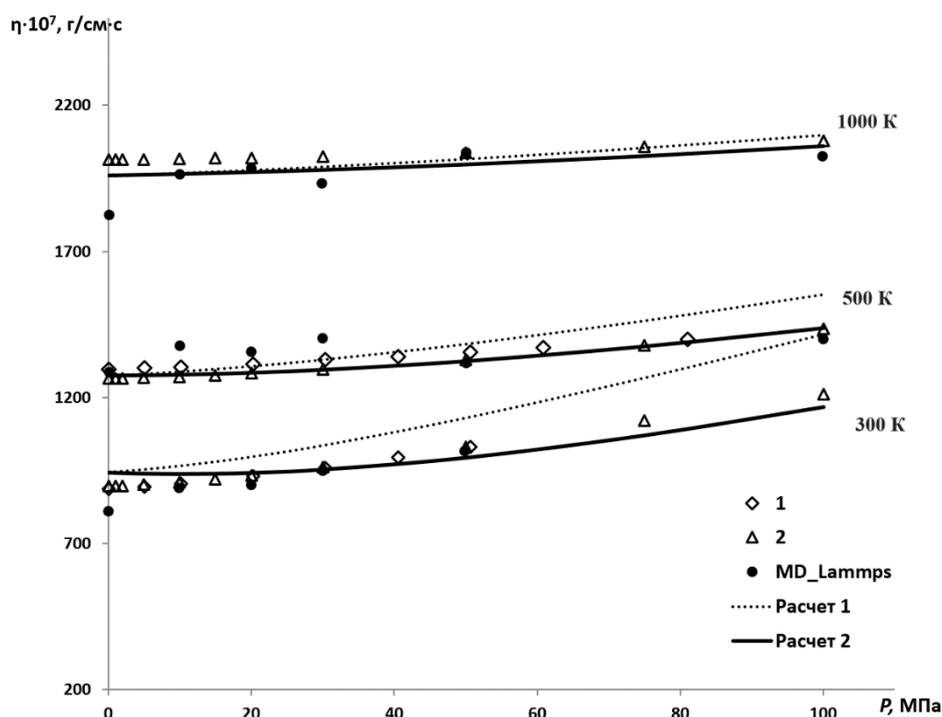


Рис. 7. Вязкость водорода в зависимости от давления на изотермах. Линии – результаты расчетов: расчет 1 – по формуле (4), расчет 2 – по формуле (7). Символы MD_Lammps – результаты МД-моделирования, остальные символы – экспериментальные данные: 1– [3], 2 – [14]

В табл. 8–9 представлена статистика отклонений результатов расчета вязкости водорода и дейтерия соответственно по формулам (4) и (7) от данных [3, 10, 14].

Таблица 8. Статистика отклонений расчетных значений вязкости водорода H₂ от данных [3, 10, 14] при повышенных давлениях (среднее/ максимальное значение, %)

Выражение	288.15 – 523.15 К 0.1–81 МПа [3]	298.15 – 423.15 К 2–200 МПа [10]	300–1000 К 0.1–100 МПа [14]
(4)	6.9/15.83	8.6/14.6	3.45/17.1
(7)	2.83/6.45	1.96/4.99	1.7/5.34

Таблица 9. Статистика отклонений расчетных значений вязкости водорода D₂ от данных [10] при повышенных давлениях (среднее/ максимальное значение, %)

Выражение	298.15 – 348.15 К 2–200 МПа [10]
(4)	11.88/24.58
(7)	3.07/6.03

На основании проведенных верификаций формул для расчета вязкости и теплопроводности гелия и водорода на основе термодинамического моделирования [2] оптимальными по точности являются модифицированные в данной работе выражения (7) и (10) соответственно, которые и использовались для дальнейших рас-

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

четов коэффициентов переноса изотопов гелия и водорода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для моделирования термодинамических и теплофизических свойств различных веществ и физических процессов широко применяется компьютерное моделирование методом молекулярной динамики. Программный пакет LAMMPS позволяет моделировать не только термодинамические свойства веществ и смесей, в нем также реализуются несколько методов расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности. В данной работе был рассмотрен метод Грина–Кубо, согласно которому тепловой поток рассчитывается на основе флуктуаций потенциальной и кинетической энергии и тензора напряжений в стационарном равновесном моделировании.

Для термодинамического моделирования используется теоретическое уравнение состояния на основе теории возмущений KLRR-T, позволяющее рассчитать термические свойства газов (флюидов) в широкой области давлений и температур. Одновременно с термодинамическими параметрами теория возмущений позволяет рассчитывать диаметр частицы в приближении твердых сфер и радиальную функцию распределения твердых сфер, что дает возможность определять свойства переноса вещества на основе кинетической теории Чепмена–Энскога.

В данной работе показано, что учет расчетного значения фактора сжимаемости $Z = PV/RT$, полученного с использованием теоретической модели уравнения состояния, позволяет повысить точность рассчитываемых значений коэффициентов переноса в области умеренных температур.

Сопоставление результатов молекулярно-динамического и термодинамического моделирования свойств гелия и водорода, выполненных в данной работе, с экспериментальными данными демонстрирует согласие рассчитанных термодинамических свойств и свойств переноса исследуемых веществ в широком диапазоне давлений и температур.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 8 «Физика изотопов водорода», направление 8.1 «Исследования в области взаи-

модействия изотопов водорода с твердым телом»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H. A perturbation theory of classical equilibrium fluids // *J. Chem. Phys.*, 1985. V. 82. № 1. Pp. 414–423.
2. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Victorov S.B., Gubina T.V. A theoretical model of the equation of state of a two-component fluid with the Exp-6 potential based on perturbation theory // *High Temperature*, 2015. V. 53. № 4. P. 481–490.
3. Голубев И.Ф. Вязкость газов и газовых смесей (Справочное руководство). М.: ГИФМЛ, 1959. С. 375.
4. Enskog D. Kinetic theory of heat conductivity, viscosity and diffusion in certain condensed gases and liquids // *Kgl Svenska Vetenskapsakad Handl*, 1922. V. 63. P. 1–44.
5. Chapman S., Cowling T.G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* // Cambridge: Cambridge University Press, 1970.
6. Marques Jr.W., Kremer G.M. On Enskog's Dense Gas Theory. 11. The Linearized Burnett Equations for Monatomic Gases // *Revista Brasileira de Fisica*, 1991. V. 21. № 3. P. 402–417.
7. Protopapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D. Theory of transport in liquid metals. II. Calculation of shear viscosity coefficients // *Chemical Physics*, 1975. V. 8. Iss. 1–2. P. 17–26.
8. Montanero J.M., Santos A. Monte Carlo simulation method for the Enskog equation // *Phys. Rev. E*, 1996. V. 54. P. 438–444.
9. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 365 с.
10. Mitchels A., Shipper A., Rintoul W. The viscosity of hydrogen and deuterium at pressures up to 2000 atmospheres // *Physica*, 1953. V. 19. № 10. P. 1011–1028.
11. Jakobsen Hugo A. *Chemical Reactor Modeling. Multiphase Reactive Flows*, 2008. Springer. 1244 p.
12. Viswanath D.S. *Viscosity of Liquids: Theory, Estimation, Experiment, and Data*, 2008. Springer. 660 p.
13. McElhannon W.A.Jr. *Transport Properties of Binary Mixtures of Dense Hard-Sphere Fluids*, 1978. LSU Historical Dissertations and Theses. 3290. [Электронный ресурс]. URL: https://digitalcommons.lsu.edu/gradschool_disstheses/3290 (дата обращения 10.09.2023)
14. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей // М.: Наука, 1972. 720 с.
15. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Maklashova I.V. Radial distribution functions for molecules in the universal equation of state model for gaseous/fluid/condensed systems // *Physics of Atomic Nuclei*, 2019. V. 82. № 11. P. 1486.

16. Sandia National Labs [Электронный ресурс]. URL: http://lammps.sandia.gov/doc/Section_intro.html (дата обращения 10.09.2023).

17. *Kubo R.* Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems // Journal

of the Physical Society of Japan, 1957. V. 12. P. 570–586.

18. *Green M.S.* Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids // The Journal of Chemical Physics, 1954. V. 22. P. 398–413.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2024, vol. 13, no. 1, pp. 40–51

MODELLING OF THE TRANSFER PROPERTIES OF HELIUM AND HYDROGEN ISOTOPES BY THERMODYNAMICS AND MOLECULAR DYNAMICS METHODS

*Yu.A. Bogdanova**, *I.V. Maklashova*, *A.D. Trofimova*, *A.A. Egorov*

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409, Russia

* e-mail: bogdanova.youlia@bk.ru

Received October 31, 2023; revised November 02, 2023; accepted February 6, 2024

This paper analyzes the analytical expressions available in the literature for calculating the coefficient of viscosity and thermal conductivity obtained from the Chapman–Enskog kinetic theory. A modification of the expressions is proposed taking into account the calculated value of the compressibility factor $Z = PV/RT$, obtained as a result of thermodynamic calculations using a theoretical model of the equation of state based on perturbation theory. To validate the modified expressions, the Green-Kubo model for modeling transport properties by the molecular dynamics method is considered. This model allows, within one calculation, to simultaneously calculate both the viscosity and thermal conductivity values, having previously performed the statization of the system in the NpT ensemble. Molecular dynamics and thermodynamic modeling of the transport properties of individual helium and hydrogen isotopes was carried out in the pressure range of 1–2000 atm and in the temperature range of 200–3000 K. The values of the viscosity and thermal conductivity coefficients were determined in the considered pressure and temperature range. It is shown that the use of modified analytical expressions for transfer coefficients makes it possible to calculate the viscosity and thermal conductivity of helium and hydrogen isotopes, taking into account the real pressure in the system in accordance with experimental data and the results of molecular dynamics modeling over a wide range of pressures and temperatures, including the supercritical region.

Keywords: transport properties, thermal conductivity coefficient, viscosity coefficient, perturbation theory, intermolecular interaction potential, equation of state, fluids, isotopes, helium, hydrogen.

REFERENCES

1. *Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H.* A perturbation theory of classical equilibrium fluids. *J. Chem. Phys.*, 1985. Vol. 82(1). Pp. 414–423.
2. *Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Victorov S.B., Gubina T.V.* A theoretical model of the equation of state of a two-component fluid with the Exp-6 potential based on perturbation theory. *High Temperature*, 2015. Vol. 53. No. 4. Pp. 481–490.
3. *Golubev I.F.* Vyazkost' gazov i gazovyh smesej (Spravochnoe rukovodstvo) [Viscosity of gas and gas mixtures (Reference Guide)]. Moscow, GIFML Publ., 1959. P. 375 (in Russian).
4. *Enskog D.* Kinetic theory of heat conductivity, viscosity and diffusion in certain condensed gases and liquids. *Kgl Svenska Vetenskapskad Handl*, 1922. Vol. 63. Pp. 1–44.
5. *Chapman S, Cowling T.G.* The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. Cambridge, Cambridge University Press, 1970.
6. *Marques Jr.W., Kremer G.M.* On Enskog's Dense Gas Theory. 11. The Linearized Burnett Equations for Monatomic Gases. *Revista Brasileira de Física*, 1991. Vol. 21. No. 3. Pp. 402–417.
7. *Protopapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D.* Theory of transport in liquid metals. II. Calculation of shear viscosity coefficients. *Chemical Physics*, 1975. Vol. 8. Is. 1–2. Pp. 17–26.
8. *Montanero J.M., Santos A.* Monte Carlo simulation method for the Enskog equation. *Phys. Rev. E*, 1996. Vol. 54. Pp. 438–444.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ИЗОТОПОВ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА
МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

9. Fizicheskie velichiny: Spr. / Pod red. I.S. Grigor'eva, E.Z. Mejlihova. [Physical quantities: Ref. / Ed. I.S. Grigorieva, E.Z. Meilikhova]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 365 p. (in Russian).

10. *Mitchels A, Shipper A., Rintoul W.* The viscosity of hydrogen and deuterium at pressures up to 2000 atmospheres. *Physica*, 1953. Vol. 19 (10). Pp. 1011–1028.

11. *Jakobsen Hugo A.* Chemical Reactor Modeling. Multiphase Reactive Flows. 2008 Springer, 1244 p.

12. *Visvanath D.S.* Viscosity of Liquids Theory, Estimation, Experiment, and 2008 Springer. 660 p.

13. *Mcellhannon W.A.Jr.* Transport Properties of Binary Mixtures of Dense Hard-Sphere Fluids, 1978. LSU Historical Dissertations and Theses. 3290. Available at: https://digitalcommons.lsu.edu/gradschool_disstheses/3290 (accessed 10.09.2023)

14. *Vargaftik N.B.* Spravochnik po teplofizicheskim svoystvam gazov i zhidkostej [Handbook of Thermo-

physical Properties of Gases and Liquids]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 720 p. (in Russian).

15. *Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., Maklashova I.V.* Radial distribution functions for molecules in the universal equation of state model for gaseous/fluid/condensed systems. *Physics of Atomic Nuclei*, 2019. Vol. 82. No. 11. Pp. 1486.

16. Sandia National Labs. Available at: http://lammps.sandia.gov/doc/Section_intro.html (accessed 10.09.2023).

17. *Kubo R.* Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1957. Vol. 12. Pp. 570–586.

18. *Green M.S.* Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 1954. Vol. 22. Pp. 398–413.

УДК 621.383.933:621.3.029.78

АНАЛИЗ ВАТТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕТОДИОДОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.Р. Расул¹, К.Н. Орлова^{1}*

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409, Россия

*e-mail: KNOrlova@mephi.ru

Поступила в редакцию: 11.11.2023

После доработки: 15.01.2024

Принята к публикации: 23.01.2024

В работе показан анализ изменения формы ватт-амперных характеристик светодиодов, изготовленных из различных полупроводниковых структур AlGaInP, InGaN и GaP при изменении уровня инжекции неосновных носителей заряда в активную область светодиода. Показано, что мощность излучения является критериальным параметром светодиодов, основной светотехнической характеристикой и функцией от приложенного прямого тока. Для светодиодов на основе AlGaInP с множественными квантовыми ямами различного типа монтажа наблюдается существенное снижение мощности излучения для СД желтого цвета свечения. Для приборов на основе GaP наблюдается обратная зависимость. Высказано предположение о проявлении примесных центров в качестве центров безызлучательной рекомбинации. Показано, что с высокой точностью для всех типов светодиодов и изготовленных из различных полупроводниковых структур ватт-амперные характеристики описываются одной степенной функцией. Установлено, что показатель степени α в полученном соотношении определяет режим работы светодиода и характеризует квантовый выход индивидуального прибора и чувствительность фотодиода, используемого при измерениях в фотометрическом шаре и различен для различных диапазонов токов. Сделано предположение о различном поведении СД в указанных диапазонах токов при наличии каких-либо внешних воздействий (наработка, старение, длительная эксплуатация, радиационное воздействие).

Ключевые слова: светодиоды, ватт-амперная характеристика, выходная мощность излучения.

DOI: 10.26583/vestnik.2024.308

EDN ZRTVZK

ВВЕДЕНИЕ

Светодиоды давно заняли существенное место в жизнедеятельности человека. Если в начале производства светодиодов их, как правило, использовали в качестве индикаторов, то сейчас полупроводниковый диод на основе p - n -перехода может полностью заменить освещение на основе ламп накаливания и в быту, и в специальных условиях [1, 2]. Разработчики постоянно совершенствуют светодиоды, контролируя при этом систему параметров и характеристик, таких как концентрация носителей заряда, концентрация примесей, вольт-амперная характеристика, вольт-фарадная характеристика, ватт-амперная характеристика, ватт-вольтная характеристика и др. [3–5]. Особое значение для разработчиков и потребителей представляет собой совершенствование основной выходной характеристики: ватт-амперной (далее – ВтАХ), которая является основой светотехнической и вольт-амперной характеристики, как основной электрофизической характеристики.

К настоящему времени имеется достаточно большое количество работ по исследованию влияния различных факторов на ВтАХ данных приборов. Исследованию зависимости прохождения электронов через p - n -переход посвящено множество работ [6, 7]. Однако недостаточно сведений о влиянии уровня инжекции на вид ВтАХ СД, в то время как обычно внимание исследователей уделяется исследованию электрофизических характеристик [8–9]. При этом присутствуют литературные данные, посвященные анализу ВтАХ определенного типа СД, но эти сведения не обладают общностью для всех типов СД, поэтому их можно считать разрозненными. В данной работе особое внимание будет уделено рассмотрению ВтАХ различных типов СД с точки зрения зависимости основной светотехнической характеристики от механизма протекания тока и уровня инжекции неосновных носителей заряда в активный слой.

На данный момент практически отсутствуют исследования взаимосвязи исходной формы

АНАЛИЗ ВАТТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕТОДИОДОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

ВТAX СД радиационной стойкостью и надежностью этих приборов. На практике же существуют способы потенциальной отбраковки СД по их выходным характеристикам, т.е. наблюдаются различные формы ВТAX, что говорит о зависимости вида ВТAX и радиационной стойкости и надежности СД. Таким образом, результаты анализа формы ВТAX различных типов СД, не подвергавшихся каким-либо воздействиям, будут в дальнейшем использованы для определения взаимосвязи вида ВТAX СД и их радиационной стойкости и надежности и являются, несомненно, актуальными.

Целью работы является исследование изменения формы ВТAX СД, изготовленных из различных полупроводниковых структур при изменении уровня инжекции неосновных носителей заряда в активную область СД.

ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИСПОЛЬЗУЕМОЕ ОБОРУДОВАНИЕ

В данной работе объектами исследования являлись промышленные СД видимого диапазона длин волн на основе гетероструктур AlGaInP с множественными квантовыми ямами и без (выводные и поверхностного монтажа), светодиоды на основе гетероструктур InGaN с множественными квантовыми ямами и на основе GaP. Все используемые в работе материалы представлены в табл. 1.

Таблица 1. Обозначения и характеристики используемых материалов

Тип	Материал	Обозначение	Цвет, длины волны
I	AlGaInP	I-1-Ж1	590 желтый
		I-1-Ж1_СМД	587 желтый
		I-1-Кр1	630 красный
		I-1-Кр1_СМД	624 красный
		I-2-Ж1	590 желтый
		I-2-Ж2	590 желтый
		I-2-Кр1	630 красный
II	InGaN	II-Б	465 белый
III	GaP	III-Ж	567 желтый
		III-Кр	693 красный

Далее рассмотрим более подробно используемые для изготовления СД полупроводниковые структуры, конструктивные особен-

ности и основные технологические приемы изготовления СД.

Для изготовления кристаллов СД на основе гетероструктур AlGaInP с множественными квантовыми ямами были использованы зарубежные двойные гетероструктуры AlGaInP типа Es-WLR05BB, ES-SMHRPN28 (красные), EsWUSOL5BC (красные), UED-MB028SOL-AU-02 (красные), ES-SMSOPN14 (красные), TK515UOH-G (красные), ODY08RF (желтые), EsWLY5BB (желтые) фирмы «EPSTAR».

Использование гетероструктур позволяет обеспечить наилучшие выходные параметры и эксплуатационные свойства СД [10, 11]. Поэтому при рассмотрении действия различных внешних факторов на СД мы уделим отдельное внимание стойкости гетероструктур, поскольку именно исходный полупроводниковый материал во многом определяет эксплуатационные свойства получаемых приборов [12, 13]. Именно исследование стойкости гетероструктур позволяет установить виды вводимых внешним воздействием дефектов и их комплексов и установить их влияние на основные характеристики гетероструктур.

Структуры AlGaInP фирмы EPSTAR, OSRAM, TYNTEK – выращены на монокристаллической кремниевой подложке толщиной 350 мкм. Сверху выращен буферный слой GaP толщиной 16 мкм. Далее был выращен активный слой AlGaInP с МКЯ, а затем верхний подконтактный слой InGaP, толщина которых составляла 1.8–2.0 мкм.

По типу конструкции исследуемые СД на основе AlGaInP делились на:

выводные (на базе корпусов КИ1 и КИ2), представлены под кодом I-1-Ж1 и I-1-Кр1;

СД поверхностного монтажа (I-1-Ж1_СМД и I-1-Кр1_СМД).

Для изготовления кристаллов СД на основе гетероструктур AlGaInP без множественных квантовых ям использовались гетероструктуры красного цвета свечения BL-L524UEC и гетероструктуры желтого цвета свечения BL-L524UYC, BL-L542UYC. Причем желтого свечения были выбраны светодиоды двух типов: I-2-Ж1 и I-2-Ж2 соответственно.

Данные СД обладают большим углом рассеяния светового потока благодаря тому, что излучающий кристалл расположен ближе к передней стенке линзы. Такой тип СД получил название Straw Hat («соломенная шляпа»), внешне напоминающий обычные цилиндри-

ческие двухвыводные СД, однако с меньшей высотой и увеличенным радиусом линзы.

Для всех исследуемых СД на основе гетероструктур на основе AlGaInP без множественных квантовых ям величина прямого рабочего тока составляет $I_{\text{раб}} = 30$ мА в непрерывном режиме питания, а напряжение питания при этом не превышало $U_{\text{раб}} = 2.5$ В. Все гетероструктуры СД красного свечения имели длину волны в максимуме спектра электролюминесценции $\lambda = 0.63$ мкм. В то же время все гетероструктуры СД желтого свечения имели длину волны в максимуме спектра электролюминесценции – $\lambda = 0.590$ мкм, что свидетельствует о близком элементном составе активного слоя.

Гетероструктуры с квантовыми ямами InGaN позволяют изготовить СД синего и зеленого свечения. Для изготовления СД белого свечения были использованы гетероструктуры InGaN синего свечения и люминофор для получения требуемого спектра излучения (II-Б).

Гетероструктуры InGaN/GaN с МКЯ были изготовлены методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений на подложке из сапфира толщиной 150 мкм. Буферный слой GaN формировался в условиях насыщения атмосферы водородом. Величина наращиваемого буферного слоя GaN составляла 3.5 мкм. Затем формировался активный слой с множественными квантовыми ямами в условиях насыщения атмосферы азотом. При формировании слоев использовались органические соединения TMGa, TEGa, TMIIn, NH₃.

Для подложек эпитаксиальных структур светодиодов на основе GaP (III-Ж и III-Кр) использовались монокристаллы фосфида галлия GaP(Zn,O), выращенные методом Чохральского. Этот метод для данных кристаллов является наиболее эффективным [11]. Легирование азотом и/или цинком и кислородом применяется в зависимости от получения необходимого цвета свечения. Исторически сложилось так, что именно на материале GaP отработывалась методика оценки радиационной стойкости полупроводниковых приборов.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для каждого СД измеряли ВтАХ в фотометрическом шаре, который обеспечивает задание прямого тока СД в диапазоне (0 – 500) мА с шагом 1 мА и погрешностью не более ± 3 %. Измерение тока на выходе фото-

приемника измерялось с погрешностью измерения тока фотоприемника ± 2 %. На основании измеренного тока фотоприемника производили расчет мощности излучения, используя калибровочные зависимости чувствительности фотоприемника от длины волны излучения.

Рассмотрим подробно ВтАХ СД из различных материалов. Для всех СД наблюдаются отличия в выходной мощности излучения для приборов разного цвета свечения. На рис. 1 представлены ватт-амперные характеристики СД на основе гетероструктур AlGaInP с множественными квантовыми ямами. Для СД желтого ($\lambda = 590$) и красного ($\lambda = 630$) цвета свечения наблюдается различие мощности излучения в два раза. Для СД желтого цвета свечения ($\lambda = 590$) наблюдается снижение мощности излучения, достигающее 25 % от СД красного цвета свечения ($\lambda = 630$). Таким образом, для исходных СД на основе AlGaInP с множественными квантовыми ямами различного типа монтажа наблюдается существенное снижение мощности излучения для СД желтого цвета свечения. Аналогичные зависимости наблюдаются для СД на основе гетероструктур AlGaInP без включения квантовых ям (рис. 2).

Для СД на основе GaP наблюдается обратная зависимость: для СД желтого цвета свечения на мощность излучения в области высоких токов и высоких напряжений на 40 % выше, чем у светодиодов красного цвета свечения с $\lambda = 693$ нм. В отличие от СД на основе гетероструктур AlGaInP, для изготовления СД на основе GaP желтого цвета свечения используется легирование одной примесью азотом, а для изготовления СД красного цвета свечения используются дополнительные примеси – цинк и кислород, что объясняет отмеченное различие в мощности излучения исходных СД.

Рассмотрим более подробно зависимости мощности излучения светодиода от протекающего в СД тока. В результате аппроксимации зависимостей мощности излучения от прямого тока всех типов СД было выявлено, что все кривые с высокой точностью описываются степенной функцией

$$P = A \cdot I_{\text{раб}}^{\alpha}, \quad (1)$$

где A – коэффициент пропорциональности, величина которого характеризует квантовый выход индивидуального СД и чувствительность фотодиода, используемого при измерениях в фотометрическом шаре; α – показатель степен-

АНАЛИЗ ВАТТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕТОДИОДОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

ной функции прямого тока, который зависит от области прямых токов, в которой рассматривается ВТАХ: $\alpha = 2$ – в области высоких

прямых токов; $\alpha = 1$ – в области средних значений прямых токов; $\alpha = 0$ – в области низких токов и, соответственно, низких напряжений.

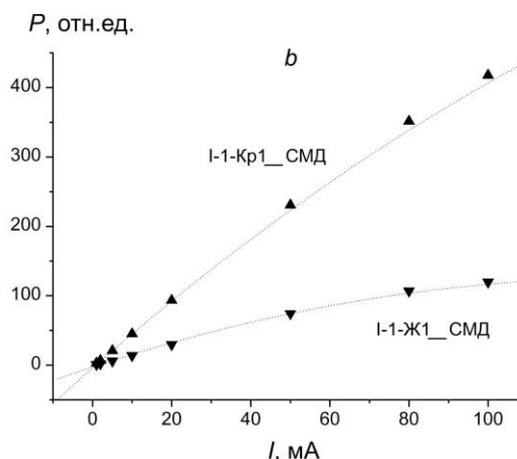
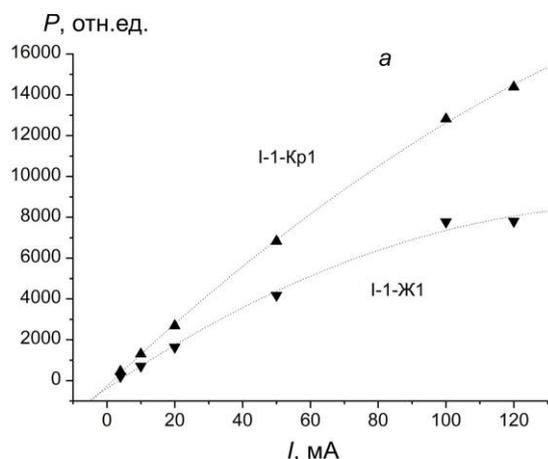


Рис. 1. ВТАХ исходных СД на основе AlGaInP: а) с множественными квантовыми ямами (I-1-Ж1 и I-1-Кр1); б) поверхностного монтажа (I-1-Ж1_СМД и I-1-Кр1_СМД) соответственно. Линии – функции, описывающие выделенные стадии снижения мощности излучения СД

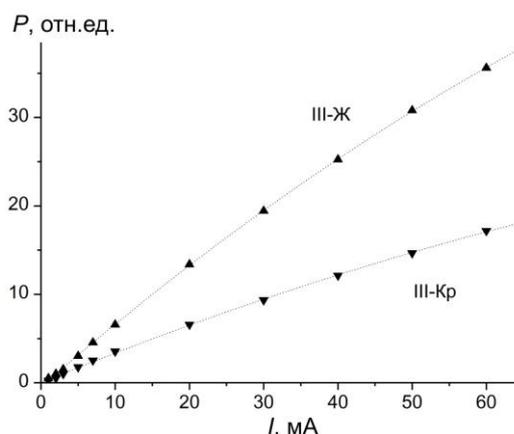
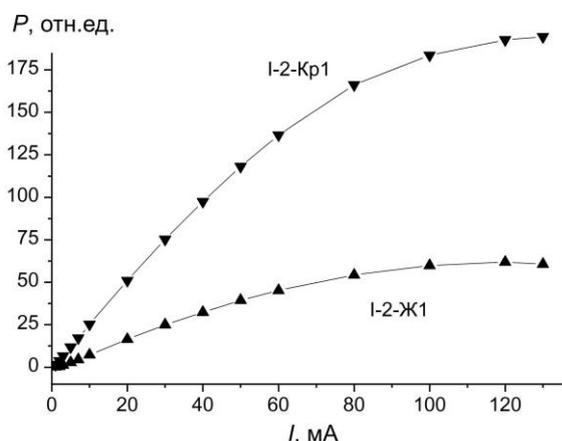


Рис. 2. ВТАХ исходных СД на основе AlGaInP (I-2-Ж1 и I-2-Кр1). Линии – функции, описывающие выделенные стадии снижения мощности излучения СД

Рис. 3. ВТАХ исходных СД на основе GaP (III-Ж и III-Кр). Линии – функции, описывающие выделенные стадии снижения мощности излучения СД

Хочется отметить, что не для всех исходных СД наблюдается работа СД при $\alpha = 0$, когда мощность излучения СД есть величина постоянная и не зависящая от протекающего в СД тока. Указанное состояние описывает работу СД в режиме низкой инжекции электронов в активную область СД. Тогда можно сделать вывод, что при $\alpha = 1$ и при $\alpha = 2$ СД работает в режимах средней и высокой инжекции носителей заряда в активную область соответственно. Данное предположение было подтверждено расчетами концентрации инжек-

тируемых электронов и концентрации дырок в p -области.

Как было показано ранее, ВТАХ, представленная в полулогарифмическом масштабе [16], также позволяет однозначно идентифицировать механизмы протекания прямого тока и выделить области со средним и высоким уровнем инжекции неосновных носителей в активный слой СД при прямом смещении [14]. Поэтому наиболее четко возможно выделить режим низкой инжекции электронов, используя логарифмический / полулогарифмический масштаб (рис. 4). Для большинства исходных при-

боров режим низкой инжекции не наблюдается ввиду высокого напряжения порога проводимости при относительно низкой чувствительности измерительной аппаратуры в диапазоне токов $0 \text{ мА} < I < 5 \text{ мА}$.

Рассмотрим более подробно ВтАХ в областях средних и высоких токов. На рис. 5 видно, что рост мощности излучения всех исследуемых образцов с ростом прямого тока наиболее точно описывается линейной функцией, что соответствует $P \sim I_{\text{раб}}$ и коэффициенту $\alpha = 1$ и подтверждает, что в указанном диапазоне токов приборы работают в режиме средней инжекции электронов.

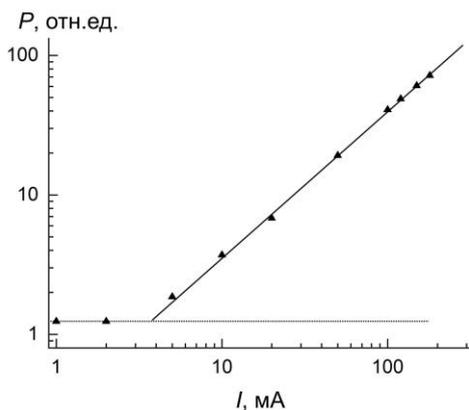


Рис. 4. ВтАХ исходных СД на основе гетероструктур AlGaInP с множественными квантовыми ямами: символы – экспериментальные данные; линии – установленные зависимости; горизонтальная пунктирная линия – уровень низкой инжекции электронов

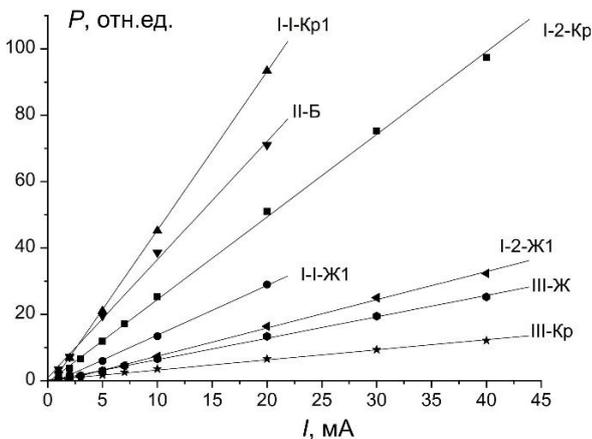


Рис. 5. ВтАХ исходных СД на основе AlGaInP, AlGaN и GaP в области средних токов. Линии – функции, описывающие выделенные стадии снижения мощности излучения СД

На рис. 6 показаны ВтАХ исходных СД на основе AlGaInP, AlGaN и GaP в области высоких токов, мощность излучения которых изменяется в зависимости от рабочего тока по закону $P \sim I_{\text{раб}}^2$ и описывается формулой (1) при $\alpha = 2$.

Таким образом, при воздействии внешних факторов на СД необходимо более подробно рассматривать характеристики СД в трех областях инжекции электронов в активную область СД:

- сильной инжекции;
- средней инжекции;
- низкой инжекции.

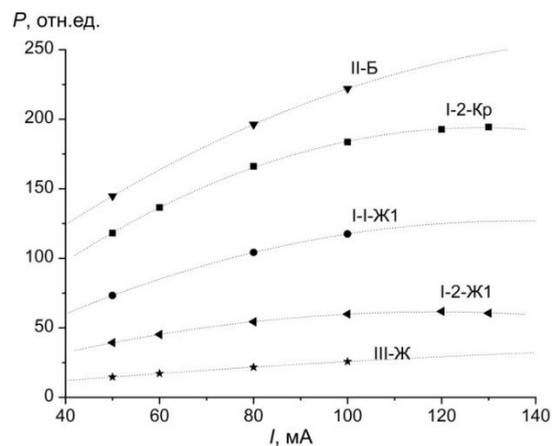


Рис. 6. ВтАХ исходных СД на основе AlGaInP, AlGaN и GaP в области высоких токов. Линии – функции, описывающие выделенные стадии снижения мощности излучения СД

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании установленных закономерностей можно сделать следующие выводы:

1. ВтАХ СД, изготовленных из различных материалов, имеют различную исходную форму, причем мощность излучения является функцией от приложенного прямого тока, однако с высокой точностью описываются одной функцией.

2. ВтАХ СД позволяют выделить области низкой, средней и высокой инжекции неосновных носителей заряда в активную область СД. При этом область средней инжекции электронов характерна для всех типов СД, в то время как низкая и высокая инжекции наблюдаются для некоторых СД.

3. Мощность излучения СД изменяется по закону $P = A \cdot I_{\text{раб}}^\alpha$, причем показатель степени

АНАЛИЗ ВАТТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕТОДИОДОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ ИЗ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

α определяет режим работы СД и равен: $\alpha = 2$ – в области высоких токов; $\alpha = 1$ – в области средних токов; $\alpha = 0$ – в области низких значений токов. И возможно предполагать различное поведение СД в указанных режимах при наличии каких-либо внешних воздействий (наработка, старение, длительная эксплуатация, радиационное воздействие).

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Статья написана без привлечения внешних источников финансирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гонтарук О.Н., Коваленко А.В., Конорева О.В., Малый Е. В., Петренко И.В., Пинковская М.Б., Тартачник В.П. Электролюминисценция серийных светодиодов GaP в зеленой области спектра // Журн. прикладной спектроскопии, 2013. Т. 80. № 6. С. 859–863.
2. Wilson D.J., Schneider K., Hönl S, Anderson M., Baumgartner Ya., Czornomaz L., Kippenberg T.J., Seidler P. Integrated gallium phosphide nonlinear photonics // Nature Photonics, 2020. V. 14. № 1. P. 57–62.
3. John S. Different Types of in Light Emitting Diodes (LED) Materials and Challenges-A Brief Review // International Journal for Research in Applied Science and Engineering Technology, 2018. V. 6. P. 4418–4420.
4. Фролов И.В., Радаев О.А., Сергеев В.А. Динамические характеристики и квантовая эффективность отдельных спектральных составляющих спектра излучения InGaN светодиодов // Журн. радиоэлектроники, 2018. № 9. С. 1–14.
5. Chang M.H., Das D., Varde P.V., Pecht M. Light emitting diodes reliability review // Microelectronics Reliability, 2012. V. 52. № 5. Pp. 762–782.
6. Коган Л.М. Светодиоды нового поколения для светосигнальных и осветительных приборов // Новости светотехники, 2001. № 7–8. С. 34–35.
7. Brudnyi V., Prudaev I., Oleinik V., Marmaluk A. Electron irradiation degradation of AlGaInP/GaAs light-emitting diodes // Physica status solidi (a), 2018. V. 215. № 8. P. 1700445.
8. Сергеев В.А., Фролов И.В., Радаев О.А. Связь параметров фототока светодиодов на основе GaN гетероструктур с изменением их характеристик при термотокковых испытаниях // Журн. радиоэлектроники, 2019. № 3. С. 1–7.
9. Брудный В.Н., Пешев В.В. Влияние электронного (зарядового) состояния Е-ловушек на эффективность их накопления в n-GaAs при облучении // Физика и техника полупроводников, 2003. Т. 37. № 1.
10. Шуберт Ф.Е. Светодиоды. М.: Физматлит, 2008. 495 с.
11. Градобоев А.В., Орлова К.Н., Арефьев К.П., Асанов И.А. Исследование гетероструктур AlGaInP при облучении гамма-квантами в области перестройки дефектной структуры // Известия высших учебных заведений. Физика, 2013. V. 56. № 11–3. С. 116–119.
12. Orlova K.N., Gradoboev A.V. Investigation of AlGaInP heterostructures under gamma-irradiation in the field of restructuring defect structure // Physica status solidi (c), 2015. V. 12. Iss. 1–2. P. 35–38.
13. Градобоев А. В., Орлова К. Н., Асанов И. А. Дegradация параметров гетероструктур AlGaInP при облучении быстрыми нейтронами и гамма-квантами // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру, 2013. № 2. С. 64–66.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2024, vol. 13, no. 1, pp. 52–58

ANALYSIS OF WATT-AMPERE CHARACTERISTICS OF LEDS MADE FROM VARIOUS MATERIALS

A.R. Rasul¹, K.N. Orlova^{1,*}

¹National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409, Russia

*e-mail: KNOrlova@mephi.ru

Received November 11, 2023; revised January 15, 2024; accepted January 23, 2024

The paper shows the changes in the watt-ampere characteristics shape of LEDs made from various semiconductor structures AlGaInP, InGaN and GaP with variation of the electron injection into the active region of the LED changes. It is shown that the light output power is a criterion parameter of LEDs, the main lighting characteristic and a function of the applied forward current. For LEDs based on AlGaInP with multiple quantum wells of various types of installation, a significant decrease in the emission power is observed for yellow LEDs. For GaP-based devices, an inverse relationship is observed. It has been suggested that impurity centers manifest themselves as nonradiative recombination centers. It is described with high accuracy for all types of LEDs by a

single power function. It has been established that the exponent α determines the LEDs operating mode and characterizes the light output power of an individual LED and the photodiode sensitivity used in measurements in a photometric sphere. It is different for various current ranges. It is assumed that LEDs behave differently in the specified current ranges in the presence of any external influences (operation, aging, long-term operation, radiation exposure).

Keywords: LEDs, watt-ampere characteristic, light output power.

REFERENCES

1. Gontaruk O.N., Kovalenko A.V., Konoreva O.V., Mal'j E.V., Petrenko I.V., Pinkovskaya M.B., Tartachnik V.P. Elektroluminescenciya serijnyh svetodiodov GaP v zelenoj oblasti spektra [Electroluminescence of GaP serial LEDs in the green region of the spectrum]. Zhurnal prikladnoj spektroskopii. 2013. Vol. 80. No. 6. Pp. 859–863 (in Russian).
2. Wilson D.J., Schneider K., Hönl S, Anderson M., Baumgartner Ya., Czornomaz L., Kippenberg T.J. Seidler P. Integrated gallium phosphide nonlinear photonics. Nature Photonics. 2020. Vol. 14. No. 1. Pp. 57–62.
3. John S. Different Types of in Light Emitting Diodes (LED) Materials and Challenges-A Brief Review. International Journal for Research in Applied Science and Engineering Technology. 2018. Vol. 6. Pp. 4418–4420.
4. Frolov I.V., Radaev O.A., Sergeev V.A. Dinamicheskie karakteristiki i kvantovaya effektivnost' otdel'nyh spektral'nyh sostavlyayushchih spektra izlucheniya InGaN svetodiodov [Dynamic Characteristics and Quantum Efficiency of Individual Spectral Components of the Emission Spectrum of InGaN LEDs]. Zhurnal radioelektroniki. 2018. No. 9. Pp. 1–14 (in Russian).
5. Chang M.H., Das D., Varde P.V., Pecht M. Light emitting diodes reliability review. Microelectronics Reliability. 2012. Vol. 52. No. 5. Pp. 762–782.
6. Kogan L.M. Svetodiody novogo pokoleniya dlya svetosignal'nyh i osvetitel'nyh priborov [New generation LEDs for lighting and lighting devices]. Novosti svetotekhniki. 2001. No. 7–8. Pp. 34–35 (in Russian).
7. Brudnyi V., Prudaev I., Oleinik V., Marmaluk A. Electron irradiation degradation of AlGaInP/GaAs light-emitting diodes. Physica status solidi (a), 2018. Vol. 215. No. 8. P. 1700445.
8. Sergeev V.A., Frolov I.V., Radaev O.A. Svyaz' parametrov fototoka svetodiodov na osnove GaN geterostruktur s izmeneniyem ih karakteristik pri termotokovyh ispytaniyah [Correlation between the Photocurrent Parameters of LEDs Based on GaN Heterostructures and Changes in Their Characteristics during Thermal Current Tests]. Zhurnal radioelektroniki, 2019. No. 3. Pp. 1–7 (in Russian).
9. Brudnyj V.N., Peshev V.V. Vliyaniye elektronogo (zaryadovogo) sostoyaniya E-lovushhek na effektivnost' ih nakopleniya v n-GaAs pri obluchenii [Influence of the electronic (charge) state of E-traps on the efficiency of their accumulation in n-GaAs under irradiation] Fizika i tekhnika poluprovodnikov, 2003. Vol. 37. No. 1. Pp. 22–28 (in Russian).
10. Shubert F.E. Svetodiody [LEDs]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2008. 495 p. (in Russian).
11. Gradoboev A.V., Orlova K.N., Arefev K.P., Asanov I.A. Issledovanie geterostruktur AlGaInP pri obluchenii gamma-kvantami v oblasti perestrojki defektnoy struktury [Investigation of AlGaInP heterostructures under gamma-ray irradiation in the area of defect structure rearrangement]. Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Fizika, 2013. Vol. 56. No. 11–3. Pp. 116–119 (in Russian).
12. Orlova K.N., Gradoboev A.V. Investigation of AlGaInP heterostructures under gamma-irradiation in the field of restructuring defect structure //Physica status solidi (c), 2015. Vol. 12. No. 1–2. P. 35–38.
13. Gradoboev A.V., Orlova K.N., Asanov I.A. Degradaciya parametrov geterostruktur AlGaInP pri obluchenii bystryimi nejtronami i gamma-kvantami [Degradation of parameters of AlGaInP heterostructures under irradiation with fast neutrons and gamma rays]. Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Seriya: Fizika radiacionnogo vozdejstviya na radioelektronnuyu apparaturu, 2013. No. 2. Pp. 64–66 (in Russian).