

ИНСТИТУТ ТЕПЛОФИЗИКИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ РАН  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН  
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ



# Тезисы

*2-го научно-координационного  
совещания-симпозиума*

**ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ  
УЛЬТРАКОРОТКИХ ПРОЦЕССОВ В  
СИЛЬНОНЕРАВНОВЕСНЫХ СРЕДАХ**

Новый Афон – 2004

В сборнике представлены тезисы докладов 2-го научно-координационного совещания-симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон, 23 июля - 1 августа 2004 г.). Доклады отражают современное состояние исследований в следующих областях: фемтосекундная лазерная физика, релаксационные процессы и химические реакции во фронте ударных и детонационных волн, ударная прочность твёрдых тел, метастабильные состояния вещества при отрицательных давлениях и их распад, взаимодействие мощных ионных, электронных и лазерных пучков с веществом, неравновесная и неидеальная плазма, взаимодействие плазмы с высокоскоростными газовыми потоками, молекулярно-динамическое моделирование релаксации, физика ультрабыстрых биохимических процессов в биомолекулах.

Под редакцией:

Ефремова В.П., Нормана Г.Э., Савинцева А.П.,  
Кима В.В., Морозова И.В., Стегайлова В.В.

## **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

Фортов В.Е., сопредседатель, Президиум РАН, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва  
Карамурзов Б.С., сопредседатель, КБГУ, Нальчик  
Ефремов В.П., зам. председателя, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва  
Минцев В.Б., зам. председателя, ИПХФ РАН, Черноголовка  
Норман Г.Э., зам. председателя, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва  
Савинцев А.П., зам. председателя, КБГУ, Нальчик  
Ким В.В., учёный секретарь, ИПХФ РАН, Черноголовка  
Морозов И.В., учёный секретарь, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

Официальный сайт конференции  
**<http://www.ihed.ras.ru/afon04>**

Отпечатано в ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области

## ОГЛАВЛЕНИЕ

### ***ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ***

- Агранат М.Б., Ашитков С.И., Овчинников А.В.**  
Тераваттная фемтосекундная лазерная система гетерогенных ВВ. 6
- Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Ашитков С.И., Овчинников А.В., Шевелько А.П.**  
Сверхкороткий источник рентгеновского излучения. 7
- Савинцев А.П.**  
Усиление лазерных импульсов в активной среде на парах меди. 8
- Лозовик Ю.Е., Ключник А.В., Меркулов А.Л., Меркулова С.П.**  
Нанолокальная фемтосекундная спектроскопия и нанолитография. 9
- Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Коваленко С.А., Фарзтдинов В.М., Ernsting N.**  
Фемтосекундная спектроскопия релаксационных процессов в металлах и высокотемпературных сверхпроводниках. 10

### ***БИОФИЗИКА И БИОХИМИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ПРОЦЕССОВ***

- Савицкий А.П., Агранат М.Б., Feilitzsch T., Michel-Beyerle M.-E.**  
Кинетическая схема формирования флуоресцирующего состояния цветного белка asCP595. 11
- Лахно В.Д.**  
Моделирование переноса заряда в ДНК. 12
- Норман Г.Э.**  
Постановка задачи о молекулярно-динамическом моделировании релаксационных процессов в биомолекулах. 13

### ***НЕРАВНОВЕСНАЯ ПЛАЗМА, ВОЛНЫ ИОНИЗАЦИИ, ПРОБОЙ В ГАЗАХ***

- Аксенов В.С., Голуб В.В., Губин С.А., Ефремов В.П., Маклашова И.В.**  
Инициирование скользящего электродугового разряда в высокоскоростном потоке воздуха за фронтом ударной волны. 14
- Аксенов В.С., Голуб В.В., Губин С.А., Ефремов В.П., Маклашова И.В.**  
Аэродинамика развития скользящего электродугового разряда. 15
- Морозов И.В.**  
Эффективная частота столкновений частиц и ленгмюровские волны в неидеальной плазме. 16

### ***ТЕПЛОФИЗИКА ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ***

- Постнов В.И., Каган К.Л., Шахрай Д.В., Авдонин В.В.**  
Удельная электропроводность кристаллов фуллерена  $C_{60}$  в условиях динамического сжатия. 17
- Постнов В.И., Каган К.Л., Шахрай Д.В., Авдонин В.В.**  
Электропроводность калия и кальция в условиях динамического эксперимента. 18
- Коробенко В.Н., Савватимский А.И.**  
Плавление графита при нагреве электрическим током. 19
- Стегайлов В.В.**  
Моделирование гомо- и гетерогенных процессов плавления и распада перегретых кристаллов. 20

### ***УДАРНАЯ ПРОЧНОСТЬ ТВЁРДЫХ ТЕЛ, ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ДАВЛЕНИЯ***

- Канель Г.И.**  
Высокоскоростная деформация: задачи, результаты измерений и расчетов. 21
- Матвеев А.В., Андержанов К.И., Берзигияров П.К., Григорьев Д.А., Жарков А.П., Ким В.В., Ломоносов И.В., Острик А.В., Султанов В.Г., Шутов А.В.**  
Влияние моделей упругопластического поведения и разрушения материалов на результаты численного моделирования процессов высокоскоростного удара. 22
- Куксин А.Ю., Стегайлов В.В.**  
Предел устойчивости леннард-джонсовского кристалла. 23

### ***РЕЛАКСАЦИЯ И ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ ВО ФРОНТЕ УДАРНЫХ И ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН***

- Колесников С.А., Уткин А.В., Ананьин А.В.**  
Зона реакции в стационарных детонационных волнах в прессованных гетерогенных ВВ. 24
- Уткин А.В., Торунов С.И., Ефремов В.П., Алымов М.И., Фортгов В.Е.**  
Свойства системы  $CuO-V$  при ударно-волновом воздействии. 25
- Зубков П.И., Карташов А.М., Лукьянчиков Л.А., Свих В.Г.**  
О структуре детонационной волны в насыпных взрывчатых веществах по электрическим измерениям. 26
- Зубков П.И., Лукьянчиков Л.А., Бохонов Б.Б., Павлюхин Ю.Т., Толочко Б.П.**  
О разрыве связей в органических веществах при детонационных условиях. 27
- Зубков П.И., Толочко Б.П.**  
О механизме проводимости зоны химической реакции в детонационных волнах в конденсированных взрывчатых веществах. 28
- Еремин А.В.**  
Неравновесные процессы во фронте ударной волны. 29

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЩНЫХ ИОННЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И  
ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ С ВЕЩЕСТВОМ**

**Летуга С.Н.**

Релаксация высоких электронно-возбужденных состояний сложных молекул в конденсированных средах. 30

**Ефремов В.П.**

Взаимодействие импульсных потоков энергии с мишенями из наноматериалов. 31

**Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И.**

Поведение кристалла гидрида лития в условиях сверхвысоких давлений. 32

**Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И.**

Механизм металлизации ионных кристаллов под действием мощного импульсного лазерного излучения. 33

**Шутов А.В., Григорьев Д.А., Ким В.В., Грязнов В.К., Кулиш М.И., Ломоносов И.В.,  
Матвейчев А.В., Минцев В.Б., Николаев Д.Н., Острик А.В., Терновой В.Я., Шилкин Н.,  
Фортов В.Е., Адонин А., Варенцов Д., Ни П.А., Tahir N.A., Udrea S., Hoffmann D.H.H.**

Численное моделирование и сравнение с экспериментом воздействия пучка тяжелых ионов на тонкую свинцовую фольгу. 34

**Ким В.В., Григорьев Д.А., Кулиш М.И., Ломоносов И.В., Матвейчев А.В.,**

**Минцев В.Б., Николаев Д.Н., Острик А.В., Шилкин Н., Шутов А.В., Фортов В.Е., Адонин  
А., Варенцов Д., Ни П.А., Tahir N.A., Udrea S., Hoffman D.H.H.**

Компьютерное моделирование энерговклада пучка тяжелых ионов в тонкой свинцовой фольге в трехмерной постановке. 35

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИИ**

**Валуев И.А., Куксин А.Ю., Морозов И.В., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.**

Общие принципы молекулярно-динамического моделирования релаксационных процессов в плотных средах. 36

## ТЕРАВАТТНАЯ ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ СИСТЕМА

*Агранат М.Б., Ашитков С.И., Овчинников А.В.*

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

В данном сообщении представлены результаты работ по получению фемтосекундных импульсов тераваттной мощности в ближнем ИК диапазоне на длине волны 1240 нм в лазерной системе на основе элементов хром-форстерит. Эта лазерная система входит в состав Центра коллективного пользования российских и зарубежных учёных «Лазерный фемтосекундный комплекс» ИТЭС ОИВТ РАН. Лазерная система собрана на основе российских комплектующих изделий и не имеет на сегодняшний день аналогов в мире.

На рис.1 представлена блок-схема и выходные параметры лазера.

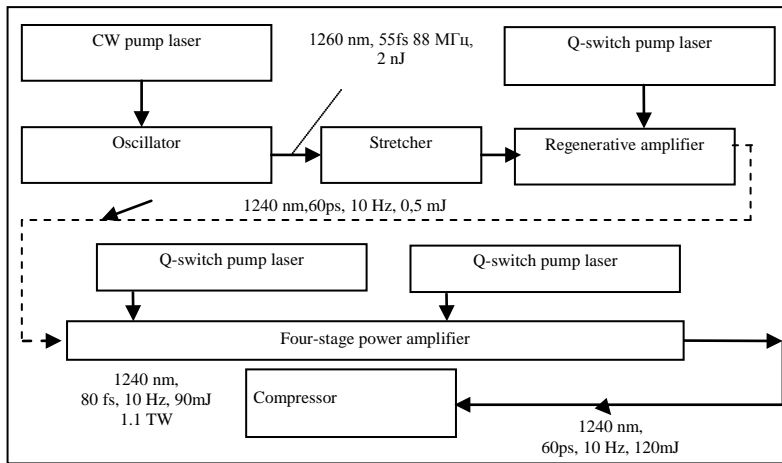


Рис.1. Блок-схема и выходные параметры лазера

Длительность лазерных импульсов на выходе компрессора определялась с помощью одноимпульсного автокоррелятора (ASF-20, ООО «Авеста-Проект»). Длительность импульса для профиля интенсивности  $\text{sech}^2$  по уровню FWHM составляла 80 фс.

Была проведена оценка контраста по автокорреляционной функции третьего порядка с помощью кросс-коррелятора (COMET-125, Avesta Project Ltd.). Результаты измерений представлены на рис.2. На рисунке 3 представлен профиль пучка в дальней зоне выходного лазерного импульса, полученный в фокальной плоскости линзы с фокусным расстоянием 2,5 м. Диаметр пятна на уровне  $e^{-2}$  составлял величину 750 мкм, что соответствует величине расходимости  $2 \times 10^{-4}$ .

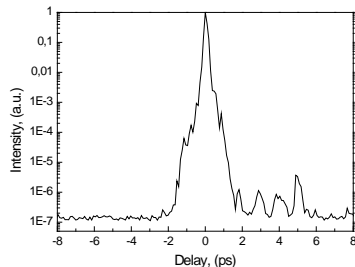


Рис.2. Контраст по мощности выходного лазерного импульса.

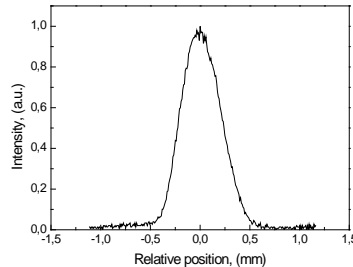


Рис.3. Распределение энергии в дальней зоне выходного лазерного импульса.

Таким образом, впервые реализована тераваттная фемтосекундная лазерная система на Cr:форстерите, генерирующая импульсы длительностью 80 фс с энергией 90 мДж на длине волны 1240 нм при частоте следования импульсов 10 Гц. Высокостабильная работа всей системы, высокая эффективность преобразования энергии накачки, при сравнительно низкой стоимости комплектующих позволяют надеяться, что подобные системы найдут широкое применение в решении широкого круга фундаментальных и технологических задач.

## СВЕРХКОРОТКИЙ ИСТОЧНИК РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Ашитков С.И., Овчинников А.В., Шевелько А.П.*  
*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Экспериментальные исследования рентгеновского излучения, возникающего в случае образования лазерной плазмы при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов тераваттного уровня мощности излучения на твердотельные мишени и кластеры, являются важными для диагностики плазмы, изучения радиационных процессов, формирования фемтоимпульсов рентгеновского излучения. Создание источника рентгеновского излучения сверхкороткой длительности имеет важнейшие практические приложения.

Данные исследования основываются на двух базовых средствах измерений: тераваттном хром-форстерит фемтосекундной лазерной системе и современных спектральных рентгеновских приборах и детекторах.

В качестве спектрального рентгеновского прибора использовался фокусирующий кристаллический спектрометр Гамоша (спектральная область  $0,5 - 20 \text{ \AA}$ ), который обладает следующими важными преимуществами:

- Высокая детектирующая способность сигналов с низкой интенсивностью;
- Высокое пространственное разрешение, вплоть до  $10 \text{ мкм}$  в случае спектрометра Гамоша и камеры-обскуры;
- Высокая спектральная разрешающая способность: вплоть до нескольких  $1000$  для кристаллических спектрометров;
- Расширенный диапазон длин волн

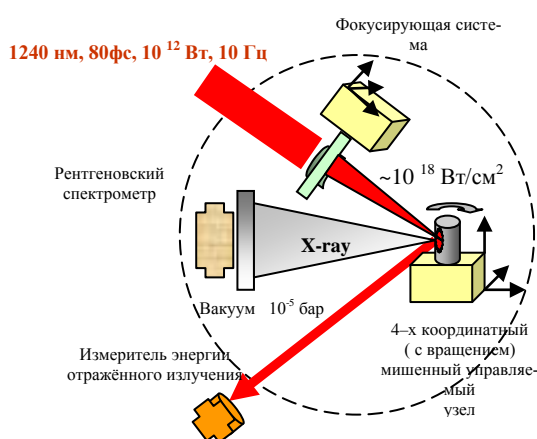


Рис.1. Экспериментальная схема измерений.

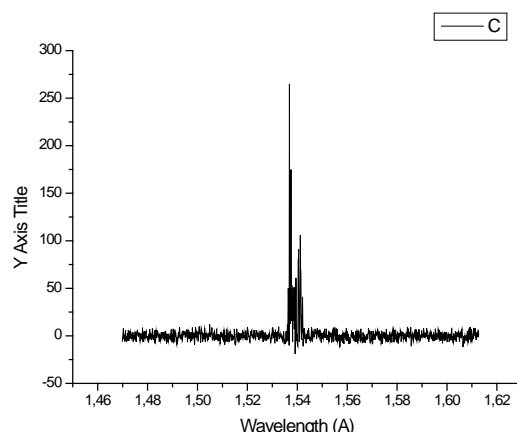


Рис.2. Спектр излучения спектральных линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$  (Cu – мишень)

На рис.2 приведены результаты измерений спектральных линий  $K_{\alpha 1}$  и  $K_{\alpha 2}$  рентгеновского излучения плазмы, образующейся при воздействии мощных фемтосекундных лазерных импульсов на поверхность мишени из Cu. Спектральное разрешение составляло величину  $\lambda/\delta\lambda=5000$ . Мощность излучения в линии  $K_{\alpha 1}$  составляла величину  $5 \cdot 10^8$  фотонов в  $4\pi$  стерадиан, что который соответствует конверсионной эффективности  $0.003 \%$ . Теоретическая модель процессов, ответственных за рентгеновское излучение сверхкороткой длительности, обсуждается в настоящее время.

## УСИЛЕНИЕ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ В АКТИВНОЙ СРЕДЕ НА ПАРАХ МЕДИ

Савинцев А.П.

Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

В работе рассматривались взаимодействия лазерного излучения с газоразрядной плазмой в случае усиления коротких лазерных импульсов в активной среде. Исследования проводились с активной средой на парах меди импульсного лазера ГЛ-202. В этой активной среде, с большим коэффициентом усиления, собственное свечение имеет характер сверхсветимости.

Так же как в [1], использовалась «самосопряженная схема», когда активный элемент (АЭ) является как источником, так и усилителем света. Изучалось поведение сверхсветимости, отраженной назад и дополнительно усиленной еще за один проход через АЭ, - однократно усиленной

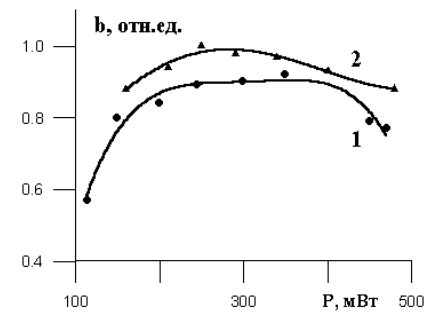


Рис. 3. Зависимость рабочего контраста от разогрева трубки при: 1 -  $U=7.0$  кВ, 2 -  $U=7.2$  кВ

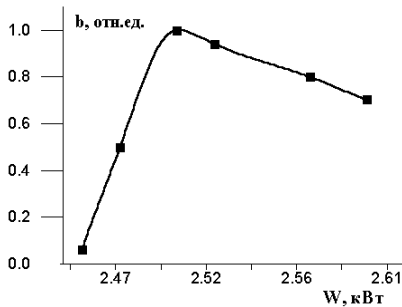


Рис. 1. Типичная зависимость рабочего контраста от мощности, снимаемой с выпрямителя, для  $U=7.2$  кВ

сверхсветимости (ОУС). ОУС накладывается на сверхсветимость, так, что наблюдается двухпучковая картинка. В качестве отражающего элемента был взят уголкового отражатель (УО). Отдельные участки УО посылают свет в обратном направлении так, что фронт отраженной электромагнитной волны сохраняет форму и ориентацию фронта падающей волны. С использованием УО размер пятна ОУС близок к размеру пятна сверхсветимости, но отраженный от УО свет формирует не равномерно освещенное пятно, а картинку, которая имеет вид сеточки, где чередуются темные и светлые области.

Изучался контраст картинки, который определяется отношением интенсивности сигнала, формирующего картинку, к интенсивности параллельного ОУС фонового пучка сверхсветимости [2].

Рассматривалось поведение рабочего (порогового) контраста ( $b$ ) для различных условий разогрева газоразрядной плазмы, за счет варьирования напряжения на АЭ ( $U$ ), мощности, снимаемой с выпрямителя ( $W$ ), и частоты следования лазерных импульсов ( $f$ ). Степень разогрева определялась мощностью фоновой сверхсветимости ( $P$ ). Параметр  $b$  определялся тем минимальным значением, когда картинка имеет еще приемлемое качество. Численные значения  $b$  меняются с разогревом АЭ: в экстремуме  $b$  порядка 1.8, а в неоптимальных условиях  $b \approx 0.6$ . В усредненном случае можно брать  $b \approx 1.2$ .

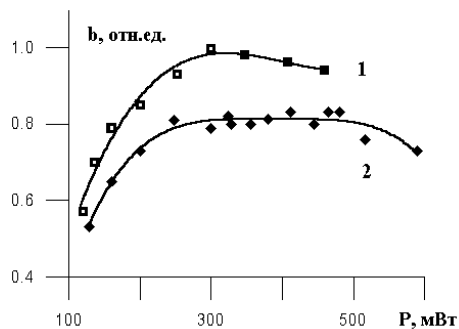


Рис.2. Ход рабочего контраста для различных скоростей разогрева трубки ( $V_1 > V_2$ ). 1-  $V_1$ :  $U=6.8$  кВ,  $W=2.5$  кВт=const,  $f=9.5-8.5$  кГц (□);  $W > 2.5$  кВт,  $f=8.5$  кГц (◆); 2-  $V_2$ :  $U \approx 6.8$  кВ,  $f=8.5$  кГц,  $W=2.2-2.8$  кВт (медленный разогрев)

Как показывает рис.1, наилучшие характеристики контраста достигаются, при некотором оптимальном режиме питания АЭ. Из рисунка 2 видно, что чем больше скорость разогрева АЭ ( $V$ ), тем выше значение контраста можно получить, но при этом тем быстрее, после достижения экстремума начинается спад  $b$ ; для малой скорости разогрева, на довольно большом интервале температур контраст почти не меняется. Согласно рис. 3, повышение напряжения питания поднимает пиковое значение контраста и сдвигает пик в область меньших температур АЭ; поэтому в определенных случаях наблюдается сближение значений  $b$  для различных  $U$ .

1. Савинцев А.П. // Тез. докл. 1-го научно-координационного совещания-симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах. Новый Афон. 2003. С.4.  
 2. Исаков В.К. и др. // ЖТФ. 1983. № 4. С. 704.



## НАНОЛОКАЛЬНАЯ ФЕМТОСЕКУНДНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И НАНОЛИТОГРАФИЯ

*Лозовик Ю.Е., Ключник А.В., Меркулов А.Л., Меркулова С.П.*  
*Институт спектроскопии РАН, Троицк*

Одним из важнейших вызовов, стоящих перед нанофизикой, является разработка оптических методов, сочетающих высокое пространственное, временное и спектральное разрешение и позволяющих изучать сверхбыстрые процессы в единичных наноструктурах, кластерах и молекулах, а также методов нанолитографии с высоким пространственным разрешением.

В этой связи мы обсудим несколько задач, связанных с воздействием лазерных импульсов на систему игла сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) -подложка и использование возникающих в связи с этим задачами возможностей в нанооптике и нанотехнологии.

Проанализировано усиление внешнего электромагнитного поля под иглой сканирующего туннельного микроскопа (или атомно-силового микроскопа), возникающее из-за геометрии острия (эффект громоотвода) и вследствие возбуждения собственных плазменных колебаний в системе игла-подложка. Рассмотрены различные механизмы возбуждения локальных плазменных резонансов внешним электромагнитным полем, экспоненциально убывающим полем НПВО, либо дипольным излучением близко расположенной наночастицы или молекулы.

Изучен спектр плазменных колебаний в двухсвязной системе - металлическая игла сканирующего зондового микроскопа, расположенная над плоской поверхностью. В области локального плазменного резонанса, управляемого расстоянием от иглы до подложки, усиление оказывается максимальным.

Рассматривается возможное использование усиления поля в нанометровой области вблизи острия зонда в нанооптике (для оптических исследований единичных наноструктур с высоким пространственным разрешением и т.п.) и в нанотехнологии (для обработки поверхности с нанометровым разрешением).

Нами реализована оптическая нанолитография, использующая усиленное в нанометровой области *ближнее поле* фемтосекундных лазерных импульсов вблизи иглы сканирующего туннельного микроскопа и получены элементы с размерами 20 нм, т.е. в сорок раз меньше длины (несущей) волны (800 нм).

Возможно использовать сочетание вышеуказанной безапертурной спектроскопии ближнего поля с методами фемтосекундной спектроскопии для достижения еще и высокого временного разрешения. Для этого надо, например, использовать обычный метод накачка - пробный сигнал, но возбуждающий и пробный фемтосекундные импульсы фокусировать вблизи иглы СЗМ над образцом.

1. Lozovik Yu.E., Klyuchnik A.V. // in "The Dielectric Function of Condensed Systems." Eds. L.V.Keldysh et. al. Elsevier. 1987.

2. Lozovik Yu.E., Merkulova S.P. The outlook for nanolocal femtosecond spectroscopy and nanolithography // Uspekhi Fiz.Nauk. 1999. V. 169. No. 3. P. 348-350.

## ФЕМТОСЕКУНДНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В МЕТАЛЛАХ И ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Лозовик Ю.Е.<sup>1</sup>, Меркулова С.П.<sup>1</sup>, Коваленко С.А.<sup>2</sup>, Фарзтдинов В.М.<sup>2</sup>, Ernsting N.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт спектроскопии РАН, Троицк

<sup>2</sup> Humboldt-Universität zu Berlin, Germany

С помощью фемтосекундной спектроскопии, методом квазимонохроматическая накачка – широкополосное зондирование обнаружена спектральная зависимость скоростей релаксации носителей заряда в пленках Au, Cu и пленках ВТСП YBaCuO с существенным замедлением этих скоростей в спектральной области, соответствующей межзонным переходам в область уровня Ферми. Это связано с уменьшением доступного в силу принципа Паули конечного фазового объема для релаксации.

Наличие этого замедления открывает возможность для развития нового метода определения как положения уровня Ферми и определения параметров электрон-электронного, электрон-фононного взаимодействия, так и определения возможных отклонений от Ферми-жидкостной картины в сильно-коррелированной электронной системе по исследованию спектральных зависимостей этих скоростей релаксации.

Обнаружена линейная (вместо квадратичной для обычных ферми-жидкостей) спектральная зависимость скорости релаксации электронов в пленке недодопированного YBaCuO вблизи энергии зондирующего сигнала 2.08 эВ может свидетельствовать о не-Ферми-жидкостном поведении электронной подсистемы.

Полученные результаты демонстрируют развиваемую нами спектроскопию времен релаксации, дающую дополнительную уникальную информацию по отношению к обычной спектроскопии без временного разрешения (см., например, [1-4]).

1. Добряков А.Л., Коваленко С.А., Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П. и др. // ЖЭТФ. 2001. Т. 119. №2. С. 309-320.
2. Lozovik Yu.E., Dobryakov A.L., Ernsting N.P., Kovalenko S.A. // Phys. Lett. A. 1996. V. 223. No. 4. P. 303-307.
3. Farztdinov V.M., Dobryakov A.L., Letokhov V.S., Kovalenko S.S., Lozovik Yu.E. et. al. // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. No. 7. P. 4176-4185.
4. Lozovik Yu.E., Dobryakov A.L., Kovalenko S.A., Merkulova S.P. et. al. // Laser Physics. 2002. V. 12. No. 4. P. 802-811.

## КИНЕТИЧЕСКАЯ СХЕМА ФОРМИРОВАНИЯ ФЛУОРЕСЦИРУЮЩЕГО СОСТОЯНИЯ ЦВЕТНОГО БЕЛКА ASCP595

*Савицкий А.П.<sup>1</sup>, Агранат М.Б.<sup>2</sup>, Feilitzsch T.<sup>3</sup>, Michel-Beyerle M.-E.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>*Институт биохимии им.А.Н.Баха РАН, Москва*

<sup>2</sup>*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

<sup>3</sup>*Technische Universität, München, Germany*

Цветные белки в настоящее время широко используются в качестве генов маркеров в биохимии и клеточной биологии. Белок asCP595 впервые был выделен из кораллов как пример не флуоресцирующего хромофорного белка, кодируемого одним геном. При интенсивном освещении на длине волны 514 нм белок начинает флуоресцировать, причем зависимость интенсивности флуоресценции от мощности облучения в области низких мощностей (менее 2 Вт/мм<sup>2</sup>) носит квадратичный характер, а при мощностях более 2 Вт/мм<sup>2</sup> приобретает обычный линейный характер. Проведена кинетическая обработка данных по зависимости интенсивности свечения от мощности лазерного облучения и предложен механизм формирования флуоресцирующего состояния с образованием двух промежуточных эксиплексов с субпикосекундными временами жизни в возбужденном состоянии.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДНК**

*Лахно В.Д.*

*Институт математических проблем биологии РАН, Пущино*

Изучение процессов переноса заряда в биомакромолекулах и, в частности - вдоль фрагментов ДНК, является одним из современных направлений в молекулярной биологии. В докладе обсуждаются модели, описывающие перенос катион - радикалов в ДНК и вычислительные проблемы, возникающие при моделировании такого переноса. Продемонстрирована принципиально важная роль динамики ДНК и диссипативных процессов, сопровождающих перенос. Приводятся оценки времени переноса в нелинейной квантово – классической диссипативной системе и их сравнение с экспериментальными данными по переносу дырок в коротких нуклеотидных последовательностях.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ О МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В БИОМОЛЕКУЛАХ

*Норман Г.Э.*

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Метод молекулярной динамики (МД) становится всё более важным средством исследования биомолекул. При этом основные усилия направлены на исследования структур и динамики в равновесных состояниях. Начальные состояния в МД расчётах, естественно, берутся неравновесными: координаты атомов выбираются из данных, полученных рентгеноструктурным анализом, который проводится, как известно, для искусственно созданных кристаллических структур. Система дополняется водной средой, ионами и проводится релаксация к искомому равновесию при требуемой температуре. Процедура оказывается достаточно длительной, применяются различные приёмы, чтобы её сократить, однако, как показали, например, доклады на последних конференциях по вычислительной физике (Пекин, май 2004) и по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул (Пушино, июнь 2004), полученному релаксационному участку не приписывается какого-либо физического смысла. Для исследования и получения данных о биомолекулах используется только последующая МД траектория (production run).

В настоящей работе обсуждается, как можно было бы применить МД к изучению релаксации в биомолекулах. Рассмотрены два примера.

Исследование фемтохимии цветных белков распадается на несколько этапов:

а) предварительный вывод белковой молекулы в ионно-водном окружении из начального, достаточно произвольного неравновесного состояния в область равновесных состояний; оптимизация выбора начального состояния и вывода на равновесие; исследование динамики атомов и полипептидных цепей при их движении в той области фазового пространства, которая соответствует равновесному распределению;

б) моделирование (по аналогии с условиями эксперимента) ансамбля неравновесных состояний, возникающих под действием поглощения квантов света белковыми молекулами из равновесного ансамбля;

в) молекулярно-динамическое моделирование релаксации из начальных неравновесных состояний к состояниям частичного равновесия, усреднение по ансамблю траекторий, принадлежащих к одному и тому же пути реакции;

г) исследование роли классических и квантовых точек бифуркации потенциального рельефа в процессе релаксации;

д) определение возможных метастабильных промежуточных состояний, их времён жизни;

е) определение кинетической схемы в режимах pump-probe, pump-pump-probe и т. д.

Принципиальные пути решения этапа а), как указано выше, известны, этапы же б)-е) представляют собой новые задачи.

Основной методической спецификой второго примера – динамики ферментативных реакций с участием молекулярных машин (моторов) является пункт б) моделирование (исходя из физико-химических соображений) ансамбля неравновесных состояний, возникающих под действием механического движения молекулярной машины, нарушающего равновесное распределение.

Дальнейшее молекулярно-динамическое моделирование релаксации из созданных неравновесных состояний, исследование роли классических и квантовых точек бифуркации и возможных метастабильных промежуточных состояний, определение кинетической схемы, как и пункт а), методически близки к первому примеру.

Этот подход, по-видимому, распространяется и на другие примеры. Специфическим в каждом случае окажется пункт б), который сам по себе лежит вне метода молекулярной динамики.

## **ИНИЦИИРОВАНИЕ СКОЛЬЗЯЩЕГО ЭЛЕКТРОДУГОВОГО РАЗРЯДА В ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ПОТОКЕ ВОЗДУХА ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ**

*Аксенов В.С., Голуб В.В., Губин С.А., Ефремов В.П., Маклашова И.В.  
Московский инженерно-физический институт  
Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Скользящий электродуговой разряд инициируется плазменным контактом, перемещающимся от одного электрода к другому вдоль полупроводящей поверхности, и завершается мощной электрической дугой, генерирующей в окружающем пространстве ударную волну (УВ). Скользящие электрические разряды находят применение в различных электрофизических устройствах. В тоже время скользящий электродуговой разряд может использоваться и для управления траекторией полета летательного аппарата. Образование мощной УВ на поверхности летательного аппарата при скользящем электрическом разряде изменяет характер обтекания поверхности потоком воздуха и создает усилие для управления траекторией полета летательного аппарата. Скользящий разряд конструктивно просто расположить на любой поверхности летательного аппарата, причем протяженность (длина межэлектродного промежутка) разряда может изменяться от нескольких миллиметров до метров. Полупроводящим материалом, на поверхности, которого генерируется скользящий разряд, может быть углерод, углеродсодержащая керамика и др. полупроводящие материалы. Принципиальным является вопрос о возможности устойчивого инициирования скользящего разряда в сверхзвуковом потоке воздуха, в условиях моделирующих условия полета летательного аппарата при пониженном начальном давлении со сверхзвуковой скоростью.

В работе моделировалось инициирование скользящего разряда на поверхности летательного аппарата путем возбуждения разряда в сверхзвуковом потоке газа за фронтом УВ в ударной трубе. Эксперименты проводились на диафрагменной ударной трубе с каналом квадратного сечения 72×72 мм и прозрачной секцией. В камере низкого давления ударной трубы находился воздух при начальном давлении 0.1-0.5 атм, а числа Маха УВ изменялись в диапазоне  $1.7 < M < 3.39$ . Возбуждение разряда осуществлялось при пробое искровых промежутков между электродами, и полупроводящей поверхностью стержня сечением 2×4 мм, над которыми устанавливались два медных электрода диаметром 2 мм с одинаковыми зазорами  $0,35 \text{ мм} \pm 0,05 \text{ мм}$  над поверхностью стержня на расстоянии 60 мм. Номинальная мощность накопителя скользящего разряда составляла 240 Дж. Визуализация взаимодействия разряда с УВ производилась теневым и интерференционными методами с помощью теневого прибора ИАБ-458, интерференционной приставки и высокоскоростной камеры СФР с использованием в качестве источника света модернизированного рубинового лазера ОГМ-20М. За одну вспышку лампы-накачки (энергия накачки ~800 Дж) лазер генерирует 10-15 световых импульсов длительностью 50-70 нс. Кинограммы показывают, что высокоскоростной поток воздуха не влияет существенно на время замыкания разрядного промежутка, сопровождаемое образованием мощной УВ и области нагретого до высокой температуры газа. В направлении навстречу потоку фронт УВ продвигается на меньшее расстояние, чем в поперечном направлении. Область нагретого воздуха сдувается потоком воздуха. Огибающая фронта этой УВ имеет характерную грушевидную форму. По мере расширения волны ее интенсивность ослабевает, и фронт сносится вниз по потоку.

Проведенные эксперименты свидетельствуют о том, что скользящий разряд устойчиво инициируется в условиях сверхзвукового потока, а образующаяся от замыкания дуги УВ обладает достаточной интенсивностью и пространственными размерами для нарушения и отрыва воздушного пограничного слоя на поверхности заданного размера. Срыв пограничного слоя приводит к возникновению силы, действующей в этом месте на поверхность. Эту силу можно использовать как управляющую, действием которой можно целенаправленно изменять усилие, воздействующее на поверхность, обтекаемую высокоскоростным потоком воздуха. Кроме того, положение области сжатого УВ газа, ограниченной фронтом УВ, распространяющейся вверх по потоку, стабилизируется в течение 50 – 100 мкс. Можно ожидать, что этот эффект усилит воздействие УВ от скользящего разряда на летательный аппарат. Поэтому скользящий электродуговой разряд можно применять для эффективного изменения параметров обтекания поверхности сверхзвуковым потоком воздуха и, тем самым, использовать для управления траекторией полета летательного аппарата летящего с высокой сверхзвуковой скоростью.

В настоящее время исследуется взаимодействие скользящего электродугового разряда, распространяющегося поперек направления движения потока в УВ.

## АЭРОДИНАМИКА РАЗВИТИЯ СКОЛЬЗЯЩЕГО ЭЛЕКТРОДУГОВОГО РАЗРЯДА

*Аксенов В.С., Голуб В.В., Губин С.А., Ефремов В.П., Маклашова И.В.*

*Московский инженерно-физический институт*

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Скользящие электрические разряды находят применение в различных электрофизических устройствах, например, как источники света для оптической накачки лазеров или как эффективные источники ультрафиолетового излучения. Исследования динамики пробоя показали, что скорость движения фронта разряда в определенных условиях превышает скорость звука в газе и сопровождается образованием ударных волн, как на начальном этапе развития электродугового разряда при движении плазменного контакта от одного электрода к другому, так и после замыкания электродов плазменным шнуром и образования дуги. На начальном этапе разряда при движении плазменного канала (лидера) возникает ударная волна в виде присоединенной волны к голове лидера. Предпробивной этап развития скользящего импульсного разряда завершается замыканием разрядного промежутка плазменным каналом. Затем на втором этапе развития электрического разряда, когда плазменный канал замыкает электроды и переходит в состоянии дуги, горящей в межэлектродном промежутке, в воздухе образуется гораздо более мощная протяженная УВ. Оценки показывают, что ударные волны, генерируемые в воздухе скользящим электрическим разрядом, обладают повышенной газодинамической эффективностью. Поэтому скользящий электродуговой разряд, по-видимому, можно эффективно использовать для возбуждения детонации в топливно-воздушной смеси или регулирования аэродинамики сверхзвукового течения в целях управления движением летательного аппарата.

В связи с этим представляется важным исследовать динамику образования ударные волны на всех этапах развития электродугового разряда: и при инициировании скользящего электрического разряда, перемещающегося в виде плазменного контакта вдоль полупроводящей поверхности стержня, и при замыкании электродов мощным дуговым разрядом.

Визуализация течения в разрядном промежутке осуществлялась посредством оптической системы, созданной на базе теневого прибора ИАБ-458 и сдвиговой интерференционной приставки РП-452. Полученные киноинтерферограммы позволили проанализировать формирование и развитие газодинамической картины течения в разрядниках различной конфигурации, определить ряд характерных параметров и проследить за развитием нестационарного разряда в поле зрения оптической системы, определить ряд его газодинамических параметров: скорость и форму лидера, УВ и т.д.

Динамика образования ударных волн в ходе развития скользящего разряда хорошо видна по интерференционным и теневым фотографиям. В момент подачи напряжения в зазоре между поверхностью стержня и электродом возникает электрический разряд и генерируется плазменный контакт в виде лидера, который начинает двигаться от этого места в направлении противоположного электрода.

Скорость лидера может быть ниже скорости звука, а может, в зависимости от напряжения, превышать скорость звука в воздухе. При сверхзвуковой скорости движения лидера на его фронте образуется присоединенная ударная волна. За головой лидера развивалась турбулентная область продуктов плазмы и нагретого воздуха конической формы. Присоединенная УВ, генерируемая движением лидера в воздухе, имеет примерно постоянную интенсивность, определяемую скоростью движения лидера. С ростом скорости движения лидера интенсивность ударной волны увеличивается.

Опытные данные показали, что с ростом напряженности электрического поля скорость движения лидера возрастает. В пределах погрешности эксперимента можно сделать вывод об однозначной зависимости скорости скользящего разряда от напряженности электрического поля для испытанных образцов. Таким образом, скользящий электрический разряд оказывается эффективным генератором УВ в воздухе, как на начальном этапе во время движения лидера по полупроводящей поверхности, так и на завершающем этапе электрического пробоя. Протяженность и форма ударных волн определяется расстоянием между электродами и формой плазменного канала лидера, то есть формой стержня. Интенсивность ударных волн в воздухе может регулироваться энергией разряда накопителя и напряженностью электрического поля, а также может изменяться в зависимости от подбора материала полупроводящей поверхности стержня и выбора длины межэлектродного промежутка.

Работа поддержана Совместной программой Минобрания России и фонда CRDF "Фундаментальные исследования и высшее образование" в НОЦ-011 "Фундаментальные исследования материи в экстремальных состояниях".

## ЭФФЕКТИВНАЯ ЧАСТОТА СТОЛКНОВЕНИЙ ЧАСТИЦ И ЛЕНГМЮРОВСКИЕ ВОЛНЫ В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

**Морозов И.В.**

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

На основе молекулярно-динамического моделирования двухкомпонентной неидеальной плазмы с парным квазиклассическим потенциалом взаимодействия Кельбга для параметра неидеальности  $\Gamma = (4\pi n_e/3)^{1/3} e^2/(kT) = 0,1 - 4$  изучаются столкновительные процессы и их влияние на ленгмюровские волны.

Рассчитаны автокорреляционные функции скоростей электронов и ионов, автокоррелятор тока. Из последнего по теории линейного отклика определена проводимость, диэлектрическая проницаемость неидеальной плазмы, а также эффективная частота столкновений  $\nu$ , зависящая от частоты возмущения. Построена зависимость  $\nu$  от отношения масс ионов и электронов  $M/m$ . Показано, что при  $M/m > 100$ , величина  $\nu$  перестает зависеть от массы ионов и, следовательно, является одинаковой для плазмы любого вещества.

Показано, что зависимость эффективной частоты столкновений от частоты возмущения  $\nu(\omega)$  проходит через максимум, который по мере увеличения неидеальности становится все более выраженным и сдвигается в область низких частот. Приводится простое качественное объяснение этого эффекта. Статическая частота столкновений  $\nu(\omega = 0)$  хорошо согласуется с расчетами [1] для  $\Gamma < 2$ . Зависимость динамической частоты столкновений от частоты возмущающего поля  $\nu(\omega)$  подтверждается расчетами [2] для  $\Gamma = 1,28$  в области малых частот ( $\omega < \omega_p$ ) и на асимптотике ( $\omega \gg \omega_p$ ), где  $\omega_p$  — ленгмюровская плазменная частота. При  $\Gamma > 3$  результаты молекулярной динамики не противоречат оценкам [3].

В работе проведен расчет дисперсии и декремента затухания ленгмюровских волн. Для этого были определены динамические структурные факторы (ДСФ) плазмы в зависимости от частоты и волнового числа и выполнен ДСФ вблизи  $\omega_p$ . Метод расчета и предварительные результаты приведены в [4]. Установлено, что затухание Ландау  $\delta_L$  остается практически неизменным при переходе к неидеальной плазме и может описываться стандартными выражениями для идеальной плазмы [5]. Столкновительное затухание  $\delta_c$ , для которого экстраполяционная оценка теории Ландау неприменима, может быть получено из эффективной частоты столкновений  $\delta_c = \nu(\omega_p)/2$ , описанной ранее. В этом случае суммарный декремент затухания  $\delta = \delta_c + \delta_L$  хорошо согласуется с полушириной максимума ДСФ.

Положение максимума ДСФ по частоте может существенно отклоняться в область малых частот относительно частоты ленгмюровских волн вследствие смещения решения дисперсионного уравнения  $\varepsilon(\omega + i\delta, k) = 0$  в мнимую область при больших  $\delta$ . С учетом этого эффекта дисперсия ленгмюровских волн соответствует выражениям для идеальной плазмы [4] при  $\Gamma < 3$ . Таким образом, было показано, что теория идеальной плазмы [4] может применяться для описания декремента затухания и дисперсии для неидеальной плазмы с  $\Gamma < 3$  посредством модификации всего одного параметра — эффективной частоты столкновений  $\nu$  на частоте  $\omega = \omega_p$ , который может быть получен из расчета автокоррелятора тока или из результатов расчета [2].

Полученная эффективная частота столкновений, определяющая релаксацию импульса в равновесной плазме, сопоставляется со скоростью релаксации энергии в неизотермической плазме [5].

1. Schlages M., Bornath Th., Kremp D., Hilse P. // Contrib. Plasma Phys. 2003. V. 43. № 5-6. P. 360.
2. Selchow A., Roeske G., Wierling A., Reinholz H., Pschiwul T., Zwicknagel G. // Phys. Rev. E. 2001. V. 64. P. 056410.
3. Валуев А.А., Каклюгин А.С., Норман Г.Э. // ЖЭТФ. 1998. Т. 113. №3. С. 880.
4. Валуев А.А., Морозов И.В., Норман Г.Э. // ДАН. 1998. Т. 362. Вып. 6. С. 752.
5. Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А., Колебания и волны в плазменных средах. Москва: Изд. МГУ. 1990.
6. Morozov I.V., Norman G.E. // J. Phys. A. 2003. V. 36. P. 6005.



## УДЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ ФУЛЛЕРЕНА $C_{60}$ В УСЛОВИЯХ ДИНАМИЧЕСКОГО СЖАТИЯ

*Постнов В.И., Казан К.Л., Шахрай Д.В., Авдонин В.В.  
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Фуллерен  $C_{60}$  в кристаллическом состоянии является полупроводником с шириной запрещенной зоны  $E_g$  порядка 2.1 эВ и довольно узкими (порядка 0.5 эВ) ширинами валентной зоны и зоны проводимости. Молекулы  $C_{60}$  связаны, в основном, Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием и сжимаемость кристаллов  $C_{60}$  при гидростатическом давлении очень велика. При давлении 50 кбар изменение объема кристалла  $\Delta V/V_0$  составляет 20%, а при 200 кбар превышает 30% [1]. Ширина запрещенной зоны при этом должна соответственно падать и при некотором давлении кристалл может перейти в металлическое состояние. Анализ многочисленных данных по изменению спектров оптического поглощения кристаллов  $C_{60}$  при приложении гидростатического давления [2] показывает, что ширина запрещенной зоны действительно быстро падает с увеличением давления. При этом оценки давления перехода в металлическое состояние характеризуются значительным разбросом (200-700 кбар). Существуют несколько объективных причин для большого разброса данных. Во-первых, при больших давлениях возможна полимеризация молекул  $C_{60}$  (образование ковалентных связей между молекулами) [3]. Во-вторых, в большинстве гидростатических экспериментов используется среда, передающая давление. В силу большого диаметра молекул  $C_{60}$  полости между ними могут легко заполняться молекулами среды передающей давление, что естественно может сильно влиять на электронную зонную структуру образцов. Указанных выше двух трудностей можно избежать в экспериментах с ударно-волновым воздействием.

Для изготовления монокристаллических образцов  $C_{60}$  с плотностью 1,67 г/см<sup>3</sup> использовали метод, разработанный в Институте физики твердого тела РАН. Образец и манганиновый датчик давления находились в одной плоскости. Толщина кварцевых пластин составляла 5 мм. Сборка нагружалась алюминиевым ударником, разогнанным с помощью взрывного устройства до скорости 2 км/с, через медный экран. Тыльный медный экран был необходим для генерации отраженной ударной волны и повышения давления до 200 кбар. Эксперименты проводили как при начальной комнатной температуре, так и при охлаждении измерительной ячейки до температуры жидкого азота. Электросопротивление измеряли аналогично [4] на фоне шунтирующего образец сопротивлений  $R_{sh}=10$  Ом-10 кОм. В первой волне сжатия до давления 100 кбар электропроводность образца  $1/R$  увеличивается от начальной величины порядка  $10^{-7}$  Ом<sup>-1</sup> до величины порядка  $10^{-2}$  Ом<sup>-1</sup>. С приходом отраженной волны с максимальной амплитудой 200 кбар проводимость образца резко, за время порядка 100 нс, увеличивается до 0.35 Ом<sup>-1</sup>. При снятии нагрузки электропроводность падает к исходному значению. Характер зависимости от давления электропроводности, охлажденного до 80К образца  $C_{60}$ , качественно является таким же, с той разницей, что величина  $1/R$  во второй волне сжатия существенно меньше, порядка  $2 \cdot 10^{-3}$  Ом<sup>-1</sup>.

Оказалось, что при стартовой температуре 300К,  $\sigma$  образцов  $C_{60}$  при сжатии до 200 кбар достигает 5 Ом<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup>, а удельная проводимость  $\sigma$  образца, охлажденного перед нагружением до 80К, в аналогичных условиях динамического сжатия почти на два порядка меньше и составляет величину 0.07 Ом<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup>. Как видно, в первом случае  $\sigma$  возрастает с давлением на 7-8 порядков относительно исходной проводимости равной  $10^{-6} - 10^{-7}$  Ом<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup>. Следует обратить внимание на обратимое изменение электропроводности образцов, что свидетельствует о сохранении физических свойств образцов после снятия динамической нагрузки. Это предположение было нами проверено в экспериментах, когда образцы  $C_{60}$ , размещенные в плоских металлических ампулах сохранения, подвергались ударно-волновому воздействию. Действительно, рентгенофазные исследования показали, что сохраненные образцы представляют собой однофазный  $C_{60}$  с несколько уменьшенным параметром решетки:  $a=14,145 \pm 0,004$  Å.

Полученные результаты позволяют говорить о резком уменьшении запрещенной зоны кристаллов  $C_{60}$  при приложении давления. Однако, наблюдающаяся зависимость электропроводности под нагрузкой от температуры свидетельствует о том, что ширина запрещенной зоны уменьшается не до нуля и образец при 200кбар остается полупроводниковым. Это качественно согласуется с данными по воздействию статического давления на кристаллический  $C_{60}$ , приведенными в обзоре [1]. Однако, количественно значение  $\sigma$ , зафиксированное нами в условиях динамического сжатия, на два порядка превышает электропроводность, полученную при 300К под действием статического давления 200

кбар. Количественное различие наших и статических экспериментов, возможно, является следствием некоторого динамического разогрева образцов в наших экспериментах, также, вполне вероятно, что частично это обусловлено процессами полимеризации молекул  $C_{60}$  и диффузии примесей в образец, происходящими при статических экспериментах.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, грант № 03-02-16322.

1. Sundqvist B. // *Advances in Physics*. 1999. V. 48. P. 1.
2. Meletov K.P., Dolganov V.K., Zharikov O.V., Kremenskaya I.N., Ossipyan Yu.A. // *J. Phys. Paris*. 1992. V. 2. P. 2097.
3. Bashkin I.O., Rashchupkin V.I., Gurov A.F. et al. // *J. Phys. Condens. Matter*. 1994. V. 6. P. 7491.
4. Фортов В.Е., Котосонов А.С., Постнов В.И., Уткин А.В., Якушев В.В. // *ДАН*. 1997. Т. 357. С. 761.

## **ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ КАЛИЯ И КАЛЬЦИЯ В УСЛОВИЯХ ДИНАМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА**

*Постнов В.И., Казан К.Л., Шахрай Д.В., Авдонин В.В.  
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Измерена удельная электропроводность  $\rho$  металлических образцов калия и кальция в условиях ударного сжатия до давления  $P=850$  кбар. Образцы металлов в виде фольги, а также манганиновые датчики регистрации профиля давления располагались между слоями изолятора, в качестве которого служили пластины тефлона. В опытах использовали квазиизэнтропический (ступенчатый) режим динамического нагружения с целью минимизации ударно-волнового разогрева. При расчете удельного сопротивления  $\rho$  учитывалось влияние проводимости окружающей образец среды (тефлон).

Ранее в диапазоне давлений до 580 кбар при разных начальных температурах в районе 400 кбар авторами работы [1] обнаружен излом на кривой зависимости электросопротивления кальция от давления, связанный, по их мнению, с переходом кальция в полупроводниковое состояние. С целью исследования этого явления нами была измерена его электропроводность в условиях ударно-волнового сжатия.

В результате наших экспериментов обнаружено, что электросопротивление образцов кальция увеличивается почти на порядок при давлении 550 кбар [2]. Однако, пока невозможно однозначно утверждать, что нами реализован переход кальция в полупроводниковое состояние, поскольку ударно-волновое нагружение приводит к значительному разогреву образца и ударная адиабата, по видимому, в этом случае лежит выше предсказанной полупроводниковой области.

Характер зависимости  $R$  от  $P$  для калия при сжатии до давления 600 Кбар является таким же как для кальция, но рост его величины оказался на порядок больше. Величина отношения электросопротивления калия в ударно-сжатом состоянии к исходному электросопротивлению сопоставима с аналогичной величиной для лития [3].

Характерной особенностью поведения электросопротивления калия и кальция является его возврат к исходному значению при снятии нагрузки, что говорит как об обратимости происходящих в образце изменений так и о сохранении физических свойств самих образцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №03-02-16322 и Комплексной программы РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий», 2004 г.

1. Stager R.A., Drickamer H.G. // *Physical Review*. V.131. N.6. P.2524
2. Fortov V.E., Molodets A.M., Postnov V.I., Shakhrai D.V., Kagan K.L., Maksimov E.G., Ivanov A.V., and Magnitskaya M.V. // *JETP Letters*. 2004. V. 79. No. 7. P. 346-351.
3. Fortov V.E., Yakushev V.V., Kagan K.L., Lomonosov I.V., Postnov V.I., and Yakusheva T.I. // *JETP Letters*. 1999. V. 70. P. 628.

## ПЛАВЛЕНИЕ ГРАФИТА ПРИ НАГРЕВЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ТОКОМ

**Коробенко В.Н., Савватимский А.И.**

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Проведены прямые измерения температуры плавления графита для давлений 1 кбар и выше ( $T_{пл} = 4800 \pm 200$  К). Использовалось излучение как от поверхности графита, так и от графитовой модели черного тела. Этому значению температуры соответствует одновременно измеренная энтальпия начала плавления (10.5 кДж/г). Она совпадает с данными других авторов для более медленного импульсного нагрева электрическим током. Аргументированная критика в адрес немногих работ, в которых получена температура плавления графита  $T_{пл} = 3700$  К, изложена в [1]. Получены и другие экспериментальные данные по свойствам графита в области плавления при нагреве импульсом электрического тока:

- энтальпия завершения плавления (20.5 кДж/г);
- теплота плавления (10 кДж/г);
- удельное электросопротивление жидкого углерода 730 мкОм·см (для плотности 1.8 г/см<sup>3</sup>; для давлений несколько десятков кбар и для температур 5000 - 7000 К [2-5]);
- эксперимент [6] и оценка [5] теплового расширения графита при фазовом переходе твердое тело - жидкость (с использованием уравнения Клапейрона-Клаузиуса) дает около 70% для давлений  $P \leq 1$  кбар.

Для получения высокотемпературных данных для графита (вблизи плавления) при нагреве электрическим током необходимо использовать образцы анизотропного графита совершенной структуры (УПВ-1Т или НОРГ), это позволяет образцам свободно расширяться по двум осям. При этом необходим предварительный глубокий отжиг образцов, для того чтобы с самого начала нагрева током графит имел бы только растущее электросопротивление (что обеспечивает однородное тепловыделение).

1. Савватимский А.И. Плавление графита и жидкий углерод // УФН. 2003. Т. 173. №12. С.1371-1379.
2. Коробенко В.Н., Савватимский А.И. Удельное электросопротивление жидкого углерода // ТВТ. 1998. Т. 36. № 5. С. 725.
3. Korobenko V.N., Savvatimski A.I. and Cheret R. Graphite melting and properties of liquid carbon // Int. J. Thermophys. 1999. V. 20. № 4. P. 1247-1256.
4. Коробенко В.Н. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук "Экспериментальное исследование свойств жидких металлов и углерода при высоких температурах". М.: ОИВТ РАН. 2001.
5. Korobenko V.N. and Savvatimskiy A.I. Blackbody Design for High Temperature (1800 to 5500 K) of Metals and Carbon in Liquid States under Fast Heating // In: Temperature: Its Measurement and Control in Science and Industry, V. 7, edited by D. C. Ripple (American Institute of Physics Conference Proceedings, Melville, New York). 2003. P. 783-788.
6. Лебедев С.В., Савватимский А.И. Электросопротивление графита в широкой области конденсированного состояния // ТВТ. 1986. Т.24. № 5. С.892-899.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОМОГЕННЫХ И ГЕТЕРОГЕННЫХ ПРОЦЕССОВ ПЛАВЛЕНИЯ И РАСПАДА ПЕРЕГРЕТЫХ КРИСТАЛЛОВ

Стегайлов В.В.

Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва  
Московский физико-технический институт

Метастабильное состояние отличается от термодинамически стабильного конечным временем жизни, за которое происходит образование зародышей новой фазы (расплава, полостей). Дефекты и неоднородности кристаллической структуры приводят к безбарьерному плавлению и препятствуют получению перегретых твердофазных состояний в эксперименте. Однако при импульсных процессах с большой интенсивностью энерговыклада (при лазерном нагреве поверхности, электровзрывах проводников, в ударно-волновых экспериментах) на одной из стадий эволюции вещества может реализовываться сильно метастабильная сильно перегретая кристаллическая фаза. При этом определение времени жизни метастабильной фазы и границы абсолютной неустойчивости существенно для анализа экспериментальных данных. В данной работе представлены результаты изучения ряда свойств кристаллической фазы в перегретом состоянии методом молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики состоит в численном интегрировании классических уравнений движения многоатомной системы при заданном потенциале межчастичного взаимодействия. Получаемая в результате детальная информация о динамике частиц позволяет рассчитывать и анализировать термодинамические, кинетические и структурные свойства рассматриваемой системы. В данной работе приводятся результаты расчетов с модельными парными потенциалами мягкого отталкивания и Леннарда-Джонса, а также с многочастичным потенциалом погруженного атома для меди. Число атомов, используемое в расчетах  $10^3$ - $10^5$ . Для исключения влияния размерных эффектов на расчетную ячейку накладываются периодические граничные условия.

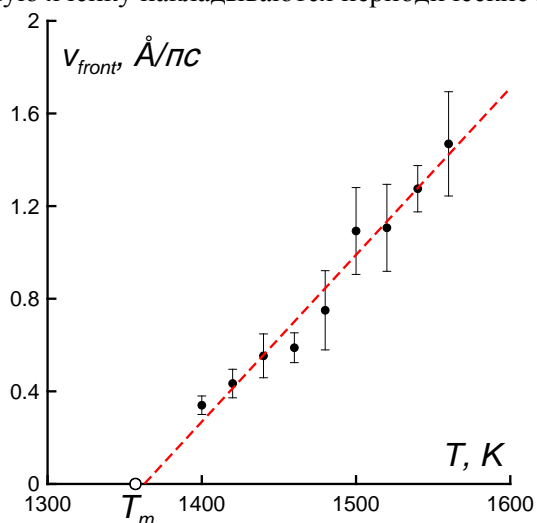


Рис. Температурная зависимость скорости фронта плавления с открытой поверхностью для перегретого кристалла меди. Линейная аппроксимация:  $v_{\text{front}} = 7.21 \times 10^{-3} T - 9.821$ . Экстраполяция дает  $v_{\text{front}}(T=0) = 1366 \pm 10$  К в хорошем согласии с экспериментальным значением температуры плавления меди 1356.6 К.

В данной работе исследуется самопроизвольный распад г.ц.к. кристалла перегретого до температуры выше температуры плавления. Предложен метод расчета времени жизни перегретого кристалла, основанный на статистическом усреднении по ансамблю траекторий [1,2]. Проанализировано изменение структуры в процессе гомогенной нуклеации расплава. Получена температурная зависимость частоты гомогенной нуклеации.

Проведено моделирование процесса гетерогенного плавления с открытой поверхностью. Проанализирована структура фронта плавления и получена зависимость скорости распространения фронта от величины перегрева.

1. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // ДАН. 2002. Т. 376. С. 328.
2. Norman G.E., Stegailov V.V. // Molecular Simulation. 2004. V. 30. No. 6. P. 397-406.

## ВЫСОКОСКОРОСТНАЯ ДЕФОРМАЦИЯ: ЗАДАЧИ, РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ И РАСЧЕТОВ

*Канель Г.И.*

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Известно, что основой физических механизмов пластической деформации кристаллических тел является движение дислокаций. Движению дислокаций препятствуют различного рода структурные неоднородности: точечные дефекты, другие дислокации и их скопления, границы зерен, межфазные границы, частицы примесей. На участке между препятствиями движение дислокаций тормозится силами фононного и электронного трения, вклад которых в общее сопротивление пластическому деформированию обычно невелик. Для преодоления препятствий необходимы значительно более высокие напряжения, чем для перемещения дислокации от одного препятствия до другого. При скоростях деформирования меньше  $\sim 10^3 - 10^4 \text{ с}^{-1}$  дислокации преодолевают препятствия в результате совместного действия приложенного напряжения и тепловых флуктуаций, что определяет характер температурных зависимостей пределов текучести кристаллических материалов. Напряжение течения кристаллических твердых тел возрастает с увеличением скорости нагружения. При достаточно большой скорости деформирования действующие напряжения оказываются настолько высокими, что дислокации оказываются способными преодолевать некоторые препятствия без дополнительного вклада тепловых флуктуаций. Иными словами, структурные неоднородности (микродефекты, границы зерен, включения, и т.д.), определяющие сопротивление деформированию, эффективны в ограниченных диапазонах напряжений. Следовательно, их относительные вклады в сопротивление деформированию и зарождение носителей пластической деформации, в принципе, могут быть выявлены экспериментально путем варьирования структуры материала и скорости деформирования.

Результаты экспериментов с ударными волнами недвусмысленно демонстрируют влияние структурных факторов на сопротивление высокоскоростному деформированию и разрушению. Несовершенства структуры, которые являются упрочняющим фактором, ослабляют зависимость предела текучести от скорости деформирования. Различие скоростных зависимостей может быть настолько большим, что изменяется знак влияния структурных факторов с переходом от квазистатического к высокоскоростному нагружению.

Дополнительные возможности для исследования вкладов различных структурных уровней в процессы деформирования и разрушения появляются при варьировании температуры испытаний. Проведенные эксперименты показали, что в условиях высокоскоростного деформирования температурные зависимости напряжения пластического течения могут отличаться даже по знаку от тех, что имеют место при низких и умеренных скоростях деформирования. В то время как для высокопрочных сплавов влияние температуры на предел текучести одинаково как при низких, так и при высоких скоростях деформирования, для чистых металлов с низким пределом текучести наблюдалось его аномальное возрастание с нагревом в условиях ударно-волнового нагружения. В целом это согласуется с предположением о смене основного механизма торможения дислокаций при высоких скоростях деформирования.

В докладе обсуждаются феноменологические соотношения и результаты атомистического моделирования высокоскоростного деформирования кристаллических материалов. Хотя представления о движении дислокаций позволяют понять природу пластической деформации, ее определяющие факторы и основные закономерности, современное состояние теории дислокаций не позволяет делать количественные прогнозы и с разумной точностью описывать сопротивление деформированию на всех этапах воздействия. Представляется полезным формализовать результаты наблюдений путем введения представления о спектре дефектов материала, характеризующихся различными уровнями напряжения, необходимыми для их преодоления. При этом в зависимости от величины действующего напряжения часть спектра дефектов вовлекается в процесс пластической деформации, а оставшаяся часть препятствует деформированию. В процессе пластической деформации параметры спектра дефектов изменяются. Можно надеяться, что такой подход обеспечит более детальное описание свойств материалов и повысит информативность исследований при высоких скоростях деформирования.

## **ВЛИЯНИЕ МОДЕЛЕЙ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ НА РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО УДАРА**

*Матвеев А. В., Андержанов К.И., Берзигияров П.К., Григорьев Д.А., Жарков А.П., Ким В. В., Ломоносов И.В., Острик А.В., Султанов В.Г., Шутков А.В.  
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Задачи высокоскоростного пробивания характеризуются большими градиентами полей течения. В современных эффективных численных методах качество и надёжность получаемых результатов в существенной степени зависят от применяемых физических моделей среды.

Метод частиц в ячейках и его модификации [1] эффективен при моделировании процессов с большими градиентами параметров течения и высокими скоростями деформирования. В работе приводится описание модификации данного метода для режима массивных параллельных вычислений в трёхмерном случае с внедрёнными моделями упругопластического поведения и разрушения материалов [3]. Проведено одномерное моделирование экспериментов по измерению скорости свободной поверхности [2] при соударении пластин для подбора коэффициентов модели разрушения. Приводятся результаты моделирования экспериментов по высокоскоростному пробиванию [4] с использованием внедрённых моделей. Проводится сравнение полученных результатов.

Работа проводилась при поддержке грантов программа фундаментальных исследований РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий», программа №17 фундаментальных исследований РАН «Параллельные вычисления и многопроцессорные вычислительные системы», грант РФФИ 03-07-90197.

1. Виленкин С. Я., Крюков Б. П., Разработка и реализация метода численного моделирования нестационарных течений многокомпонентных сжимаемых сред на мультипроцессоре ПС-2000 // Препринт Института Проблем Управления. М. 1989.
2. Канель Г. И., Разоренов С. В., Уткин А. В., Баумунг К., Экспериментальные профили ударных волн // Препринт №1-394 ИВТАН
3. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., В.Е.Фортов, Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М. Янус-К. 1996
4. Mullin S.A., Littlefield D.L., Chhabildas L.C., Piekutowski A.J., Computational simulations of experimental data obtained at 7 to 11 km/s with aluminum and zinc // Proceedings of Shock waves conference. 1994.

## ПРЕДЕЛ УСТОЙЧИВОСТИ ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКОГО КРИСТАЛЛА

Куксин А.Ю.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт

<sup>2</sup> Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва

Процессы разрушения твердых тел достаточно широко исследуются в связи с появлением и совершенствованием экспериментальных методик в субмикросекундном диапазоне длительностей нагрузки [1]. Масштабы скоростей деформации и объемов кристаллов, реализуемые в экспериментах, сейчас не достижимы в моделировании методами молекулярной динамики или Монте-Карло, исследуется начальная стадия разрушения материала - зарождение и рост полостей внутри него. В работе [2] на примере меди сравнивается поведение при деформировании моно- и поликристаллов. Структура образующихся при растяжении полостей анализируется методами статистической геометрии в [3]. В данной работе сделана попытка построить границу устойчивости леннард-джонсовского кристалла при положительных и отрицательных давлениях.

Был проведен молекулярно-динамический расчет распада метастабильного леннард-джонсовского кристалла с числом частиц в расчетной ячейке до 32000. Предел устойчивости кристалла оценивался на основе двух критериев: термодинамического и кинетического. Первый представляет собой просто термодинамическое неравенство, выполняющееся всюду в области устойчивости вещества:  $(\partial P/\partial V)_T$ . Второй заключается в том, что вещество на границе устойчивости разрушается настолько быстро, как это возможно (см., например, [4]).

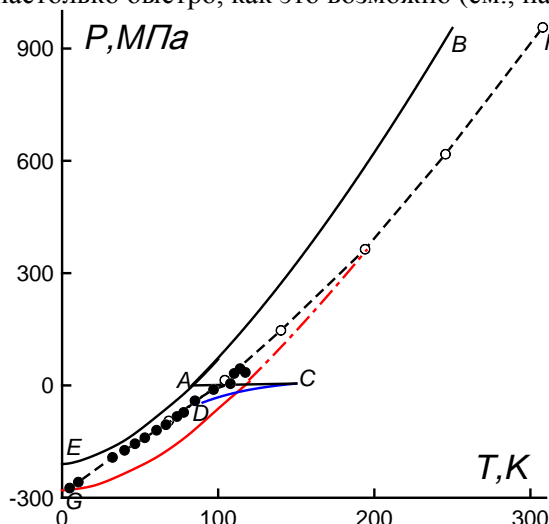


Рис. Граница устойчивости твердого аргона: ВА - линия плавления аргона, АЕ - продолжение линии плавления в область отрицательных давлений по уравнению Симона [5], CD - спинопаль жидкости [5], GF – спинопаль кристалла [5]. Символами показаны результаты МД расчетов границы устойчивости кристаллического аргона (в рамках модели потенциала Леннард-Джонса): 1 – по кинетическому критерию устойчивости, 2 – по термодинамическому критерию.

Для сравнения с данными по спинопали кристаллического аргона из работы [5] результаты моделирования приводятся на РТ диаграмме (см. рис.). Из сопоставления представленных данных можно сделать вывод, что граница устойчивости кристаллического аргона в области отрицательных давлений проходит по спинопали жидкой фазы (экстраполяция кривой CD плавно переходит на штрихованную линию, соединяющую результаты расчета, причем выпуклость вверх практически не изменяется). При положительных давлениях, начиная с ~300 МПа, граница устойчивости кристаллического аргона лежит на продолжении спинопали GF (штрих-пунктирная линия построена для наглядности). Представляет интерес дальнейшее исследование границы устойчивости твердой фазы при отрицательных давлениях и сравнение результатов со сценарием спинопального распада зоны метастабильного плавления [6].

1. Kanel G., Razorenov S., Baumung K., and Singer J. // J. Appl. Phys. 2001. V. 90. P. 136.
2. Voloshin V. and Naberukhin Yu. // J. Mol. Liq. 1999. V. 82. P. 19.
3. Belak J. // J. of Computer-Aided Materials Design. 1998. V. 5. P. 193.
4. Rethfeld B., Sokolowski-Tinten K., von der Linde D., Anisimov S.I. // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 2103.
5. Скрипов В.П., Файзуллин М.З., Фазовые переходы кристалл-жидкость-пар и термодинамическое подобие. М.: Физматлит. 2003.
6. Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю. // Электронный журнал "Исследовано в России". 2003. URL: <http://zhurnal.apelarn.ru/articles/2003/003.pdf>. С. 21-34.

## ЗОНА РЕАКЦИИ В СТАЦИОНАРНЫХ ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛНАХ В ПРЕССОВАННЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ ВВ

*Колесников С.А., Уткин А.В., Ананьин А.В.*

*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Экспериментальные исследования показывают, что характер изменения параметров в зоне реакции стационарной детонационной волны существенно зависит от структуры заряда. В некоторых взрывчатых веществах (ВВ), например, увеличение начальной плотности может привести к исчезновению химпика. С целью исследования этого явления в данной работе методом лазерной доплеровской интерферометрии проведены эксперименты по регистрации стационарных детонационных волн в прессованных гексогене и TNETB при различной начальной плотности  $\rho_0$  зарядов ВВ.

Ранее в гексогене с исходным размером частиц  $\sim 80$  мкм, а также в TNETB, было обнаружено существование критической начальной плотности ( $\sim 1.73$  г/см<sup>3</sup> для гексогена и  $\sim 1.56$  г/см<sup>3</sup> для TNETB), выше которой вместо классического детонационного режима с химпиком наблюдается монотонный рост параметров в зоне реакции. В данной работе, однако, показано, что в действительности следует говорить о наличии не единственной критической плотности, а некоторого интервала плотностей, где наблюдается детонационная волна без химпика. Так, в мелкодисперсном (со средним размером частиц  $\sim 5$  мкм) гексогене отсутствие химпика наблюдается в интервале  $\sim 1.30$ - $1.35$  г/см<sup>3</sup>, т.е. при плотностях более низких, чем в случае грубодисперсного (со средним размером частиц  $\sim 80$  мкм) гексогена. Вне этого интервала регистрируется классический детонационный режим.

Для TNETB обнаружено существование верхней критической плотности, равной  $1.74$  г/см<sup>3</sup>, выше которой в зоне реакции формируется химпик, а ниже он отсутствует. Учет уже имеющихся для этого вещества данных о нижней критической плотности позволяет говорить о существовании интервала начальных плотностей  $1.56 - 1.74$  г/см<sup>3</sup>, в котором происходит исчезновение химпика. Одновременно с регистрацией профилей массовой скорости проводилось также измерение зависимости скорости детонации от начальной плотности в интервале  $1.50 - 1.76$  г/см<sup>3</sup>. В окрестности верхней критической плотности на этой зависимости обнаружены особенности, что может свидетельствовать об изменении не только кинетики, но и термодинамики детонационного процесса.

Полученные экспериментальные результаты объясняются возможностью разложения ВВ непосредственно во фронте ударной волны, а также влиянием начальной плотности заряда, условий его приготовления и дисперсности исходного порошка ВВ на количество активных очагов реакции, и, таким образом, на скорость этого разложения.



## СВОЙСТВА СИСТЕМЫ CuO-B ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Уткин А.В.<sup>1</sup>, Торунов С.И.<sup>1</sup>, Ефремов В.П.<sup>2</sup>, Алымов М.И.<sup>3</sup>, Фортков В.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва

<sup>3</sup>Институт металлургии им. А.А. Байкова РАН, Москва

Исследованы ударно-волновые свойства смеси окиси меди и бора в молярном отношении 3:2 в интервале давлений 5-20 ГПа при различной дисперсности компонентов. Интерес к этой системе обусловлен значительным увеличением объема продуктов реакции  $3\text{CuO}+2\text{B}=3\text{Cu}+\text{B}_2\text{O}_3$  (до 28% без учёта тепловых эффектов), что позволяет предположить возможность реализации в ней детонационного режима без образования газообразных продуктов. В экспериментах использовались грубодисперсные (средний размер частиц  $\sim 1$  мкм) и мелкодисперсные (средний размер частиц  $\sim 50$  нм) составы. Плотность образцов, получаемых при прессовании, составляла 45-50 % от максимальной. Регистрация профилей давления в исследуемых образцах осуществлялась манганиновыми датчиками. На измеренных профилях давления в грубодисперсных образцах не зарегистрированы особенности, которые можно было бы связать с энерговыделением в микросекундном интервале времен. Возможно, однако, протекание химической реакции во фронте ударной волны за времена порядка 100 нс. С целью анализа этой возможности проведено сопоставление экспериментально полученных параметров на ударной адиабате с расчетом, выполненным по эмпирическим уравнениям состояния. Результаты обработки экспериментальных данных показали, что состояния, достигаемые системой за ударным фронтом в грубодисперсной смеси характеризуются повышенными значениями давления и скорости ударной волны. Отклонение, однако, составляет 10-15%, что лишь незначительно превышает погрешность измерений и, учитывая приближенный характер построения ударных адиабат, не дает оснований утверждать, что оно связано с протеканием химической реакции во фронте ударной волны.

Для более детального исследования структуры фронта ударной волны проведены измерения профилей массовой скорости в мелкодисперсных составах на границе с водяным окном лазерным интерферометром, обладающим высоким временным разрешением, около 2 нс. Показано, что профили скорости в смеси CuO-B имеют достаточно сложную структуру. Непосредственно за ударным скачком регистрируется пик скорости с амплитудой несколько сот метров и длительностью 100–200 нс. Образование подобного пика может быть обусловлено как протеканием химической реакции, так и динамикой схлопывания пор в образце. Для ответа на этот вопрос были проведены эксперименты с мелкодисперсными образцами, приготовленными из исходных компонент смеси: CuO и B. Оказалось, что в обоих составах, как и в их смеси, за ударным скачком формируется характерный пик скорости, то есть наблюдаемые особенности вызваны пористостью образцов, а не химической реакцией исходных компонентов.

Таким образом, хотя для системы CuO-B выполняются необходимые термодинамические условия существования стационарной детонации, возможность реализации ее в лабораторных условиях лимитируется кинетикой взаимодействия бора с окисью меди.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий».

## **О СТРУКТУРЕ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В НАСЫПНЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВАХ ПО ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ИЗМЕРЕНИЯМ**

*Зубков П.И., Карташов А.М., Лукьянчиков Л.А., Свих В.Г.*

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

Структура детонационной волны в насыпных взрывчатых веществах исследовалась методом электропроводности и видоизменённым методом контактных датчиков. Измерительная ячейка метода электропроводности приведена в [1]. В методе контактных датчиков контактами служили две проволоочки или пластинки, располагавшиеся в плоскости, параллельной детонационной волне. Источником напряжения для проволоочек служил заряженный высокочастотный кабель длиной  $\approx 50$  м. Контактными датчиками фиксировался электрический сигнал, обнаруженный нами при исследовании распределения потенциалов в детонационных волнах [2] и второй сигнал, возникающий при замыкании контактов проводящей областью в детонационной волне.

Если считать, что первый сигнал обусловлен инициирующей ударной волной, то расстояние между двумя сигналами соответствует области до начала деструкции и детонационного превращения. В экспериментах получены расстояния 10-100 нс для октогена, 20-75 нс для тэна и 25-65 нс для тротила.

Начало электропроводности мы связываем с деструкцией и химической реакцией. При протонной проводимости [3] химическая реакция является конкурирующим фактором и приводит к уменьшению электропроводности. На осциллограммах и на распределении электропроводности этот момент по нашим представлениям соответствует появлению особой зоны с электропроводностью на порядок меньше электропроводности равновесных продуктов. Таким образом ширина зоны химической реакции по распределению электропроводности составляет для насыпного октогена и литого тротила 0,6 мм, для насыпного гексогена 1 мм, для насыпных тэна и тротила 1,5 мм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования, грант Е02-3.4-118 и РФФИ, грант 04-02-17548.

1. Зубков П.И., Иванов П. И., Карташов А.М., Лукьянчиков Л.А., Свих В.Г., Тен К.А., Новые экспериментальные данные по электропроводности продуктов детонации конденсированных ВВ // Вещества, материалы и конструкции при интенсивных динамических воздействиях. Труды Международной конференции V Харитоновские тематические научные чтения. Под. ред. А.Л. Михайлова. Саров РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2003. С. 265-269.
2. Зубков П.И., Иванов П. И., Карташов А.М., Лукьянчиков Л.А., Свих В.Г., Тен К.А., Измерение электрических потенциалов, возникающих при детонации порошковых ВВ // Вещества, материалы и конструкции при интенсивных динамических воздействиях. Труды Международной конференции V Харитоновские тематические научные чтения. Под. ред. А.Л. Михайлова. Саров РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2003. С. 442-445.
3. Зубков П.И., О механизме проводимости зоны химической реакции в детонационных волнах в конденсированных взрывчатых веществах // Материалы настоящей конференции.

## О РАЗРЫВЕ СВЯЗЕЙ В ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВАХ ПРИ ДЕТОНАЦИОННЫХ УСЛОВИЯХ

*Зубков П.И.<sup>1</sup>, Лукьянчиков Л.А.<sup>1</sup>, Бохонов Б.Б.<sup>2</sup>, Павлюхин Ю.Т.<sup>2</sup>, Толочко Б.П.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> *Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск*

<sup>2</sup> *Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Вопрос о разрыве связей С-Н или С-С в органических веществах при ударном нагружении и в конденсированных взрывчатых веществах при детонации имеет первостепенное значение. В ударно сжатых органических веществах сведения о типе разорванной связи несут информацию о направлении процесса деструкции молекул и последующей конденсации углерода в различные структуры (например, в алмаз). При детонации конденсированных взрывчатых веществ сведения о преимущественном разрыве связей позволяют получить информацию о ходе химических реакций, по крайней мере на начальном этапе, и могут пролить свет на механизм конденсации углерода и, в частности, на образование зародышей новой фазы.

В предлагаемом докладе приводятся результаты исследования сохранённой твёрдой фазы продуктов детонации смеси (15/85) адамантана ( $C_{10}H_{16}$ ) с гексогеном. Плотность смеси  $1,1 \text{ г/см}^3$ . В адамантане углерод имеет структуру алмаза. В сохранённых продуктах углерод частично конденсирован в кристаллиты алмаза.

При детонации сплавов тротил-гексоген углерод также частично конденсируется в алмазную фазу. Частицы алмаза имеют округлую форму и покрыты слоем конденсированного углерода неалмазной фазы. При детонации гексогена плотности  $1 \text{ г/см}^3$  алмазная фаза практически не образуется.

Исследования твёрдой фазы продуктов детонации смеси адамантан-гексоген проводились на электронном микроскопе в двух режимах: электронно-оптическом и дифракционном. Дифракция подтвердила, что полученные кристаллы принадлежат алмазной фазе. Значительные отличия полученных кристаллов алмаза от взрывных позволяют предположить, что они возникли из углерода адамантана. Таким образом, мы полагаем, что при ударном нагружении адамантана были разорваны преимущественно С-Н связи.

В докладе рассмотрен возможный механизм преимущественного разрыва связи С-Н, основанный на сильном различии атомных масс углерода и водорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования, грант Е02-3.4-118 и РФФИ, грант 04-02-17548.

## О МЕХАНИЗМЕ ПРОВОДИМОСТИ ЗОНЫ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛНАХ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВАХ

Зубков П.И.<sup>1</sup>, Толочко Б.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск

<sup>2</sup> Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

На основании исследования сохранённой твёрдой фазы продуктов детонации смеси (15/85) адамантана (C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>) с гексогеном сделан вывод о преимущественном разрыве связи С-Н по сравнению с С-С в ударно сжимаемых органических веществах [1]. Если предположить, что в инициирующей ударной волне при детонации конденсированных взрывчатых веществ разрушается преимущественно эта связь, то удаётся объяснить пик электропроводности коррелирующий с зоной химической реакции [2].

Действительно, в ковалентной связи С-Н водород частично «уступает» свой единственный электрон углероду и оказывается положительно заряженным. При разрыве этой связи высока вероятность именно протону оказаться свободным. Оценим длину его свободного пробега  $l = (nS)^{-1}$ , где  $n$  – число атомов в единице объёма продуктов детонации,  $S$  – сечение рассеяния для протона. В таких взрывчатых веществах как гексоген, октоген, тэн и тротил при плотности 2 г/см<sup>3</sup>  $n = 10^{23}$ . Сечение рассеяния атомов С, N и О  $S \approx 10^{-16}$  см<sup>2</sup>. Для длины свободного пробега получаем величину  $l \approx 10^{-7}$  см. Эта величина на порядок превосходит размеры атомов и межатомные расстояния. Следовательно мы вправе говорить о длине свободного пробега протона и для электропроводности пользоваться выражением

$$\sigma = \frac{n_p e^2 l}{mv} = \frac{n_p}{n} \frac{e^2}{mvS}$$

В этом выражении  $n_p$  – число протонов в единице объёма,  $e$  – заряд протона,  $m$  – масса протона,  $v$  – его тепловая скорость. Сразу за инициирующей ударной волной в начале деструкции вещества температуру  $T$  будем считать равной 10<sup>3</sup> К. Отношение  $n_p/n$  можно найти из химической формулы взрывчатого вещества, оно оказывается  $\approx 0,4$ , если предположить, что разорваны все С-Н связи. При таком предположении для электропроводности получаем  $\sigma \approx 10^3$  Ом<sup>-1</sup>см<sup>-1</sup>. Это на два порядка превосходит максимальную электропроводность в насыпном октогене, на три в тэне и гексогене и на порядок в литом тротиле. Таким образом, протонная проводимость может обеспечить наблюдаемую электропроводность в детонационных волнах в неравновесной зоне.

Одновременно с деструкцией вещества начинается химическая реакция, являющаяся конкурирующим фактором. Химическая реакция приводит к рекомбинации протонов и уменьшает электропроводность. Мы считаем, что химическая реакция заканчивается при появлении на распределении электропроводности особой области с низкой проводимостью [2].

Косвенным подтверждением протонного механизма проводимости является высокая электропроводность  $\approx 500$  Ом<sup>-1</sup>см<sup>-1</sup> ударно сжатой стеариновой кислоты.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования, грант Е02-3.4-118 и РФФИ, грант 04-02-17548.

1. Зубков П.И., Бохонов Б.Б., Павлюхин Ю.Т., Толочко Б.П., О разрыве связей в органических веществах при детонационных условиях // Материалы настоящей конференции.
2. Зубков П.И., Иванов П. И., Карташов А.М., Лукьянчиков Л.А., Свих В.Г., Тен К.А., Новые экспериментальные данные по электропроводности продуктов детонации конденсированных ВВ // Вещества, материалы и конструкции при интенсивных динамических воздействиях. Труды Международной конференции V Харитоновские тематические научные чтения. Под. ред. А.Л. Михайлова. Саров РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2003. С. 265-269.

## НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВО ФРОНТЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

*Еремин А.В.*

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

В докладе приведен обзор современных теоретических и экспериментальных данных, описывающих природу чрезвычайно сложных физических процессов, происходящих в зоне поступательной неравновесности ударной волны распространяющейся в газовой среде.

Показано, что интенсивность наблюдаемых неравновесных явлений (пики излучения, мгновенный распад и ионизация молекул во фронте, а также неравновесное инициирование воспламенения и детонации) определяется совокупностью двух сложнейших процессов – поведением высокоэнергетического хвоста функции распределения энергий парных соударений во фронте волны и вероятностью неадиабатических столкновений с передачей больших порций энергии («суперстолкновений») для конкретных типов сталкивающихся молекул. Проблема в том, что оба эти процесса до сих пор не поддаются аккуратному теоретическому анализу и в еще меньшей мере могут быть количественно измерены в экспериментах.

Дан обзор результатов численных расчетов энергий парных соударений во фронте ударной волны, проведенных приближенным решением уравнения Больцмана методом Тамма-Мотт-Смита и методом Монте-Карло. Приводятся результаты теоретического анализа вероятностей суперстолкновений на основе траекторных расчетов и неадиабатического приближения Ландау-Зинера.

Особое внимание уделено недавним экспериментальным данным [1] по неравновесному излучению радикалов OH, наблюдаемому в космических экспериментах на станции «Мир» при однократных неадиабатических соударениях



и интенсивному излучению атомов Mo, возникающему во фронте слабых ударных волн в смесях 50-100ppm Mo(CO)<sub>6</sub> + Ar [2].

Анализируются возможные механизмы передачи энергии и пути практического использования наблюдаемого явления.

1. Karabadzhak G.F., Khmelinin B.A., Plastinin Yu.A., Rodionov A.V., Analysis of new spacecraft plume glow data taken onboard of the MIR space station // AIAA Journal. 2003. No. 0509. P.1-11.
2. Eremin A.V., Shmakov A.V., Velikodny V.Yu., Ziborov V.S., Nonequilibrium UV radiation of molybdenum atoms in a weak shock wave front // Symposium RGD-24, Bari, Italy. 2004.

## РЕЛАКСАЦИЯ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

*Летуна С.Н.*

*Оренбургский государственный университет*

При воздействии на вещество интенсивным лазерным излучением значительная доля поглощаемой энергии трансформируется через высокие электронно-возбужденные состояния (ВЭВС) молекул. Энергообмен с окружением в ходе дезактивации ВЭВС, в свою очередь, во многом предопределяет первичные физико-химические процессы, происходящие в конденсированных средах. В этой связи важно иметь информацию об эффективности комбинирующих каналов релаксации ВЭВС молекул. Это необходимо как для понимания закономерностей внутримолекулярных процессов, так и прогнозирования реакций, инициированных этими релаксационными процессами в средах с различной структурной организацией.

В настоящей работе исследованы следующие каналы релаксации ВЭВС многоатомных молекул (изучались молекулы органических красителей в конденсированных средах): излучение (флуоресценция  $S_i \rightarrow S_j$  и  $T_j \rightarrow T_1$ ); интеркомбинационная синглет-триплетная и обратная триплет-синглетная конверсия; внутренняя конверсия; перенос энергии на молекулы окружения. На основании полученных результатов установлены общие закономерности релаксации высоких электронно-возбужденных состояний многоатомных молекул при различных условиях фотовозбуждения.

Основные экспериментальные результаты получены при изучении кинетики затухания замедленной флуоресценции, фосфоресценции и наведенного поглощения сложных молекул при ступенчатом двухквантовом возбуждении через промежуточные нижние электронно-возбужденные синглетные и триплетные состояния. На разных стадиях исследований использовались методы спектродетекции и флуориметрии, динамической голографии, зондовой сканирующей атомно-силовой и туннельной микроскопии.

Среди прочих каналов релаксации ВЭВС многоатомных молекул наименее изучены прямые и обратные интеркомбинационные переходы между синглетными и триплетными состояниями. Ценность сведений об эффективности интерконверсии из ВЭВС в том, что этот процесс заметно влияет на динамику заселенности различных энергетических уровней молекул при возбуждении интенсивным лазерным излучением. Учет интеркомбинационной конверсии необходим для выявления доминирующего канала поглощения, а, следовательно, определения квантового состояния, через которое преимущественно будут реализованы фотореакции при заданных условиях облучения. На примере галогензамещенных флуоресцеина показано, что существуют такие соединения, в которых прямые  $S_n \rightarrow T_m$  и обратные  $T_m \rightarrow S_1$  интеркомбинационные переходы из высоковозбужденных состояний не только успешно конкурируют с другими возможными переходами, но и являются основными каналами релаксации ВЭВС. Определены значения величин квантовых выходов интерконверсии из ВЭВС для молекул ксантеновых красителей. Исследована зависимость квантового выхода интерконверсии из высоких синглетных состояний от энергии кванта, возбуждающего молекулы в полосе  $S_1 \rightarrow S_n$  поглощения, при ступенчатом возбуждении через нижний синглетный уровень. Показано, что в конденсированных средах интеркомбинационные переходы осуществляются с термализованных колебательных подуровней данного электронного состояния, а эффективность интеркомбинационной конверсии увеличивается с ростом энергии  $S_n$  уровня.

Получены экспериментальные данные, свидетельствующие о локальном разогреве среды, обусловленном безызлучательной дезактивацией ВЭВС молекул. Изучены особенности кинетики термостимулированной замедленной флуоресценции в условиях кратковременного импульсного нагрева окрашенной среды. За счет локальной гипертермии макромолекул в результате тепловыделения при безызлучательной дезактивации ВЭВС связанных хромофоров, осуществлена адресная денатурация биополимеров и изучены конформационные изменения полимерных цепей под влиянием локальных температурных полей.

Экспериментально и теоретически исследован межмолекулярный перенос энергии электронного возбуждения с участием ВЭВС. Изучена кинетика двухквантового ступенчатого возбуждения молекул-доноров, находящихся в конденсированной среде акцепторов. Определена эффективность переноса энергии с  $S_n$  и  $T_m$  уровней доноров и для различных соединений оценен вклад каждого канала в возбуждение акцепторов при заданных условиях облучения.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИМПУЛЬСНЫХ ПОТОКОВ ЭНЕРГИИ С МИШЕНЯМИ ИЗ НАНОМАТЕРИАЛОВ

**Ефремов В.П.**

*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

Методы нагружения вещества, связанные с воздействием интенсивных потоков энергии (потоки электронов, ионов, лазерного или рентгеновского излучения) на конденсированные вещества привлекательны с точки зрения компактности получаемых экстремальных состояний вещества и удобства их регистрации, поскольку позволяют получать давления килобарного и мегабарного диапазона в небольших исследуемых образцах находящихся в «настоельных» (desk-top) установках. Сегодня эти методы находят все большее применение для исследования теплофизических свойств веществ в широкой части фазовой диаграммы.

Взаимодействие импульсных потоков излучения с веществом приводит к генерации ударных волн в веществе. Для описания процессов вне зоны энерговыделения и вне зоны тепловой волны используются традиционные разделы механики сплошной среды и физики ударных волн. Внутри зоны энерговыделения могут существовать различные виды неравновесности. Например, тепловая неравновесность между компонентами среды в случае многокомпонентных композиционных материалов и наносекундных импульсов нагрева. При сверхкоротких импульсах (фемтосекундных) отсутствует равновесие между электронной и ионной системами.

Если равновесие в элементе среды не успевает установиться за время акустической релаксации зоны энерговыделения, то форма импульса, генерируемой ударной волны, окажется зависимой от существующей неравновесности в облучаемой зоне.

Фактически, это означает, что для точного определения давления в ударной волне необходима модель поведения среды в зоне энерговыделения. Под моделью поведения среды мы понимаем зависимость давления  $P = P(\epsilon, \rho, t)$ , где  $\epsilon$  - удельная поглощенная энергия,  $\rho$  - плотность,  $t$  - текущее время [1]. В этой модели (для случая тепловой неравновесности между элементами среды композиционного материала) при использовании наноматериалов исчезает зависимость от времени и от типа излучения.

Кроме того, мишени из наноматериалов позволяют работать с различной начальной плотностью. Наиболее удобны для построения моделей поведения пористой среды в условиях облучения прозрачные  $\text{SiO}_2$  - аэрогели [2]. Прозрачность этих сред позволяет оптическими методами изучать эволюцию зоны энерговыделения и одновременно движение ударной волны из этой зоны.

При взаимодействии тяжелых ионов с такими преградами можно подобрать плотность  $\text{SiO}_2$  - аэрогеля мишени позволяющую регистрировать эволюцию зарядового состояния иона вдоль трека торможения иона [3].

Работа выполнена в рамках программ фундаментальных исследований Президиума РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий» и «Фундаментальные проблемы физики и химии наноразмерных систем и наноматериалов».

1. Ефремов В.П., Потапенко А.И., Георгиевский В.П., Соломонов Ю.С., Фортов В.Е., Формирование многоволновой структуры напряжений сжатия-растяжения, вызванных неравновесным поглощением излучения компонентами композиционных материалов // Физика экстремальных состояний вещества-2004. Черногловка. 2004. С.159-160.
2. Демидов Б.А., Ефремов В.П., Ивкин М.В., Ивонин И.А., Петров В.А., Фортов В.Е., Эволюция свечения аэрогеля при его облучении мощным импульсным электронным пучком // Журнал технической физики. 2000. Т. 70. Вып.7. С. 57-64.
3. Pikuz S.A. Jr., Rosmej O.N., Magnitskii S.A., Faenov A.Ya., Pikuz T.A., Efremov V.P., Wieser J., Blazevic A., Investigation of  $\text{Ca}^{+6}$  stopping process dynamic inside the aerogel target by method of X-ray spectromicroscopy //JETP Letters. 2003. V. 78. No. 6. P. 827-831.

## ПОВЕДЕНИЕ КРИСТАЛЛА ГИДРИДА ЛИТИЯ В УСЛОВИЯХ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ

Карпенко С.В.<sup>1</sup>, Савинцев А.П.<sup>2</sup>, Темроков А.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИ Прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН, Нальчик

<sup>2</sup>Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

При нулевом внешнем давлении, как известно, энергетически стабильной является В1-структура (решетка типа NaCl) щелочно-галоидных кристаллов. В области килобарных давлений происходит полиморфное превращение  $B1 \Rightarrow B2$ , так как более энергетически выгодной становится более плотно упакованная В2-структура (решетка типа CsCl) [1-3]; при дальнейшем увеличении давления происходит описанное выше схлопывание запрещенной зоны и кристалл переходит в металлизированное состояние. Переход “диэлектрик - металл” под действием высокого давления в кристаллах имеет место в основном в результате усиливающегося взаимодействия между атомными валентными орбиталями, которое уширяет энергетические зоны и, в конечном итоге, предельно сужает энергетическую щель между валентной зоной и зоной проводимости. В данной работе для расчета давления всестороннего сжатия, при котором должна происходить “металлизация” диэлектрика, используется электронно - статистическая модель в формализме метода функционала плотности. Само превращение «диэлектрик - металл» осуществляется при некотором давлении  $p_m$ , когда термодинамические потенциалы В2-фазы и металлизированной фазы равны.

$$G_{B2} = G_{met} \quad (1)$$

Температура считается равной абсолютному нулю. Термодинамический потенциал кристаллической фазы строится в рамках формализма метода функционала электронной плотности.

Термодинамический потенциал металлизированной фазы рассчитывается в рамках электронной модели Гомбоша, удовлетворительно описывающей свойства щелочных и щелочноземельных металлов. В этом подходе энергия решетки металла (в расчете на пару атомов)

$$U_m = -0.0772Z - \frac{0.9Z^2 + 0.516Z^{4/3}}{R_m} + \frac{1.105Z^{5/3}}{R_m^2} + \frac{3Z(Zr_0^2/6 - 5r_0^2/32\pi)}{R_m^3} + \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} C_a r_0^3 \frac{Z^{4/3}}{R_m}, \quad (2)$$

где  $Z$  – состояние окисления металла;  $R_m$  – расстояние между ближайшими соседями,  $r_0$  – граничный радиус иона в металле;  $C_a = 0.738$  – константа в модели Гомбоша. Объемная часть термодинамического потенциала металлизированной фазы при отличном от нуля внешнем давлении может быть записана в виде [4]

$$G_{mv} = N(U_m - \frac{\partial U_m}{\partial V_m} V_m), \quad (3)$$

где  $N$  – число пар ионов разного знака в исходном кристалле. При давлении, равном давлению металлизации, термодинамические потенциалы диэлектрической и металлической фаз равны. Следовательно, решая уравнение (1) с учетом выражений (2) – (3), получим значение давления металлизации  $p_m$ . Уравнение (1) решалось на ЭВМ путем построения зависимостей термодинамических потенциалов фаз от внешнего давления. Подобная процедура позволяла проводить расчет давления с точностью до 1 кбар.

Полученные результаты демонстрируют снижение давления металлизации по сравнению со случаем бесконечного кристалла на 25 – 60 %. Причем, полученные значения давлений металлизации опять-таки совпадают по порядку величины со значениями радиационного давления, возникающего при собственном поверхностном пробое прозрачных щелочно-галоидных кристаллов. Следовательно, поверхностный оптический пробой диэлектриков (как и объемный [4]) может быть обусловлен скачкообразным сужением запрещенной зоны кристалла под действием радиационного давления, создаваемого мощным импульсом лазерного излучения.

1. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // Известия РАН. Сер. Физическая. Т.66. № 6. С.814.
2. Кяров А.Х., Темроков А.И. // Известия ВУЗов. Физика. 1994. № 6. С. 3.
3. Винокурский Д.Л., Карпенко С.В., Кяров А.Х., Темроков А.И. // ДАН. 2001. Т.381. № 6. С.756.
4. Карпенко С.В., Кяров А.Х., Темроков А.И., Винокурский Д.Л. // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 2. С. 326.



## МЕХАНИЗМ МЕТАЛЛИЗАЦИИ ИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МОЩНОГО ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Карпенко С.В.<sup>1</sup>, Савинцев А.П.<sup>2</sup>, Темроков А.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИИ Прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН, Нальчик

<sup>2</sup>Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик

Развитие лазерной техники, в частности, техники генерирования мощных световых потоков, сдерживается тем, что под действием лазерного излучения большой интенсивности в оптических элементах лазеров происходят необратимые изменения, обусловленные оптическим пробоем. Интерес к явлению оптического пробоя в прозрачных диэлектриках прежде всего обусловлен практическими потребностями лазерной техники, так как решение проблемы фокусировки и передачи мощных лазерных импульсов невозможно без выяснения механизмов лазерного разрушения диэлектриков. Лазерное разрушение имеет и самостоятельный научный интерес как один из фундаментальных вопросов физики взаимодействия интенсивного электромагнитного излучения с веществом. В данной работе предлагается механизм оптического пробоя твердых предельно чистых диэлектриков, связанный со скачкообразным сужением запрещенной зоны, то есть «металлизацией» диэлектрика в интенсивном поле световой волны мощного импульса лазерного излучения. При этом теория металлизации рассматривается в формализме функционала электронной плотности [1].

В большинстве работ, посвященных проблеме оптического пробоя, считается, что взаимодействие лазерного излучения с матрицей вещества ведет к возникновению интенсивной туннельной, ударной или многофотонной ионизации матрицы материала, приводящей к нелинейному накоплению свободных зарядов, что, в свою очередь, вызывает рост поглощения, возникновение плазмы в фокальном объеме и последующее разрушение образца в мощных световых полях. Известные механизмы собственного оптического пробоя рассматривают допороговую ионизацию матрицы, то есть предполагают появление свободных электронов при допороговом возбуждении. Однако имеются экспериментальные работы, в которых показано, что, например, для силикатных стекол и кварца, когда пороги пробоя очень высоки (около  $10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup>), при энергиях кванта излучения, меньших  $(1/2)E_{gv}$  ( $E_{gv}$  – ширина запрещенной зоны диэлектрика в объеме), не наблюдается образование центров окраски и собственной люминесценции даже при облучении лазерным излучением с мощностью 0.95 – 0.98 от пороговой. Такие результаты невозможно объяснить в рамках лавинной и многофотонной ионизации. В частности, трудно в рамках этой теории объяснить экспериментальный факт несущественной зависимости порога оптического пробоя от частоты падающего света, так как вероятность  $n$  – фотонного процесса ( $\omega^{(n)}$ ) степенным образом зависит от интенсивности падающего излучения:  $\omega^{(m)} \sim I^n$ .

В данной работе механизм собственного оптического пробоя диэлектриков, связывается со скачкообразным изменением оптических параметров среды, в частности, скачкообразным возникновением спектра электронных состояний, соответствующих обобществлению валентных электронов. Подобное превращение в некотором смысле аналогично переходу Мотта диэлектрик - металл, но охватывает только электронную подсистему, с другой стороны, оно может рассматриваться как предельный случай эффекта Франца - Келдыша, когда происходит скачкообразное сужение запрещенной зоны в поле световой волны. В результате в центре каустики фокусирующего объектива образуется «металлический» зародыш, поглощение лазерного излучения в котором и приводит к возникновению плазменного облака в фокальном объеме и последующему разрушению образца.

Результаты расчета давлений, при которых осуществляется фазовый переход «диэлектрик - металл», проведенного в рамках метода функционала электронной плотности, свидетельствуют, что порядок давления, создаваемого в диэлектриках, в частности, в щелочно-галоидных кристаллах, при оптическом пробое под влиянием мощного лазерного импульса, совпадает с давлением всестороннего сжатия, при котором происходит «металлизация» вещества. Вследствие этого оптический пробой прозрачных предельно чистых диэлектриков может являться следствием скачкообразного сужения запрещенной зоны в интенсивном поле световой волны за счет высоких давлений [2, 3].

1. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // Доклады РАН. 2003. Т.388. № 1. С.41-45.

2. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // Поверхность. 2004. № 2. с. 53-57.

3. Карпенко С.В., Темроков А.И., Савинцев А.П. // Труды Межд. конф. "Уравнения состояния вещества". Эльбрус-2004. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2004. С.38-39.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПУЧКА ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ НА ТОНКУЮ СВИНЦОВУЮ ФОЛЬГУ

Шутов А.В.<sup>1</sup>, Григорьев Д.А.<sup>1</sup>, Ким В.В.<sup>1</sup>, Грязнов В.К.<sup>1</sup>, Кулиш М.И.<sup>1</sup>, Ломоносов И.В.<sup>1</sup>,  
Матвеевичев А.В.<sup>1</sup>, Минцев В.Б.<sup>1</sup>, Николаев Д.Н.<sup>1</sup>, Острик А.В.<sup>1</sup>, Терновой В.Я.<sup>1</sup>, Шилкин Н.<sup>2,1</sup>,  
Фортов В.Е.<sup>1</sup>, Адонин А.<sup>4</sup>, Варенцов Д.<sup>2,3</sup>, Ни П.А.<sup>3</sup>, Tahir N.A.<sup>2</sup>, Udrea S.<sup>3</sup>, Hoffman D.H.H.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>GSI, Darmstadt, <sup>3</sup>Technical University, Darmstadt, <sup>4</sup>Frankfurt University, Frankfurt

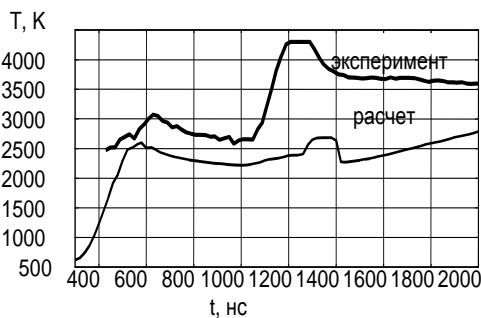
Проведено ч.м. разлета тонкой свинцовой пластины толщиной 250 мкм, нагреваемой пучком ионов  $^{238}\text{U}^{73+}$ , в гелий при давлении 0.5 бар и нормальной температуре. Постановка численного и натурного эксперимента, а также параметры пучка и мишени подробно описаны в [1,2]. Трехмерное численное моделирование [1] показало возможность правильного описания разлета мишени в первые 800-1200 нс двумерными и даже одномерными расчетами. Одномерные расчеты, позволяют выполнить численное моделирование с высоким пространственным и временным разрешением. Специфика задачи заключается в том, что мишень быстро нагревается до температуры, при которой вещество находится в двухфазной области жидкость-пар. Образование и истечение пара с поверхности мишени, и последующее его сжатие на границе с гелием, удается описать только при пространственном разрешении не мене 0.5 мкм на ячейку.

Поскольку в эксперименте регистрировалась интенсивность излучения света перпендикулярно поверхности излучения, проведен соответствующий расчет. Рассматривается случай локального термодинамического равновесия для задачи низкотемпературной газовой динамики. В одномерном случае, когда излучение измеряется для излучения перпендикулярно поверхности изменение интенсивности света  $I_v$  можно записать в виде:  $dI_v / dx = k(I_{pv} - I_v)$ .

Известно, также и из работы [2], что длина свободного пробега излучения с длиной волны 650 нм в жидком свинце  $L \approx 20-40$  нм. Из гидродинамического счета для двухфазной области получаем усредненную плотность вещества  $\rho_{liq+gas}$  связанную с плотностью пара  $\rho_{gas}$  и капель жидкости  $\rho_{liq}$ . Предполагая, что пары прозрачны и все поглощение света связано с жидкостью, можно записать для коэффициента поглощения в двухфазной области, без учета рассеяния света:

$$k = \frac{1}{L} \frac{\rho_{liq+gas} - \rho_{gas}}{\rho_{liq} - \rho_{gas}}.$$

Зависимости от координаты плотности и температуры определяются решением газодинамической задачи с использованием температурного уравнения состояния [3]. Использование в расчете



бинодали или спинодали для определения  $\rho_{liq}, \rho_{gas}$  не приводило к заметному сдвигу расчетной зависимости яркостной температуры от времени. Приведенные на рисунке графики зависимости яркостной температуры от времени и экспериментальный демонстрируют значительное количественное расхождение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№03-07-90197) и ИНТАС (GSI-INTAS контракт № 03-54-4254).

1. Ким В.В. и др.
2. Терновой В.Я., Кулиш М.И., Минцев В.Б., Николаев Д.Н., Фортов В.Е., Адонин А., Варенцов Д., Ни П.А., Тахир Н.А., Удреа Ш., Хоффман Д.Х.Х.. Экспериментальное изучение околокритических состояний перехода жидкость-пар свинца с использованием пучков тяжелых ионов // «Уравнения состояния вещества – 2004».
3. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
4. Hutter V. // J. Phys.: Condens. Matter. 1995. V. 7. P. 907.
5. Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортов В.Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черноголовка, 1992.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГОВКЛАДА ПУЧКА ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ В ТОНКОЙ СВИНЦОВОЙ ФОЛЬГЕ В ТРЕХМЕРНОЙ ПОСТАНОВКЕ

Ким В.В.<sup>1</sup>, Григорьев Д.А.<sup>1</sup>, Кулиш М.И.<sup>1</sup>, Ломоносов И.В.<sup>1</sup>, Матвейчев А.В.<sup>1</sup>,  
Минцев В.Б.<sup>1</sup>, Николаев Д.Н.<sup>1</sup>, Острик А.В.<sup>1</sup>, Шилкин Н.<sup>2</sup>, Шутов А.В.<sup>1</sup>, Фортвов В.Е.<sup>1</sup>, Адонин А.,  
Варенцов Д.,<sup>2,3</sup> Ну П.А.,<sup>3</sup> Tahir N.A.,<sup>2</sup> Udrea S.,<sup>3</sup> Hoffman D.H.H.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>GSI, Darmstadt, <sup>3</sup>Technical University, Darmstadt, <sup>4</sup>Frankfurt University, Frankfurt

Воздействие интенсивных пучков тяжелых ионов позволяет реализовать в веществе состояния с высокой удельной энтропией и исследовать экспериментально свойства плотной горячей жидкости, неидеальной плазмы и двухфазной области жидкость-пар с критической точкой [1]. Нагрев конденсированного вещества пучком тяжелых ионов и его последующий гидродинамический разлет имеет сложную трехмерную структуру. Для более полного описания процесса, помимо зависимости энерговклада от глубины (кривая Брэгга) вдоль траектории иона, необходимо также учитывать трехмерное распределение ионов внутри пучка и его фокусировку, которая накладывает ограничение на использование двумерной осесимметричной постановки. В экспериментах, как правило, для простоты методики и точности интерпретации результатов измерений требуется свести постановку задачи к меньшей размерности.

Проведено численное моделирование воздействия ионного пучка на свинцовую мишень с детальной трассировкой траекторий ионов. Моделируется схема эксперимента [3]. В экспериментах отработывались методики регистрации температуры поверхности образца, и требовалось, в частности, обеспечить однородность нагрева фольги и одномерность последующего ее расширения.

Пучок ионов  $^{238}\text{U}^{73+}$  с общим числом частиц  $N = 4 \cdot 10^9$  и начальной энергией 342.8 МэВ/нук воздействует на тонкую свинцовую фольгу толщиной 0.25 мм, длительность на половине высоты временного профиля интенсивности составляет 240 нс. Пучок сфокусирован таким образом, что в плоскости передней кромки фольги распределение в пучке имеет эллиптическую форму, с полными ширинами на полувысоте 0.85 и 1.6 мм поперек и вдоль поверхности фольги, соответственно. Ионы в пучке имеют нормальное распределение по углам вблизи нуля ( $\sigma_x = 0.01$  рад,  $\sigma_y = 0.005$  рад). Для учета влияния вольфрамовой диафрагмы расположенной перед образцом пучок обрезается на расстоянии 0.25 мм от поверхности фольги (см. рисунок 1). В расчете используется табличное широкодиапазонное уравнение состояния свинца [4]. Тормозная способность свинца для ионов урана рассчитывалась с использованием SRIM [2].

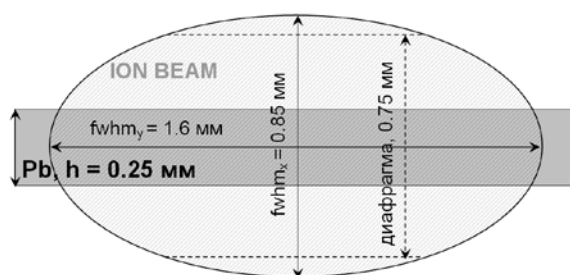


Рис. 1. Схема эксперимента. Показано взаимное расположение свинцовой фольги, фокальной плоскости пучка и вольфрамовой диафрагмы (пучок направлен перпендикулярно плоскости рисунка).

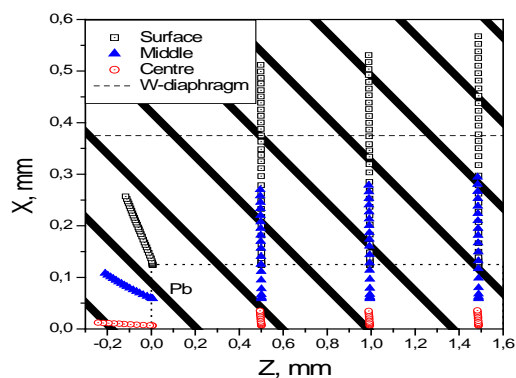


Рис. 2. Траектории движения различных точек фольги.

Результаты трехмерных расчетов показали, что на начальных этапах расчета расширение пластины (в области регистрации) с достаточно хорошей долей приближения можно считать одномерным. На рисунке 2 показаны расчетные траектории маркеров, размещенных в начальный момент в различных точках внутри и на поверхности фольги.

Работа выполнена при финансовой поддержке ИИТАС (GSI-INTAS контракт № 03-54-4254), РФФИ (№03-07-90197) и МНТЦ (№2107).

1. Hoffmann D.H.H., Fortov V.E., Lomonosov I.V., Mintsev V, Tahir N.A., Varentsov D., Wieser J. Unique capabilities of an intense heavy ion beam as a tool for equation-of-state studies // *Phys. Plasmas*. 2002. V. 9 P. 3651-3655.
2. "The Stopping and Range of Ions in Solids", by J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, Pergamon Press, New York, 1985
3. Терновой В.Я., Кулиш М.И., Минцев В.Б., Николаев Д.Н., Фортвов В.Е., Адонин А., Варенцов Д., Ни П.А., Тахир Н.А., Удреа Ш., Хоффман Д.Х.Х.. Экспериментальное изучение околокритических состояний перехода жидкость-пар свинца с использованием пучков тяжелых ионов // «Уравнения состояния вещества – 2004».
4. Бушман А.В., Ломоносов И.В., Фортвов В.Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черноголовка, 1992.

## ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПЛОТНЫХ СРЕДАХ

*Валуев И.А.<sup>1</sup>, Куксин А.Ю.<sup>1,2</sup>, Морозов И.В.<sup>2</sup>, Норман Г.Э.<sup>1,2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>2,1</sup>*

<sup>1</sup>*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

<sup>2</sup>*Московский физико-технический институт*

Метод молекулярной динамики является мощным средством исследования неравновесных состояний и процессов релаксации в плотных средах. В связи с этим можно упомянуть изучение распространения фронта плавления [1], затухающие колебания в однокомпонентной неидеальной плазме [2], релаксацию к равновесию в двухкомпонентной двухтемпературной неидеальной плазме [3,4], рекомбинационную релаксацию в ультрахолодной плазме [5], спонтанный распад перегретых твердого тела [6], релаксацию SH радикала в твердом криптоне [7], релаксацию в биомолекулярных системах [8], свертывание белков [9], релаксацию во фронте ударной волны [10].

Релаксационные процессы представляют собой относительно новую область, где еще не вполне оформились стандартные подходы к моделированию на основе метода молекулярной динамики. В данной работе делается попытка сформулировать ряд общих принципов, характерных для моделирования неравновесных состояний. Рассматриваются следующие вопросы: 1) выбор начальных условий, 2) выбор ансамбля, 3) динамическая и стохастические режимы релаксации, 4) зависимость результатов от числа частиц, 5) мгновенная диагностика, 6) усредненная диагностика, 7) схемы численного интегрирования, 8) параллелизация вычислений, 9) использование аналитических подходов при анализе результатов расчетов.

В качестве иллюстрации приводятся характерные результаты оригинальных расчетов релаксации в неизотермической двухкомпонентной неидеальной плазме и распада метастабильных кристаллов.

1. Wang J., Li J., Yip S., Wolf D., Phillpot S. // *Physica A*. 1997. V. 240 P. 396.
2. Zwicknagel G. // *Contrib. Plasma Phys.* 1999. V. 39. P. 155.
3. Hansen J.P., McDonald I.R. // *Phys. Lett.* 1983. V. 97A. P. 42.
4. Morozov I.V., Norman G.E. et al. // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2003. V. 36. P. 8723.
5. Kuzmin S.G., O'Neil T.M. // *Phys. Plasmas*. 2002. V. 9. P. 3743
6. Norman G.E., Stegairov V.V., Valuev A.A. // *Contrib. Plasma Phys.* 2003. V. 43. P. 384.
7. Firsov D.A., Grigorenko B.L. et al. // *Chem. Phys. Lett.* 2001. V. 338. P. 317.
8. Stella L., Melchionna S. // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 109. P. 10115.
9. Snow C.D., Nguyen H., Pande V.S., Gruebele M. // *Nature*. 2002. V. 420. P. 102.
10. Tanguy D., Mareschal M., Lomdahl P.S. et al. // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 144111.