

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 161, ВЫПУСК 3

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МАРТ 2022

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Нелинейная динамика атомно-молекулярной конверсии изотопов щелочных металлов при сверхнизких температурах Зинган А. П., Васильева О. Ф. 307
- Упругопластические и полиморфные превращения в пленках железа при нагрузке ультракороткими лазерными ударными волнами Мурзов С. А., Ашитков С. И., Струлева Е. В., Комаров П. С., Хохлов В. А., Жаховский В. В., Иногамов Н. А. 315

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Моделирование отклика детектора LSD на нейтринную вспышку от SN1987A Мануковский К. В., Юдин А. В., Агафонова Н. Ю., Мальгин А. С., Рязжская О. Г. 331

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

- Структура, электрические и магнитные свойства метастабильных фаз $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ Дудников В. А., Верецагин С. Н., Соловьёв Л. А., Гаврилкин С. Ю., Цветков А. Ю., Ситников М. В., Орлов Ю. С. 346
- О проводимости двумерной модели Рэлея в области фазового перехода металл–диэлектрик Балагуров Б. Я. 358

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Формирование особенностей собственной энергии термическими флуктуациями сверхпроводящего параметра порядка	Грошев А. Г., Аржников А. К.	363
Прогнозирование кинетики релаксации модуля сдвига при кристаллизации металлических стекол на основе калориметрических измерений	Макаров А. С., Афонин Г. В., Цзiao Ц. Ч., Кобелев Н. П., Хоник В. А.	373

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА,
ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Собственные колебания головной ударной волны и их взаимосвязь с магнитосферными резонансами	Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Ванг Ч., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Блецки Я., Лежен Л. А.	381
Волны Пуанкаре и волны Россби в сжимаемых течениях мелкой воды	Юденкова М. А., Климачков Д. А., Петросян А. С.	388
Ударная передача давления твердому веществу в мишени с пористым поглотителем излучения мощного лазерного импульса	Белов И. А., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Вергунова Г. А., Воронин А. Ю., Гаранин С. Г., Головкин С. Ю., Гуськов С. Ю., Демченко Н. Н., Деркач В. Н., Дмитриев Е. О., Змитренко Н. В., Илюшечкина А. В., Кравченко А. Г., Кузьмин И. В., Кучугов П. А., Мюсова А. Е., Рогачев В. Г., Рукавишников А. Н., Соломатина Е. Ю., Стародубцев К. В., Стародубцев П. В., Чугров И. А., Шаров О. О., Яхин Р. А.	403
Решение самоорганизованно-критической модели Манни для размерностей пространства 2–4	Подлазов А. В.	414
Поиск перехода Байка – Бен Аруса – Пеше путем размерной редукции	Валов А. Ф., Горский А. С., Нечаев С. К.	430
Метод псевдоатомной молекулярной динамики для расчета коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии плотной плазмы	Фальков А. Л., Лобода П. А., Овечкин А. А., Ивлиев С. В.	438

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ КОНВЕРСИИ ИЗОТОПОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ СВЕРХНИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А. П. Зинган^{}, О. Ф. Васильева*

*Приднестровский государственный университет им. Т. Г. Шевченко
MD-3300, Тирасполь, Молдова*

Поступила в редакцию 4 октября 2021 г.,
после переработки 4 октября 2021 г.
Принята к публикации 14 октября 2021 г.

Изучена динамика атомно-молекулярной конверсии системы конденсированных изотопов лития при сверхнизких температурах. Представлены точные аналитические решения, показывающие, что в условиях точного резонанса имеют место аperiодические и периодические режимы превращения атомов ${}^6\text{Li}$ и молекул ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ в молекулу ${}^6\text{Li}_2$ и атом ${}^7\text{Li}$. Показано, что временная эволюция атомов и молекул в процессе стимулированной конверсии определяется начальной разностью фаз.

DOI: 10.31857/S0044451022030014

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение бозе-конденсатов в последнее время является очень перспективной линией изучения свойств ультрахолодных молекулярных газов. В последние годы важным направлением является получение сложных, многоатомных молекул при сверхнизких температурах [1–12]. В работе [13] было описано существование трехатомных ефимовских резонансных молекул, которые впервые наблюдались в ультрахолодных газах в 2006 г. Тримерные молекулы наблюдались экспериментально в трехкомпонентных ферми-газах ${}^6\text{Li}$ [14, 15] и в бозе-газе атомов ${}^{39}\text{K}$ [16]. Этот факт открывает новые пути исследования многочастичных квантовых систем. Также недавно были получены тетрамеры в ультрахолодном газе цезиевых атомов. В приближении среднего поля были описаны свойства гомоядерных и гетероядерных тетрамеров [17, 18]. В работе [19] теоретически изучено образование стабильных гомо- и гетероядерных пентамеров из ультрахолодных атомов в процессе обобщенного стимулированного рамановского адиабатического прохождения.

В работе [20] на основе модифицированной системы уравнений Гросса – Питаевского изучена дина-

мика атомного и молекулярного бозе-эйнштейновских конденсатов ${}^{87}\text{Rb}$ в сферически-симметричной ловушке в процессе стимулированной рамановской фотоассоциации. Показано, что динамика системы существенно определяется не только межатомными взаимодействиями, но также атомно-молекулярными и межмолекулярными взаимодействиями. Пространственно-временная эволюция атомов и молекул сводится к монотонному радиальному уменьшению плотности частиц в ловушке и осцилляционным колебаниям плотностей во времени.

В работе [21] сообщалось о генерации квантовой вырожденной ферми-ферми-смеси двух атомов различных сортов Li^6 и K^{40} охлажденным бозонным газом Rb^{87} . Была описана комбинация методов для успешного охлаждения смеси. В частности, показано, что эффективность охлаждения газа Li^6 и Rb^{87} повышается за счет присутствия атомов K^{40} через каталитическое охлаждение. Из-за различных физических свойств этих двух компонентов квантовая вырожденная ферми-ферми-смесь $\text{Li}^6\text{-K}^{40}$ является отличным вариантом для стабильной гетероядерной системы, позволяющей изучать некоторые до сих пор не до конца исследованные типы квантовой материи.

Что касается практического применения конденсатов, то в работе [22] показано, как сильно взаимодействующие ультрахолодные бозонные газы в периодических потенциалах можно использовать в ка-

^{*} E-mail: zingan.anna@mail.ru

честве проводников в цепи и для построения атомных аналогов диодов и транзисторов с биполярным переходом. Таким образом появляется возможность реализации атомного усилителя — устройства, которое позволяет управлять большим атомным током. Транзистор, представленный в [22], непосредственно служит этой цели, поскольку небольшие изменения тока базы приводят к большим изменениям тока коллектора. Отсюда открывается перспектива представления более сложных бистабильных устройств.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Цель данной работы — изучить динамику атомно-молекулярной конверсии в ультрахолодных газах. Рассмотрим систему конденсированных частиц, состоящую, например, из изотопов лития и их молекул. Образование гомо- и гетеродимеров изотопов лития можно представить в виде реакции ${}^6\text{Li} + {}^6\text{Li}{}^7\text{Li} \leftrightarrow {}^7\text{Li} + {}^6\text{Li}_2$. В [23] показано, что изотопно-обменные реакции между основными состояниями щелочно-галлоидных гетероядерных димеров, состоящих из двух изотопов одного и того же атома, являются экзотермическими с изменением энергии в области 1–8000 МГц. Поэтому гетероядерные димеры являются химически нестабильными при ультранизких температурах. Например, две гетеромолекулы ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ распадаются на два димера ${}^6\text{Li}_2$ и ${}^7\text{Li}_2$ с выделением энергии порядка 8000 МГц. Пусть атом ${}^6\text{Li}$ и молекула ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ преобразуются в молекулу ${}^6\text{Li}_2$ и атом ${}^7\text{Li}$ под действием двух импульсов резонансного лазерного излучения с энергиями $\hbar ck_1$ и $\hbar ck_2$. Рассматриваемый процесс является оптической рамановской нутацией в условиях атомно-молекулярной конверсии под действием двух когерентных рамановских импульсов резонансного лазерного излучения с периодическим усилением одного из импульсов и ослаблением другого. Тогда гамильтониан взаимодействия в этом случае можно представить в виде

$$H_{int} = -\hbar g \left(a_1 b_1 c_1 a_2^\dagger b_2^\dagger c_2^\dagger + a_1^\dagger b_1^\dagger c_1^\dagger a_2 b_2 c_2 \right), \quad (1)$$

где a_1 , a_2 , b_1 и b_2 — бозонные операторы уничтожения атомов изотопов лития ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$ и димеров изотопов лития ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ и ${}^6\text{Li}_2$ с собственными частотами ω_1 , ω_2 , Ω_1 и Ω_2 соответственно, c_1 и c_2 — операторы уничтожения фотонов, g — константа взаимодействия. Из гамильтониана (1) получена система гейзенберговских уравнений для операторов частиц реакции, усредняя которую и используя приближение среднего поля (mean field approximation)

[17, 18], можно получить систему нелинейных уравнений для амплитуд (параметров порядка) материального и электромагнитного полей:

$$\begin{aligned} i\dot{a}_1 &= \omega_1 a_1 - g b_1^\dagger c_1^\dagger a_2 b_2 c_2, \\ i\dot{b}_1 &= \Omega_1 b_1 - g a_1^\dagger c_1^\dagger a_2 b_2 c_2, \\ i\dot{c}_1 &= ck_1 c_1 - g a_1^\dagger b_1^\dagger a_2 b_2 c_2, \\ i\dot{a}_2 &= \omega_2 a_2 - g a_1 b_1 c_1 b_2^\dagger c_2^\dagger, \\ i\dot{b}_2 &= \Omega_2 b_2 - g a_1 b_1 c_1 a_2^\dagger c_2^\dagger, \\ i\dot{c}_2 &= ck_2 c_2 - g a_1 b_1 c_1 a_2^\dagger b_2^\dagger. \end{aligned} \quad (2)$$

Вводим далее в рассмотрение плотности частиц $n_1 = a_1^\dagger a_1$, $n_2 = a_2^\dagger a_2$, $N_1 = b_1^\dagger b_1$, $N_2 = b_2^\dagger b_2$, $f_1 = c_1^\dagger c_1$, $f_2 = c_2^\dagger c_2$ и две компоненты «поляризации»

$$Q = i(a_1 b_1 c_1 a_2^\dagger b_2^\dagger c_2^\dagger - a_1^\dagger b_1^\dagger c_1^\dagger a_2 b_2 c_2),$$

$$R = a_1 b_1 c_1 a_2^\dagger b_2^\dagger c_2^\dagger + a_1^\dagger b_1^\dagger c_1^\dagger a_2 b_2 c_2.$$

Тогда удается получить замкнутую систему дифференциальных уравнений для плотностей частиц:

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 &= -gQ, \\ \dot{n}_2 &= gQ, \\ \dot{N}_1 &= -gQ, \\ \dot{N}_2 &= gQ, \\ \dot{f}_1 &= -gQ, \\ \dot{f}_2 &= gQ, \\ \dot{Q} &= \Delta R - 2g(N_1 f_1 + n_1 f_1 + N_1 n_1) N_2 n_2 f_2 - \\ &\quad - (N_2 f_2 + n_2 f_2 + N_2 n_2) N_1 n_1 f_1, \\ \dot{R} &= -\Delta Q, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\Delta = \omega_1 + \Omega_1 + ck_1 - (\omega_2 + \Omega_2 + ck_2)$$

— расстройка резонанса. Дополнив систему начальными условиями

$$n_{1,2} \Big|_{t=0} = n_{10,20}, \quad N_{1,2} \Big|_{t=0} = N_{10,20},$$

$$f_{1,2} \Big|_{t=0} = f_{10,20},$$

$$Q \Big|_{t=0} = Q_0 = 2\sqrt{n_{10} n_{20} N_{10} N_{20} f_{10} f_{20}} \sin \theta_0,$$

$$R \Big|_{t=0} = R_0 = 2\sqrt{n_{10} n_{20} N_{10} N_{20} f_{10} f_{20}} \cos \theta_0,$$

где θ_0 — начальная разность фаз, из (3) удается получить интегралы движения

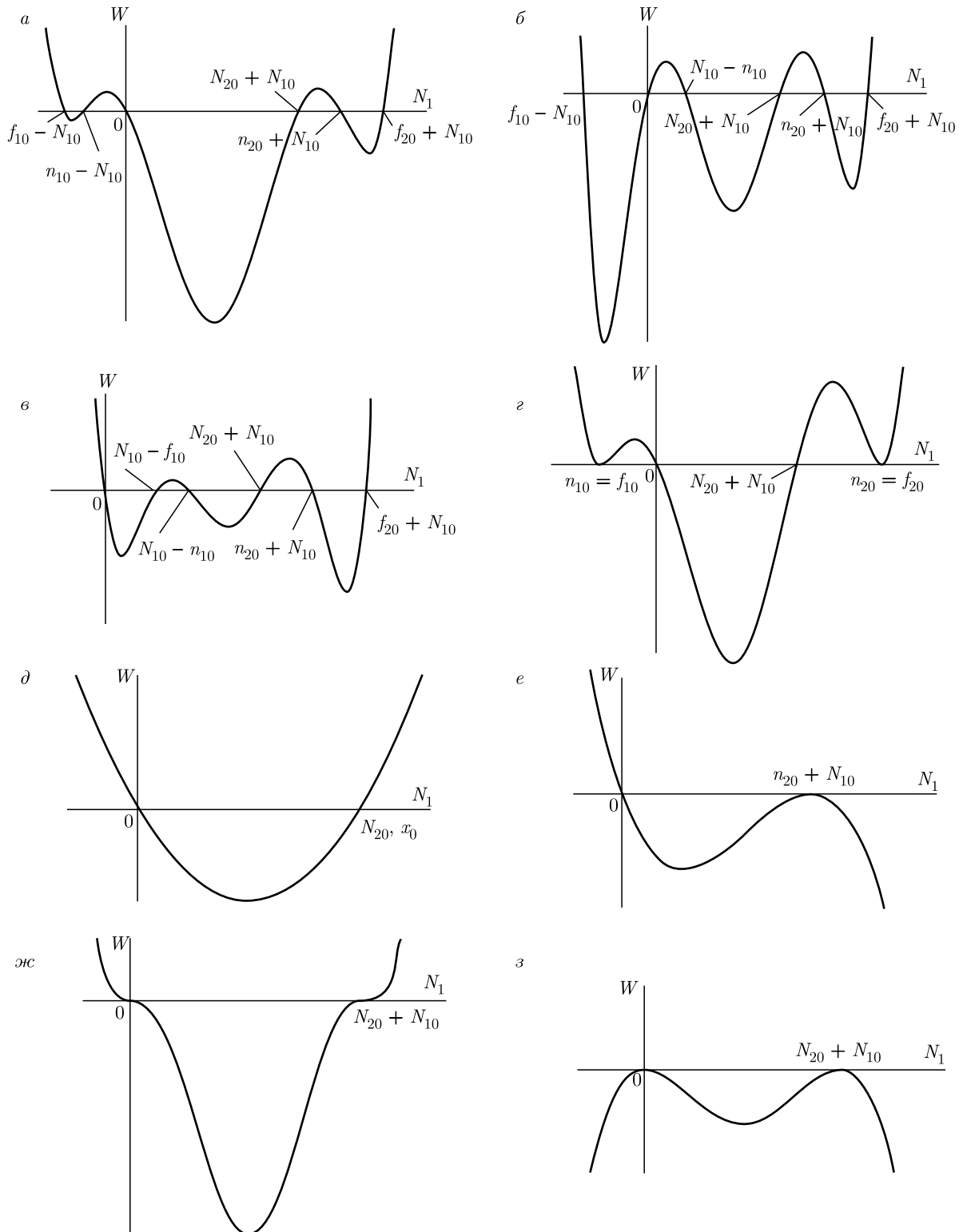


Рис. 1. Графики потенциальной энергии $W(N_1)$ нелинейного осциллятора при $\theta_0 = \pi/2$ и различных соотношениях между параметрами: а) $f_{20} > n_{20} > N_{20}$, $f_{10} > n_{10} > N_{10}$; б) $f_{20} > n_{20} > N_{20}$, $f_{10} > N_{10}$, $N_{10} > n_{10}$; в) $f_{20} > n_{20} > N_{20}$, $N_{10} > f_{10} > n_{10}$; г) $f_{10} = n_{10} > N_{10}$, $f_{20} = n_{20} > N_{20}$; д) приближение $n_{10}, n_{20}, f_{10}, f_{20} \gg N_{20}$; е) приближение $n_{10}, f_{10}, f_{20} \gg n_{20} = N_{20}$; ж) $f_{20} = n_{20} = N_{20}$, $N_{10} = f_{10} = n_{10}$; з) приближение $f_{10}, f_{20} \gg n_{10} = N_{10}$, $n_{20} = N_{20}$

$$\begin{aligned}
 N_2 &= N_{10} + N_{20} - N_1, \\
 n_2 &= N_{10} + n_{20} - N_1, \\
 f_2 &= N_{10} + f_{20} - N_1, \\
 n_1 &= n_{10} - N_{10} + N_1, \\
 f_1 &= f_{10} - N_{10} + N_1, \\
 R &= \Delta g^{-1}(N_1 - N_{10}) + \\
 &+ 2\sqrt{n_{10}n_{20}N_{10}N_{20}f_{10}f_{20}} \cos \theta_0, \\
 Q^2 &= 4N_1(n_{10} - N_{10} + N_1)(f_{10} - N_{10} + N_1) \times \\
 &\times (N_{10} + N_{20} - N_1)(N_{10} + n_{20} - N_1) \times \\
 &\times (N_{10} + f_{20} - N_1) - (\Delta g^{-1}(N_1 - N_{10}) + \\
 &+ 2\sqrt{n_{10}n_{20}N_{10}N_{20}f_{10}f_{20}} \cos \theta_0)^2
 \end{aligned} \tag{4}$$

и свести задачу к одному нелинейному дифференциальному уравнению, описывающему временную эволюцию $N_1(t)$ плотности димеров изотопов лития ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$. В условиях точного резонанса, при $\Delta = 0$, уравнение динамики атомно-молекулярной конверсии можно представить в виде

$$\dot{N}_1^2 + W(N_1) = E_0,$$

где \dot{N}_1^2 , $W(N_1)$ и E_0 играют роль соответственно кинетической, потенциальной и полной энергий нелинейного осциллятора, колебания которого происходят в той области значений N_1 , в которой $W(N_1) \leq E_0$. Здесь

$$\begin{aligned}
 W(N_1) &= -4N_1(n_{10} - N_{10} + N_1) \times \\
 &\times (f_{10} - N_{10} + N_1)(N_{10} + N_{20} - N_1) \times \\
 &\times (N_{10} + n_{20} - N_1)(N_{10} + f_{20} - N_1), \\
 E_0 &= -4n_{10}n_{20}N_{10}N_{20}f_{10}f_{20} \cos^2 \theta_0.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Рассматривая зависимость потенциальной энергии нелинейного осциллятора $W(N_1)$, можно судить о качественном характере динамики $N_1(t)$. На рис. 1 показано, что эволюция системы при отличных от нуля начальных плотностях всех частиц является периодической и состоит в циклическом изменении плотности димеров, связывающихся из изотопов атомов. Даже при попарном равенстве плотностей $n_{10} = f_{10}$ и $n_{20} = f_{20}$ динамика остается периодической (рис. 1а). Однако особенности эволюции системы определяются не только значениями начальных плотностей частиц, но также и соотношениями между ними. Например, при равенстве начальных плотностей частиц $N_{10} = n_{10} = f_{10}$ и $N_{20} = n_{20} = f_{20}$ периодический режим эволюции переходит в аperiodический (рис. 1б). Аналитические решения в общем случае получить не представляется возможным в известных алгебраических функциях, поэтому мы используем приближения заданных начальных плотностей частиц, участвующих в реакции. В

этом случае возможны как периодические превращения атомов в молекулы, так и необратимые процессы распада и связывания молекул (рис. 1в,з).

3. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Вначале рассмотрим случай заданных начальных плотностей фотонов и атомов n_{10} , n_{20} , f_{10} , $f_{20} \gg N_{20}$ в условиях точного резонанса при начальной плотности димеров изотопов лития равной нулю, $N_{10} = 0$, и начальной разности фаз $\theta_0 = \pi/2$. Данный случай представляет интерес для рассмотрения, так как двухатомные димеры различных изотопов лития в начальный момент времени отсутствуют. Решение для плотности частиц $N_1(t)$ в этом случае имеет вид

$$N_1 = N_{20} \sin^2 \left(g\sqrt{n_{10}n_{20}f_{10}f_{20}} t \right). \tag{6}$$

Следовательно, плотность молекул периодически изменяется со временем, причем амплитуда колебаний равна начальной плотности гомоядерных димеров $A = N_{20}$, а период колебаний выражается как

$$T = \frac{\pi}{g\sqrt{n_{10}n_{20}f_{10}f_{20}}}. \tag{7}$$

Период колебаний определяется произведением четырех наибольших плотностей, причем с ростом каждой из них он монотонно убывает. Амплитуда колебаний определяется величиной наименьшей начальной плотности молекул N_{20} . На рис. 2 представлены графики временной эволюции нормированной плотности двухатомных молекул $N_1(t)$ при различных значениях плотности N_{20} . Если начальная плотность двухатомных гомоядерных молекул N_{20} равна нулю, то эволюция в системе отсутствует, хотя начальные плотности всех остальных частиц, участвующих в реакции, отличны от нуля. При отличной от нуля плотности N_{20} происходит периодическое во времени изменение плотности двухатомных гетероядерных молекул от нуля до заданного ее значения.

В том же приближении, но при отличной от нуля расстройке резонанса, $\Delta \neq 0$, также удастся получить аналитическое решение для плотности двухатомных гетероядерных молекул $N_1(t)$:

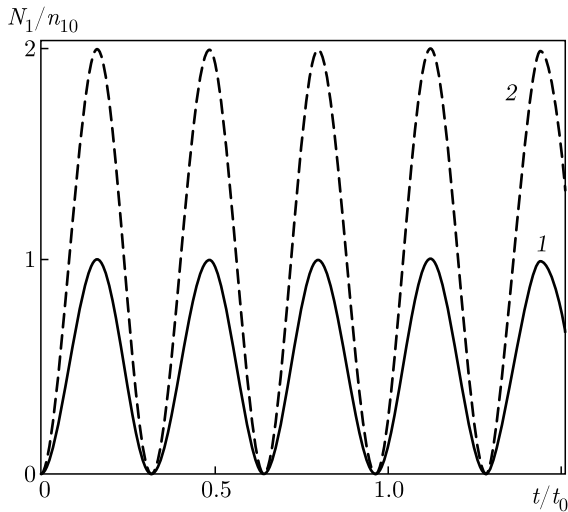


Рис. 2. Временная эволюция нормированной плотности гетероядерных димеров в случае заданных начальных плотностей фотонов и атомов n_{10} , n_{20} , f_{10} , $f_{20} \gg N_{20}$ при $N_{10} = 0$, $n_{20}/n_{10} = 2$, $f_{10}/n_{10} = 3$, $f_{20}/n_{10} = 4$, $\theta_0 = \pi/2$; $N_{20}/n_{10} = 1$ (1), 2 (2)

$$N_1 = \frac{N_{20}}{1 + \frac{\Delta^2}{4g^2 n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}}} \times \sin^2 \left(\sqrt{g^2 n_{10} n_{20} f_{10} f_{20} + \frac{\Delta^2}{4}} t \right), \quad (8)$$

$$T = \frac{\pi}{g \sqrt{g^2 n_{10} n_{20} f_{10} f_{20} + \frac{\Delta^2}{4}}}.$$

В этом случае динамика превращения атомов в молекулы остается периодической с амплитудой

$$A = \frac{N_{20}}{1 + \frac{\Delta^2}{4g^2 n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}}}.$$

Видно, что расстройка резонанса влияет на амплитуду и период колебаний, уменьшая их по сравнению с предыдущим случаем. В целом же общий вид динамики изменения плотности двухатомных гетероядерных молекул изотопов $N_1(t)$ не изменяется.

Далее рассмотрим динамику системы в том же приближении $n_{10}, n_{20}, f_{10}, f_{20} \gg N_{10}, N_{20}$, но при произвольных значениях начальной разности фаз θ_0 . Будем также считать, что в начальный момент времени плотность гетероядерных молекул N_{10} отлична от нуля. В этом приближении удастся получить аналитическое решение, которое существенно зависит от начальных плотностей частиц и разности

фаз. Если начальные плотности гомо- и гетероядерных молекул различны, то решение имеет вид

$$N_1 = 0.5(N_{10} + N_{20}) \pm \sqrt{N_{10} N_{20}} |\sin \theta_0| \sin \left(2g \sqrt{n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}} t \right) + 0.5(N_{10} - N_{20}) \cos \left(2g \sqrt{n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}} t \right). \quad (9)$$

При равенстве начальных плотностей молекул или отсутствии одной из них в начальный момент времени решение упрощается и принимает вид

$$N_1 = N_0 (1 \pm |\sin \theta_0| \sin \left(g \sqrt{n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}} t \right)), \quad (10)$$

если $N_{10} = N_{20} = N_0$;

$$N_1 = N_{20} \sin^2 \left(g \sqrt{n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}} t \right), \quad (11)$$

если $N_{10} = 0$;

$$N_1 = N_{10} \cos^2 \left(g \sqrt{n_{10} n_{20} f_{10} f_{20}} t \right), \quad (12)$$

если $N_{20} = 0$. При одновременном равенстве нулю начальных плотностей молекул $N_{10} = N_{20} = 0$ временная эволюция отсутствует. Это связано с отсутствием стимулирования процесса. На рис. 3 представлена временная эволюция нормированной плотности гетероядерных молекул димеров изотопов лития $N_1(t)$. Видно, что при отличных от нуля начальных плотностях молекул колебания происходят в области значений, не достигая нуля и не превышая суммы начальных концентраций, причем амплитуда колебаний тем больше, чем больше начальное значение N_{20} (рис. 3а,б). При равенстве нулю одной из начальных плотностей молекул колебания происходят в области от нуля до значения соответствующей ненулевой исходной плотности молекул. При этом решение со знаком «+» при $N_{10} = 0$ сначала возрастает и затем изменяется периодически, а при $N_{20} = 0$ — сначала убывает до нуля. То есть с увеличением времени происходит периодическое связывание атомов ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$ в димеры с распадом двухатомных гомоядерных молекул ${}^6\text{Li}_2$.

На рис. 4 представлена временная эволюция плотности молекул $N_1(t)$ в зависимости от начальной разности фаз. Видно, что в начальный момент времени плотность молекул не изменяется и остается постоянной, равной начальной. Далее, с течением времени эволюция системы является периодической. Амплитуда колебаний существенно определяется начальной разностью фаз. При $\theta_0 = 0, \pi, \dots$

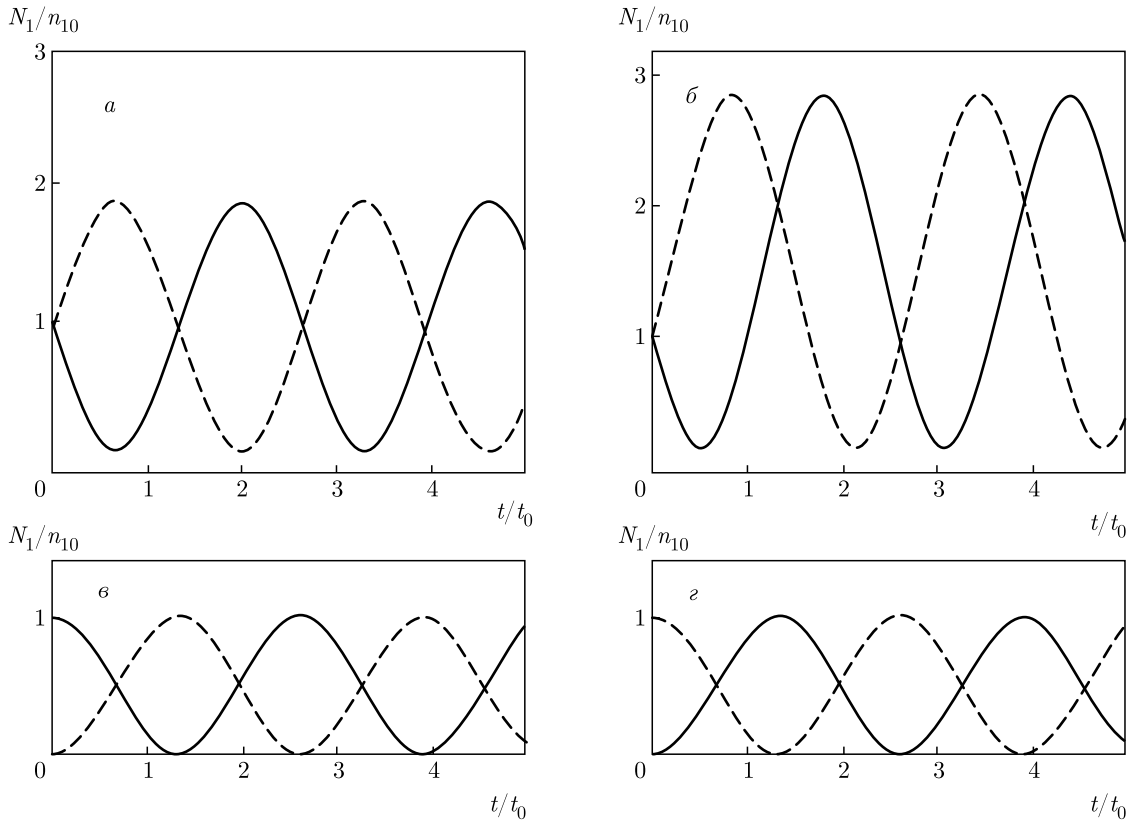


Рис. 3. Временная эволюция нормированной плотности гетероядерных димеров в случае заданных начальных плотностей фотонов и атомов $n_{10}, n_{20}, f_{10}, f_{20} \gg N_{20}$ при $n_{20}/n_{10} = 2, f_{10}/n_{10} = 3, f_{20}/n_{10} = 4, \theta_0 = \pi/3; N_{20}/N_{10} = 1$ (а), 2 (б); $N_{10} = 0$ (в), $N_{20} = 0$ (г); сплошные линии — решение со знаком «-», штриховые — решение со знаком «+»

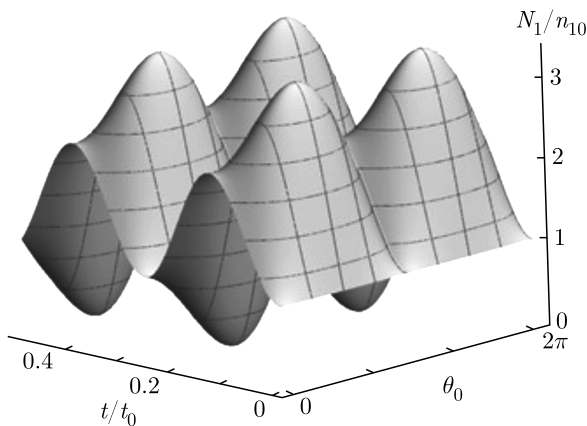


Рис. 4. Временная эволюция нормированной плотности гетероядерных димеров в случае заданных начальных плотностей фотонов и атомов $n_{10}, n_{20}, f_{10}, f_{20} \gg N_{20}$ при различных значениях начальной разности фаз θ_0 при $n_{20}/n_{10} = 2, f_{10}/n_{10} = 3, f_{20}/n_{10} = 4, N_{20}/N_{10} = 2.5, 0 < \theta_0 < 2\pi$

амплитуда колебаний является наименьшей, а при $\theta_0 = \pi/2, 3\pi/2, \dots$ амплитуда колебаний достигает своего наибольшего значения. Можно сделать вывод, что начальная разность фаз существенно определяет динамику превращений атомов в молекулы и их распад. Таким образом, сохраняя начальные плотности частиц постоянными и изменяя только начальную разность фаз, можно управлять динамикой процесса атомно-молекулярной конверсии.

Рассмотрим теперь приближение заданных начальных плотностей фотонов и атомов изотопов лития ${}^6\text{Li}$ при равенстве начальных концентраций атомов изотопов лития ${}^7\text{Li}$ и димеров ${}^6\text{Li}_2$ ($n_{10}, f_{10}, f_{20} \gg n_{20} = N_{20}$). Так же, как и в первом рассмотренном случае, будем исследовать динамику в условиях точного резонанса и при начальной разности фаз $\theta_0 = \pi/2$. В этом приближении, как видно из графика потенциальной энергии (рис. 1е), плотность молекул N_1 будет изменяться с течением времени аperiодически. Нами получено аналитическое решение, которое имеет вид

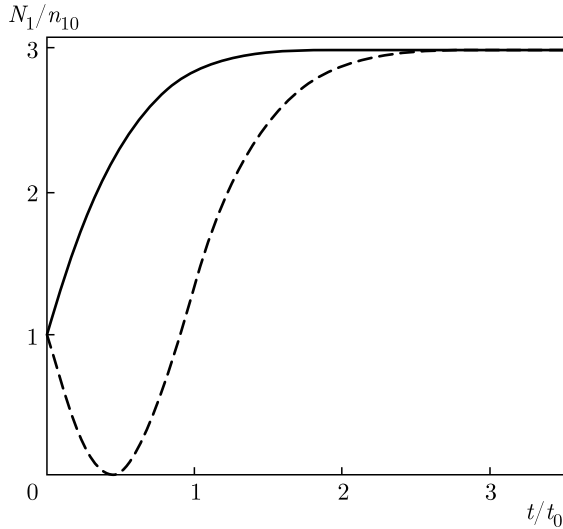


Рис. 5. Временная эволюция нормированной плотности гетероядерных димеров в приближении $n_{10}, f_{10}, f_{20} \gg \gg n_{20} = N_{20}$ при $f_{10}/n_{10} = 3, f_{20}/n_{10} = 4, \theta_0 = \pi/2$; сплошная линия — решение со знаком «+», штриховая — со знаком «-»

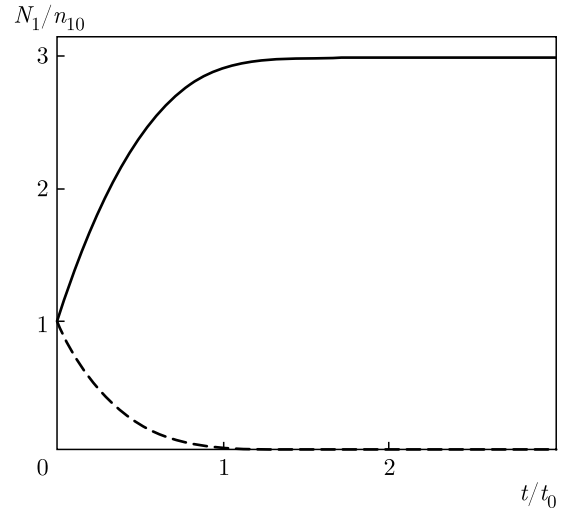


Рис. 6. Временная эволюция нормированной плотности гетероядерных димеров в приближении $f_{10}, f_{20} \gg n_{10} = N_{10}, n_{20} = N_{20}$ при $n_{20}/n_{10} = 2$; сплошная линия — решение со знаком «+», штриховая — со знаком «-»

$$N_1 = (N_{10} + n_{20}) \left(\sqrt{\frac{N_{10}}{N_{10} + n_{20}}} + \text{th} \left(g \sqrt{(N_{10} + n_{20}) n_{10} f_{10} f_{20} t} \right) \right)^2 \times \left(1 \pm \sqrt{\frac{N_{10}}{N_{10} + n_{20}}} \times \text{th} \left(g \sqrt{(N_{10} + n_{20}) n_{10} f_{10} f_{20} t} \right) \right)^{-2}. \quad (13)$$

Как представлено на рис. 5, решение со знаком «+» монотонно возрастает с течением времени и плотность образующихся двухатомных гетероядерных молекул растет, достигая насыщения при времени $t \rightarrow \infty$:

$$N_{1max} = N_{10} + n_{20}. \quad (14)$$

Решение со знаком «-» сначала монотонно убывает и плотность образующихся молекул достигает нулевого значения в момент времени

$$t = \frac{\text{arth} \sqrt{\frac{N_{10}}{N_{10} + n_{20}}}}{g \sqrt{(N_{10} + n_{20}) n_{10} f_{10} f_{20}}}, \quad (15)$$

затем начинает монотонно возрастать, достигая предельного значения (14). Таким образом, на больших временах различие в решениях с противоположными знаками исчезает. В этом случае все атомы ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$ связываются в гетероядерные димеры ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ с распадом двухатомных гомоядерных молекул ${}^6\text{Li}_2$, чем эволюция и завершается.

Рассмотрим еще одно приближение заданных начальных плотностей частиц, при котором удастся получить аналитическое решение. Предположим, что начальные плотности фотонов много больше плотностей остальных частиц, плотность атомов изотопов лития ${}^6\text{Li}$ в начальный момент времени равна плотности гетероядерных димеров ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ и плотность атомов изотопов лития ${}^7\text{Li}$ в начальный момент времени равна плотности гомоядерных молекул ${}^6\text{Li}_2$ ($f_{10}, f_{20} \gg n_{10} = N_{10}, n_{20} = N_{20}$). В этом случае динамика конверсии, как видно из рис. 1з, также является аperiодической. Для этого приближения решение для плотности гетероядерных димеров принимает вид

$$N_1 = \frac{n_{10}(n_{10} + n_{20}) \exp(\pm 2g(n_{10} + n_{20}) \sqrt{f_{10} f_{20} t})}{n_{20} + n_{10} \exp(\pm 2g(n_{10} + n_{20}) \sqrt{f_{10} f_{20} t})}. \quad (16)$$

На рис. 6 представлена временная эволюция плотности гетероядерных молекул. Решение для плотности гетероядерных димеров ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ со знаком «+» только монотонно возрастает, достигая при $t \rightarrow \infty$ значения $n_{10} + n_{20}$, т.е. все атомы ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$ связываются в гетероядерные димеры с распадом двухатомных гомоядерных молекул ${}^6\text{Li}_2$, чем эволюция и завершается, что качественно совпадает с предыдущим рассмотренным случаем. Что же касается решения со знаком «-», оно соответствует монотонному уменьшению до нуля плотности гете-

роядерных димеров ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ с увеличением времени, что говорит об их распаде на атомы ${}^6\text{Li}$ и ${}^7\text{Li}$, этим эволюция в системе прекращается и процесс является необратимым.

Теперь рассмотрим эволюцию конверсии атомов и молекул в случае равенства начальных плотностей в первом и втором каналах реакции $N_{10} = n_{10} = f_{10}$ и $N_{20} = n_{20} = f_{20}$. Здесь нами также получены точные аналитические решения для плотности $N_1(t)$ гетероядерных димеров ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$:

$$N_1 = \frac{n_{10} + n_{20}}{2} \left(1 \pm \frac{\sqrt{n_{10}n_{20}}(n_{10} + n_{20})^2gt - n_{20} + n_{10}}{\sqrt{4n_{10}n_{20} + (\sqrt{n_{10}n_{20}}(n_{10} + n_{20})^2gt - n_{20} + n_{10})^2}} \right). \quad (17)$$

В этом случае качественно динамика совпадает с показанной на рис. 6, т.е. эволюция является аperiodической и с течением времени все частицы либо связываются в молекулы (решение со знаком «+»), либо распадаются на атомы (решение со знаком «-»).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, можно сделать вывод о том, что динамика атомно-молекулярной конверсии изотопов, например лития, и их молекул в общем случае, без применения приближений заданных начальных плотностей частиц, является периодической и состоит в циклическом распаде и связывании атомов в димеры. В общем случае этот вывод возможен только на основе исследования поведения потенциальной энергии. Что касается аperiodической динамики, то она возможна только в случаях равных начальных плотностей частиц и при использовании различных приближений. Из представленных выше результатов также следует, что временная эволюция атомов и молекул в процессе стимулированной конверсии существенно определяется начальными плотностями частиц и начальной разностью фаз, что позволяет эффективно управлять динамикой конверсии.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. C. Burchianti et al., Phys. Rev. **98**, 063616 (2018).
2. K. Wang, Phys. Rev. **100**, 063429 (2019).
3. K. Voges, Phys. Rev. **101**, 042704 (2020).
4. J. D. Hood, Phys. Rev. Res. **2**, 023108 (2020).
5. P. Gregory, Phys. Rev. Lett. **124**, 163402 (2020).
6. X. Wang, Phys. Rev. **101**, 041601 (2020).
7. F. Wang, Phys. Rev. **100**, 042706 (2019).
8. L. Liu, Phys. Rev. Lett. **122**, 253201 (2019).
9. G. Guijarro, Phys. Rev. **101**, 041602 (2020).
10. A. Dey, Phys. Rev. **101**, 053627 (2020).
11. S.-Y. Meng, X.-H. Chen, S.-N. Ning et al., J. Phys. B **47**, 185303 (2014).
12. F.-Q. Dou, S.-C. Li, H. Cao et al., Phys. Rev. **85**, 023629 (2012).
13. T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger et al., Nature **440**, 315 (2006).
14. T. B. Ottenstein, T. Lompe, M. Kohnen et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 203202 (2008).
15. J. H. Hucknau, J. R. Williams, E. L. Hazlett et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 165302 (2009).
16. M. Zaccanti, B. Deissler, C. D'Errico et al., Nature Phys. **5**, 586 (2009).
17. H. Jing and Y. Jiang, Phys. Rev. **77**, 065601 (2008).
18. G. Q. Li and P. Peng, Phys. Rev. **83**, 043605 (2011).
19. F.-Q. Dou, S.-C. Li, H. Cao et al., Phys. Rev. **85**, 023629 (2012).
20. M. Gupta and K. R. Dastidar, J. Phys. B **41**, 195302 (2008).
21. M. Taglieber, Phys. Rev. Lett. **100**, 010401 (2008).
22. B. T. Seaman, Phys. Rev. **75**, 023615 (2007).
23. M. Tomza, arXiv:1505.03443.

УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИЕ И ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПЛЕНКАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ НАГРУЗКЕ УЛЬТРАКОРОТКИМИ ЛАЗЕРНЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

С. А. Мурзов^{a,b}, С. И. Ашитков^b, Е. В. Струлева^b, П. С. Комаров^b,
В. А. Хохлов^c, В. В. Жаховский^{a,b,c}, Н. А. Иногамов^{c,b,a}*

^a *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова
127055, Москва, Россия*

^b *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

^c *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 19 октября 2021 г.,
после переработки 19 октября 2021 г.
Принята к публикации 21 октября 2021 г.

Представлены результаты экспериментальных исследований лазерных ударных волн, инициируемых пикосекундным импульсом в железе. Обработка и анализ экспериментальных измерений проведены с использованием теоретических подходов и численного моделирования. Интерес к пикосекундным воздействиям обусловлен уникально высокими темпами деформации, в частности, зависимостью от темпа деформации порогов упруго-пластических и полиморфных трансформаций. Исследование необходимо для развития области лазерного упрочнения металлов. Первые шаги в этом направлении сделаны, хотя такого рода подход к упрочнению лазернойковки уже широко применяется на практике. Используются современные наработки в области генерации ударных волн и их экспериментальной диагностики, а также развиваются сопутствующие методы теоретической интерпретации данных. Сложность заключается в пикосекундном масштабе времен, так как диагностика опытов ограничена кинематикой, а именно, измерением координаты свободной поверхности. Для выяснения кинетики полиморфного превращения на пикосекундных масштабах времен впервые применен метод обратного анализа скорости свободной поверхности. Валидация метода проводилась с использованием результатов гидродинамического и молекулярно-динамического моделирования при прямом извлечении механических напряжений и деформации. Теоретическое исследование традиционными методами восстановленных профилей скорости свободной поверхности подтверждает результаты в области их применимости — на упругом и пластическом фронтах ударной волны. Переход железа в ϵ -фазу имеет место на начальном участке распространения ударной волны, пока эта волна имеет достаточную амплитуду. Причина состоит в ограничении по давлениям до 40 ГПа из-за оптического пробоя в стекле и затухания ударной волны по мере распространения.

DOI: 10.31857/S0044451022030026

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые сведения о применении мощных наносекундных лазеров для исследований уравнений состояния конденсированных веществ приведены в работах [1, 2]. Механические явления возникают при любом лазерном воздействии. В частности, лазеры

являются генераторами ударных волн (УВ), которые конкурируют с механическими способами создания УВ в конденсированной фазе, т. е. посредством столкновения мишени с ударником или с использованием взрывчатых веществ.

Относительно новым является научно-технологическое направление, связанное с применением ультракоротких фемто- и пикосекундных лазерных импульсов для изучения поведения конденсированных сред при высоких скоростях деформации. Со-

* E-mail: murzovs@gmail.com

здание такого рода импульсных источников света происходит при усилении чирпированных импульсов.

С ультракороткими воздействиями связаны две важные особенности — термомеханическая и механическая. Область, в которой происходят поглощение энергии и нагрев вещества, достаточно тонкая, поэтому необходимо учитывать превышение электронной температуры над температурой решетки [3]. Авторы имеют опыт формулировки таких моделей [4–8], но генерация УВ в железе имеет следующие особенности.

Первая особенность заключается в термомеханическом эффекте. Движение основной массы прогретого слоя начинается после окончания лазерного нагрева. Тепловое расширение вещества из нагретого слоя пленки создает волны сжатия в стеклянной подложке и внутри пленки железа, хотя нагретый слой приводит к генерации волн сжатия и в случае продолжительного по времени импульса [5, 9–11]. Волны сжатия уходят далеко от нагретого слоя, а тепло остается аккумулированным в веществе слоя нагрева; говорят, что энтропийная и акустическая моды разделяются.

Вторая особенность состоит в продолжительности нахождения в сжатом состоянии конденсированной среды в волне сжатия. Волна сжатия формируется при акустическом распаде слоя высокого давления. Поведение материалов под действием механических нагрузок предельно малой длительности со сменой на разгрузку находится за пределами микросекундных и даже наносекундных воздействий.

Применение таких воздействий интересно при изучении пикосекундной кинетики разложения молекул, например, во взрывчатых веществах [12, 13]. Еще больший интерес проявляется к исследованию кинетики упруго-пластических и полиморфных превращений в твердой фазе [6, 14–28]. Экспериментальные [14–18] и расчетные [6, 23–27] исследования показывают резкое повышение порогов, разделяющих упругое и пластическое ударно-волновые течения. В результате дано теоретическое объяснение серии блестящих фемтосекундных опытов американских ученых [29–32] — УВ распространяются существенно быстрее, чем им положено при данной амплитуде давления.

В прикладном отношении задача возникает в связи с многообещающими современными технологиями пикосекундной лазернойковки [33–35]. Другое важное новое направление связано с пикосекундной диагностикой объектов со сложной внутренней структурой [36, 37]. Ультракоротким воздей-

ствием возбуждают акустические вибрации, измеряют их с помощью серии пикосекундных зондирующих импульсов с малой скважностью по времени и восстанавливают внутреннюю структуру по спектру упругих вибраций. При этом, в отличие от лазернойковки, для возбуждения и зондирования применяют энергетически слабые воздействия (неповреждающий контроль). В работах [36, 37] используют упругие поверхностные волны [38–40]. Контроль за трещинами традиционно осуществляется с помощью поверхностных волн Рэлея и Лэмба. В работах [36, 37, 40] новизна заключается в чрезвычайной миниатюризации измерений.

В железе начато изучение влияния темпа нагрузки на кинетику и степень завершенности сложного полиморфного перехода $\alpha \rightarrow \varepsilon$ [20, 41, 42]. Настоящая работа представляет собой продолжение таких исследований. Известно, что напряжение, при котором происходит переход в пластический режим движения, возрастает с увеличением скорости нагружения. Для многих кристаллических тел эта зависимость резко усиливается при превышении значений темпа деформирования порядка 10^3 – 10^4 с⁻¹, что интерпретируется как следствие изменения механизма движения дислокаций от термофлуктуационного к надбарьерному, контролируемому фононным трением [43].

Пикосекундная длительность действия механической нагрузки дает возможность реализации метастабильных состояний вещества, далеких от равновесия, и изучения поведения различных материалов при предельно больших скоростях деформации [44]. В частности, в пикосекундном временном диапазоне уже удалось вплотную приблизиться к предельно возможным («идеальным») значениям объемной и сдвиговой прочности для ряда металлов [14–22, 44, 45].

В настоящее время полиморфные переходы в микросекундном диапазоне УВ-нагружения зарегистрированы для многих металлов, полупроводников и ионных соединений [46]. Поведение железа и сталей, являющихся основными конструкционными материалами энергетики и машиностроения, в экстремальных условиях активно изучается в течение нескольких последних десятилетий. В настоящее время известны четыре твердые фазы железа [47]: α (ОЦК), γ (ГЦК), δ (ОЦК) и ε (ГПУ).

Фазовый полиморфный переход $\alpha \rightarrow \varepsilon$ в железе был обнаружен по излому ударной адиабаты [48]. Переход детально исследовался в УВ-экспериментах в субмикросекундном диапазоне нагружения [49–52]. Переход сопровождается изменением

магнитных свойств. При давлении 13 ГПа железо претерпевает полиморфное $\alpha \rightarrow \epsilon$ -превращение в ϵ -фазу высокого давления. В работах [21, 49–53] профиль УВ имеет трехволновую конфигурацию. Первая волна — упругий предвестник, соответствует пределу текучести (примерно 0.5 ГПа при субмикросекундном нагружении), затем следует фронт пластической УВ в α -фазе. В третьем скачке уплотнение происходит из-за превращения $\alpha \rightarrow \epsilon$. Обратный фазовый переход в α -фазу при разгрузке возникает при давлении ниже 13 ГПа, что приводит к гистерезису кривой нагрузки–разгрузки.

Для генерации ударной нагрузки предельно малой длительности (порядка 0.1 нс) применяются лазерные методы с использованием оптических импульсов пико- и фемтосекундного диапазонов [14–22]. Диагностика осуществляется интерферометрическим методом накачки–зондирования с зондирующим чирпированным импульсом [15, 16, 20, 54], что позволяет измерять смещение поверхности в субнаносекундном диапазоне с временным разрешением до 1 пс.

В работе [20] были проведены первые опыты по определению метастабильной сжимаемости железа при пикосекундном ударном воздействии. По результатам измерений на пленочных образцах железа чистотой 0.999 и толщиной 250 и 540 нм была оценена метастабильная адиабата упругого сжатия. Зарегистрированное максимальное напряжение за фронтом упругого предвестника достигало 27 ГПа на длине распространения 250 нм. Величина максимального сдвигового напряжения составляет 7.9 ГПа, что выше значения прочности из *ab initio* расчетов [55, 56] и может быть объяснено увеличением модуля сдвига.

В работе [21] приведены результаты измерений профилей скорости свободной поверхности более толстых пленочных образцов железа толщиной 1.2 и 1.4 мкм. Интерпретация профилей свободной поверхности основывается на восстановлении кривых состояния в переменных напряжение–деформация (σ – V/V_0). Трансформация в ϵ -фазу происходит при давлениях выше 25 ГПа, что примерно в 2 раза больше, чем при микросекундном нагружении. При этом трехволновая конфигурация фронта волны не регистрировалась из-за относительно низкой скорости пластической релаксации.

В работах [57–60] рассматривались микросекундные воздействия, а в работе [21] — нагружение с длительностью импульса 200 пс.

В нашей работе длительность импульса составляет 1.2 пс, что на 2 порядка меньше, чем в [21]. При этом мы рассматриваем аналогичную постановку эксперимента — пленка железа на стеклянной подложке, которую облучает через подложку лазерный импульс. Для восстановления эволюции напряжения и деформации материала в плоскости σ – V/V_0 при прохождении волны используется метод обратного анализа скорости свободной поверхности. Этот метод развивается давно [57, 58]. Мы использовали этот метод с учетом разгрузочной части кривой, что позволило наблюдать полиморфный частичный фазовый переход. Для восстановления напряжения и деформации в пленке наименьшей толщины использовалось кусочно-квазистационарное приближение, т. е. скорость распространения УВ в образце полагалась постоянной на длине пробега, равной наименьшей толщине из имеющегося экспериментального набора. Валидация метода обратного анализа проводилась на основе результатов молекулярно-динамического моделирования. При этом механическое действие лазерного импульса в молекулярной динамике основано на двухтемпературном гидродинамическом расчете с учетом поглощения лазерного излучения пленкой железа на подложке.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ СХЕМА И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Измерения движения тыльной поверхности пленочных образцов железа при выходе УВ осуществлялись методом спектральной интерферометрии [54] с применением чирпированных импульсов при однократном лазерном воздействии.

Лазерный импульс накачки (pump) фокусировался на пленочный металлический образец через стеклянную подложку, а диагностика УВ-явлений осуществлялась на тыльной свободной поверхности частотно-модулированным зондирующим (probe) импульсом (рис. 1).

Источником импульсов накачки и зондирования служила фемтосекундная титан-сапфировая лазерная система, собранная по схеме усиления чирпированных импульсов. Импульсы длительностью 40 фс на центральной длине волны 795 нм с шириной спектра ± 30 нм, генерируемые задающим генератором 1, направлялись во временной расширитель, или стретчер 2, где далее преобразовывались в частотно-модулированные импульсы длительностью 300 пс. Далее эти импульсы усиливались в усилителе 3, состоящем из регенеративного усилителя

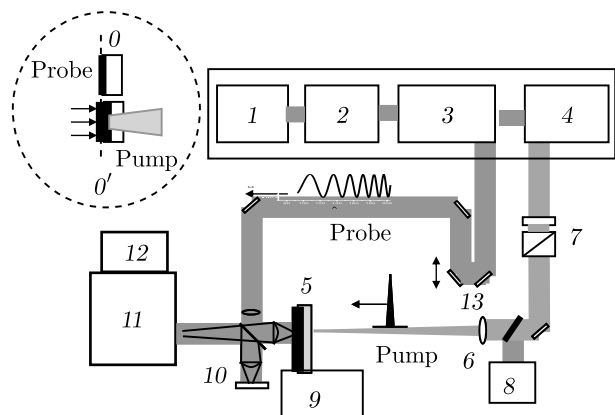


Рис. 1. Оптическая схема измерений: 1 — задающий генератор; 2 — стретчер; 3 — усилитель; 4 — компрессор; 5 — испытуемый пленочный образец; 6 — линза; 7 — поляризационный ослабитель; 8 — фотодиод; 9 — микроманипулятор; 10 — интерферометр Майкельсона; 11 — дифракционный спектрометр, 12 — ПЗС-камера; 13 — оптическая линия задержки

и двухпроходного усилителя мощности. После регенеративного усилителя часть chirпированного импульса отводилась из оптического тракта и использовалась для диагностики. Остальное излучение после усилителя мощности направлялось во временной компрессор 4, где сжималось до нужной длительности, и в дальнейшем использовалось в качестве импульсов накачки.

Излучение накачки фокусировалось на поверхность пленочного образца 5 (см. вставку на рис. 1) через прозрачную подложку линзой 6 с фокусным расстоянием 20 см в пятно с пространственным гауссовым распределением с $r_0 = 30$ мкм.

Данный размер пятна обеспечивал практически одноосное сжатие материала мишени микронной толщины (размер пятна намного превышает толщину мишени). Энергия импульсов плавно варьировалась с помощью поляризационного ослабителя 7 и контролировалась калиброванным фотодиодом 8. После каждого лазерного воздействия мишень перемещалась примерно на 200 мкм на новое место с помощью микроманипулятора 9.

При данной конфигурации эксперимента (нагрев через стеклянную пластинку) существует ограничение на интенсивность падающего лазерного излучения в связи с возможным возникновением нелинейных эффектов и оптического пробоя в стекле. С целью уменьшения пиковой интенсивности длительность нагревающего импульса была увеличена с 40 фс до 1.2 пс путем соответствующей настройки компрессора лазерной системы. В описываемых

экспериментах энергия лазерных импульсов составляла $E = 100 \pm 5$ мкДж, что соответствует плотности падающей энергии в центре фокального пятна $F_0 = 3.4$ Дж/см². Энергия импульсов в экспериментах специально подбиралась для генерации импульсов сжатия максимальной амплитуды в исследуемых образцах. Превышение данного значения энергии E приводило к искажению регистрируемого пространственного профиля смещения и к уменьшению скорости свободной поверхности, связанному с развитием оптического пробоя и поглощением излучения в стекле подложки.

Для диагностики динамики смещения $z(t)$ тыльной свободной поверхности металлического образца при выходе УВ сжатия применялся интерферометр Майкельсона 10, собранный по схеме переноса изображения (конфигурация Линника) и совмещенный с дифракционным спектрометром Acton-2300i (схема Черни–Тернера) 11 с дифракционной решеткой 600 штрихов/мм. Перенос изображения осуществлялся с помощью микрообъектива Olympus с числовой апертурой $NA = 0.3$, что обеспечивает пространственное разрешение в плоскости мишени 2 мкм. Регистрация оптических сигналов на выходе спектрометра проводилась с помощью ПЗС-камеры SensiCam QE 12 с охлаждаемой матрицей размером 1375×1375 пкс и разрядностью 12 бит. Оптическая линия задержки 13 служила для коррекции времени задержки между нагревающим и зондирующим импульсами при настройке схемы или смене образцов. Применяемая оптическая схема обеспечивала непрерывную регистрацию динамики процесса с временным разрешением $\delta t \approx 1$ пс во временном интервале $\Delta t = 0$ –200 пс.

Экспериментальными образцами служили пленки Армко-железа толщиной 480, 580, 740, 970 и 1160 нм, нанесенные магнетронным методом на стеклянные подложки толщиной 150 мкм. В качестве магнетронной мишени использовалась пластина Армко-железа чистотой 0.95. Толщина образцов измерялась в области лазерного воздействия с помощью атомно-силового микроскопа Veeco, Multi-mode 5 с точностью ± 5 нм.

В проводимых экспериментах свободная поверхность исследуемых образцов разной толщины позиционировалась с помощью микроманипулятора 9 (см. рис. 1) в предметную плоскость OO' объектива интерферометра (см. вставку на рис. 1) с точностью не хуже 2 мкм. Настройка осуществлялась по максимальному контрасту интерференционных полос. При этом точность установки единой (относительной) временной шкалы измерений при смене об-

разцов с разной толщиной пленки составляет менее 100 фс, что существенно меньше временного разрешения измерений. Данная погрешность складывается из различия в толщине подложек и точности позиционирования поверхности образца и в сумме не превышает 10–20 мкм. Поделив погрешность по толщине на скорость света, определяем указанную неточность менее 100 фс. Для приведенного набора толщин пленок разница времен выхода на тыльную поверхность составляет десятки пикосекунд. Поэтому погрешностью измерений разницы времен выхода УВ, связанной с точностью позиционирования и различием толщин образцов, можно пренебречь.

Для определения начала отсчета времени, аналогично работе [29], в эксперименте использовалась дополнительный пленочный образец толщиной 20 нм. Толщина этого образца сравнима с глубиной поглощения лазерного излучения в железе. Энергия импульса поглощается электронами проводимости и далее передается в решетку за характерное время электрон-фононного теплообмена порядка 1 пс [61], после чего начинается движение тыльной поверхности пленки. Отметим, что аналогичные процессы поглощения излучения и нагрева решетки имеют место и при воздействии лазера на другие образцы. Таким образом, момент времени начала смещения пленки толщиной 20 нм может быть принят за начальный отсчет времени $t_0 = 0$. Такая шкала времени ассоциирована с абсолютным временем движения импульса сжатия из области нагрева до свободной поверхности в каждой из пленок. Точность определения момента t_0 нами оценивается на уровне ± 1 пс.

При обработке данных применялся метод фурье-анализа интерферограмм, включающий процедуру их сравнения и позволяющий восстановить пространственно-временное распределение изменения амплитуды $\Delta A(y, t)$ и фазы $\Delta\varphi(y, t)$ отраженной диагностической волны (здесь y — пространственная координата вдоль щели спектрометра). Величина смещения Δz поверхности связана с изменением фазы посредством соотношения

$$\Delta z = \lambda \Delta\varphi / 4\pi. \quad (1)$$

В каждом опыте записывались три интерферограммы: интерферограмма поверхности образца до воздействия (начальная), в момент выхода УВ (временная) и после окончания процесса — спустя несколько секунд после воздействия (финальная). Сопоставление начальной и временной интерферограмм дает информацию о пространственно-временной динамике УВ-процесса.

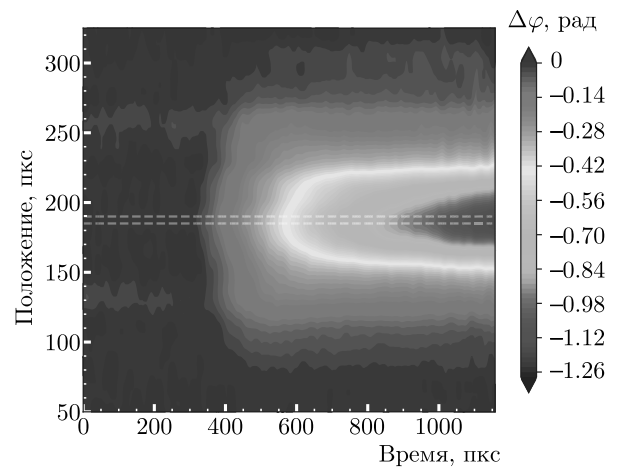


Рис. 2. (В цвете онлайн) Пространственно-временное распределение фазы диагностического импульса при выходе УВ на тыльную поверхность образца железа толщиной 970 нм. Профиль смещения $z(t)$ строится для области между штриховыми прямыми. Масштабы по осям ординат и абсцисс были рассчитаны переводом пикселей матрицы в меры длины 0.4 мкм/пкс и времени 0.167 пс/пкс. Цветовая шкала дана в радианах

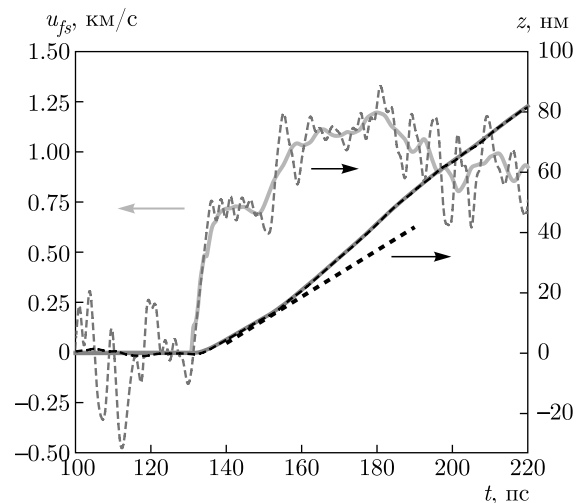


Рис. 3. (В цвете онлайн) Результат численного дифференцирования смещения $z(t)$ свободной поверхности, измеренного в эксперименте, показан серой штриховой линией. Итоговый профиль скорости поверхности пленочного образца железа толщиной 970 нм, $u_{fs}(t)$ (желтая кривая) получен численным дифференцированием с последующим сглаживанием экспериментально полученного смещения $z(t)$ (штриховая черная кривая). Итерационная обработка обеспечивает наилучшее соответствие интеграла сглаженного профиля скорости (красная кривая) измеренному профилю $z(t)$

На рис. 2 в качестве примера приведено пространственно-временное распределение фазы $\Delta\varphi(y, t)$ диагностической волны, описывающее динамику пространственно-неоднородного движения тыльной свободной поверхности пленочного образца железа толщиной $h = 970$ нм в момент выхода УВ, генерируемой излучением лазера с энергией $E = 100$ мкДж. Пример обработки экспериментальных данных приведен на рис. 3.

Профили построены для центральной части области воздействия с интегрированием по пространственному интервалу ± 2 мкм, что соответствует диапазону вариации плотности энергии падающего излучения $\Delta F/F_0 = 0.01$. На рис. 3 показаны профили смещения и скорости свободной тыльной поверхности образца толщиной 970 нм после прихода УВ. Смещение поверхности (черная кривая) вычислялось непосредственно по фазовому сдвигу из измеренного в эксперименте фазового распределения $\Delta\varphi(y, t)$ на рис. 2. Результирующий профиль скорости поверхности (желтая кривая на рис. 3) был получен путем дифференцирования профиля смещения (серая кривая) с последующим сглаживанием и итерационной обработкой, обеспечивающей наилучшее соответствие интеграла скорости (красная кривая) измеренному профилю $z(t)$.

Таким образом, применяемая схема измерений обеспечивала непрерывную регистрацию смещения $\Delta z = \Delta z(t)$ поверхности образца как функции времени с пространственным разрешением $\delta y \approx 2$ мкм по радиальной координате в плоскости мишени и с временным разрешением $\delta t = 1$ пс во временном диапазоне 0–200 пс, определяемыми дисперсией спектрометра. Применяемый алгоритм фурье-анализа двумерных интерферограмм [62] с процедурой нормировки фазовых распределений обеспечивает погрешность измерения сдвига фазы диагностического импульса на уровне $\delta\psi \approx 0.01$ рад, что соответствует погрешности определения величины смещения поверхности на уровне $\delta z \leq 1$ –2 нм.

3. ОБРАТНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕМАТИЧЕСКИХ ДАННЫХ

3.1. От кинематики к динамике и внутренним состояниям среды

После первичной обработки мы получили кинематическую информацию — историю скорости свободной границы $u_{fs}(t)$ в экспериментах с разной толщиной пленки. Возможны несколько подходов построения теоретического описания. описа-

ние УВ-профилей может проводиться аналитически. Исследователь извлекает информацию о времени прихода УВ, характерных изломах и, полагая, что в веществе мог наблюдаться тот или иной физический эффект, интерпретирует результаты в рамках модельных представлений об упруго-пластических и полиморфных превращениях.

Другой подход является прямым численным моделированием. Такой подход применяется, когда аналитически учесть влияние параметров физической модели затруднительно. В результате серии расчетов подбираются параметры такой модели и делается вывод о ее применимости на основе сопоставления с экспериментом расчетных профилей $u_{fs}(t)$. При этом физическая модель может быть основана на свойствах исследуемого вещества, известных априори и не зависящих от описываемого эксперимента явно. Построение модели может быть сложным, поэтому на пути достижения согласия между опытом и расчетом переходят к более упрощенным феноменологическим моделям.

Такие феноменологические модели ставят своей целью приближенное описание сложного физического явления, например, кинетики фазового перехода, разрушения или химических реакций в сложной микроструктурной структуре материала. Варьирование параметров таких моделей опирается лишь на описание интересующего эксперимента, что и позволяет достичь конечной цели — согласия расчетных и экспериментальных данных. Для моделирования полиморфного фазового перехода $\alpha \rightarrow \varepsilon$ в железе при микросекундных воздействиях данный подход успешно используется в работе [53].

Рассматриваемые в нашей работе ультракороткие воздействия на металл с полиморфным фазовым переходом усложняют формулировку упомянутых выше физических моделей. Во-первых, модель должна охватывать поглощение излучения и двухтемпературную (2Т) физику — электрон-ионную релаксацию и распространение тепла по электронной подсистеме из слоя поглощения. Во-вторых, модель согласованной тепловой и динамической частей задачи описывает трансформацию фемтосекундного нагрева в давление. Для этого строится система 2Т-уравнений, которая приведена в работе [63]. В результате уравнения и термодинамическое состояние среды, где давление инициирует движение УВ, применяются в гидростатическом приближении. В-третьих, УВ выходит из зоны плавления лазером, и ее дальнейшее распространение происходит в твердой фазе. Поэтому распространение УВ в пленке железа необходимо рассчитывать для де-

формируемого твердого тела с учетом наличия полиморфного фазового перехода.

Предлагается подход получения данных о плотности $\rho(h, t)$ и продольном напряжении $\sigma(h, t)$. Для этого аппроксимируется функция $u_{fs}(h, t)$ на основе экспериментальных результатов для разной толщины пленки h . Подход требует проведения экспериментов для минимум двух [21] или трех [59] разных толщин пленок в зависимости от порядка аппроксимирующих полиномов. Мы используем кусочно-линейную аппроксимацию скорости, поэтому в модель закладывается аппроксимация только первой производной скорости свободной поверхности. Поскольку исходными данными являются временные профили координат свободных поверхностей, использование аппроксимации более высокого порядка означало бы аппроксимацию третьей производной от измеряемой величины. По значениям ρ и σ , зная ударные адиабаты упругого сжатия и пластического сжатия в α - и ε -фазах, мы можем определить фазовое состояние твердого тела.

3.2. Метод интерпретации экспериментальных данных

В работе [57] предложен и затем в работах [21, 59, 60] развит метод восстановления профилей напряжения и деформации на основе экспериментальных профилей скорости свободной границы, $u_{fs}(t)$, в образцах разной толщины. Методика при этом основывается на восстановлении функции скорости свободной поверхности от двух переменных, $u_{fs}(t, h)$, — времени t и лагранжевой координаты h . Каждый профиль скорости свободной поверхности суть зависимость $u_{fs}(t)$ при данной толщине h пленки железа. Для перехода от скорости свободной поверхности к массовой скорости u (т. е. скорости лагранжевых частиц) используется соотношение $u_{fs} = 2u$. Соотношение справедливо в приближении линейной акустики, пока давление намного меньше объемного модуля сжатия материала (170 ГПа в железе). В результате получается набор профилей, измеренных с высоким разрешением по времени, но для нескольких толщин образцов (например, для двух толщин [21]). Мы обладаем информацией о временной зависимости скорости свободной поверхности для пяти различных толщин пленок, которые будут использоваться для построения модели.

Для расчета продольного напряжения σ и деформации $\mu \equiv 1 - V/V_0$ требуется интегрировать уравне-

ния движения вещества в некоторой ограниченной области экспериментальных данных:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial h}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial h} = -\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (3)$$

Для определения напряжения в момент (t_1, h_1) необходимо проинтегрировать по h производную $\partial u / \partial t$ от граничной точки h_b :

$$\sigma(t_1, h_1) - \sigma(t_1, h_b) = -\rho_0 \int_{h_b}^{h_1} \frac{\partial u}{\partial t}(h, t_1) dh. \quad (4)$$

Для вычисления деформации в момент (t_1, h_1) интегрируется по времени частная производная $\partial u / \partial h$ по переменной t от граничной точки t_b :

$$\mu(t_1, h_1) - \mu(t_b, h_1) = -\int_{t_b}^{t_1} \frac{\partial u}{\partial h}(h_1, t) dt. \quad (5)$$

Интегрирование проводится от границы $t_b(h)$ или $h_b(t)$, где $\sigma = 0$ и $\mu = 0$ — это состояния до прихода УВ. А вторая точка выбирается на профиле — t_1 или h_1 . Задание граничных условий дает представление об области определения, где функция $u(h, t)$ принимает ненулевые значения. При этом мы обладаем лишь конечным набором экспериментальных профилей для весьма ограниченного набора пленок (пять различных толщин), но с относительно высоким разрешением по времени $\Delta t \approx 1$ пс.

3.3. Методика интегрирования кинематических соотношений

Мы используем упрощенную форму аппроксимации скорости, отбрасывая квадратичный член в отличие от работы [59]:

$$u(h, t) = \frac{u_i(h)[t_{i+1}(h) - t] - u_{i+1}(h)[t - t_i(h)]}{t_{i+1}(h) - t_i(h)}, \quad (6)$$

где $t_i(h) < t < t_{i+1}(h)$. В уравнении (6) $t_i(h)$ и $u_i(h)$ — функции от h , которые определяются соответственно кусочно-линейной интерполяцией и кубическим сплайном на экспериментальных профилях. Нижние индексы « i » соответствуют разным опорным точкам, выбранным на каждом профиле $u_{fs}(t)$ вручную. Точки соединяются между собой кусочно-линейной функцией. Моменты времени выбираются возрастающими, $t_i(h) > t_{i-1}(h)$, с индексом « i ». Функция $h_i(t)$ обозначает обратную функцию $t_i(h)$.

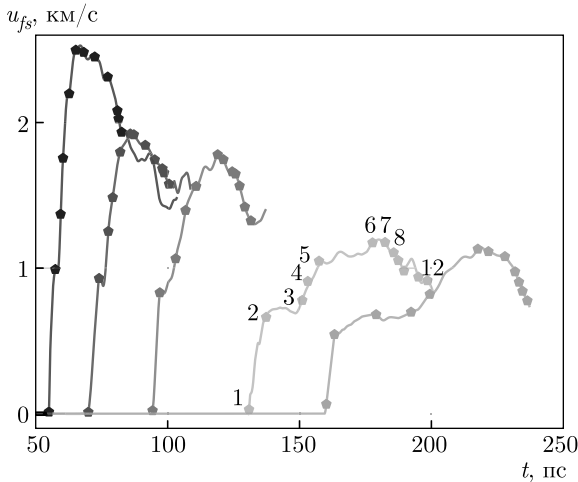


Рис. 4. (В цвете онлайн) Профили скорости свободной поверхности для пленок толщиной 480, 580, 740, 970 и 1160 нм (слева-направо). На каждом профиле выбрано по 12 характерных точек для аппроксимации экспериментальных зависимостей при обратном анализе серии профилей

Ошибки метода являются его важной характеристикой из-за малого количества профилей для разных h и свободы выбора опорных точек на профиле, поэтому изучаются, например, в работе [59], где указывается, что ошибка метода достигает своего максимума для наименьшей и наибольшей толщин пленок. В данной работе частные производные в уравнениях (4) и (5) аппроксимируются конечными разностями, а интегрирование проводится численно в отличие от, например, работ [57, 59], где расчет ведется с аналитически заданной кусочной функцией $u(h, t)$, первообразные которой вычисляются заранее для каждого отдельного участка интегрирования. Для внутренних точек применяется центральная разность

$$\frac{u(h + \Delta h, t) - u(h - \Delta h, t)}{2\Delta h}.$$

Для точек возле границы области определения производная

$$\frac{\partial u}{\partial h} \approx \frac{\Delta u}{\Delta h} \quad (7)$$

аппроксимируется направленной конечной разностью, кроме случая с наименьшей толщиной пленки,

$$\frac{u(h_s, t) - u(h_s - \Delta h, t)}{\Delta h},$$

$$\frac{u(h_l + \Delta h, t) - u(h_l, t)}{\Delta h},$$

где h_s и h_l принадлежат границе расчетной области, $\Delta h = (h_l - h_s)/N$, $N = 300$ — число, подобран-

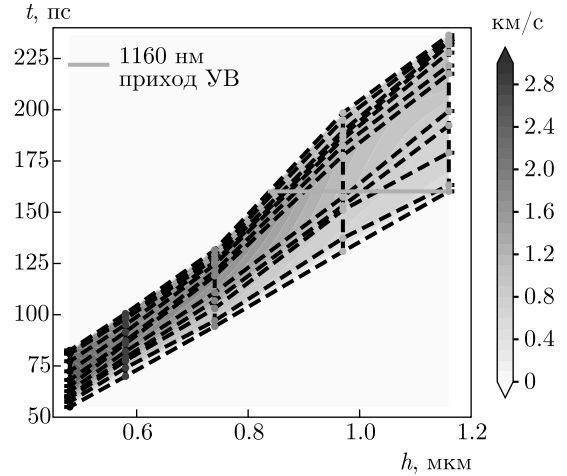


Рис. 5. (В цвете онлайн) Функции $t_i(h)$ заданы в виде кусочно-линейной интерполяции и построены по опорным точкам с рис. 4. Раскраска соответствует значениям скорости свободной границы $u_{fs}(h, t)$. Кружки показывают положение опорных точек, а их цвет соответствует кривым на рис. 4

ное для достижения сходимости при интегрировании. Одна из особенностей методов интегрирования системы уравнений (2) и (3) кинематических соотношений, в отличие от классических подходов (регистрируются время прихода волны, скачок массовой скорости при известной толщине образца), состоит в том, что диаграммы напряжений и деформации зависят лишь от относительного расположения на временной оси профилей скорости свободной поверхности в образцах разной толщины. Другими словами, диаграмма напряжения деформации инвариантна по отношению к смещениям времени прихода волны во всех экспериментах или к увеличению всех толщин пленок на одинаковую величину. В случае пленки с наименьшей толщиной предлагается использовать абсолютное время прихода волны и величину скорости свободной поверхности на упругом предвестнике (точка 2 на рис. 4 для профиля пленки $h = 480$ нм). При этом используется предположение, что волна движется со средней постоянной скоростью $U_{s1} = h_1/t_2(h_1)$, где $t_2(h_1)$ — время, соответствующее точке 2 на профиле для самой тонкой пленки $h_1 = 480$ нм. В результате можно оценить производную из выражения (7):

$$\frac{\partial u}{\partial h} \approx \frac{\partial u}{\partial t} U_{s1}^{-1}. \quad (8)$$

Аналогичным образом рассчитываются выражения для частной производной по времени:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{\Delta u}{\Delta t}. \tag{9}$$

Шаг по времени $\Delta t(h) = [t_l(h) - t_s(h)]/N$, где задана разность между первой $t_s(h)$ и последней $t_l(h)$ опорными точками на профиле $u_{fs}(t)$ для данной толщины, т.е. шаг зависит от h . Вследствие интегрирования по толщине h в выражении (4), необходимо определить и зависимость от нее, как показано на рис. 5.

3.4. Достоверность методики из сравнения с численным моделированием

Проводится сравнение σ - V/V_0 -диаграмм с целью обоснования достоверности предложенной методики. В одном случае напряжения и плотности извлекаются напрямую из моделирования методом молекулярной динамики (МД), который используется в качестве источника полной информации о механическом и термодинамическом состояниях группы лагранжевых координат (в качестве которых взято начальное положение частиц) при $h = 150, 160, 200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550, 600$ нм. В другом случае напряжения и деформации рассчитываются лишь на основании информации о временных зависимостях скорости всех лагранжевых частиц, которые изображены на рис. 6. При этом интегрирование законов сохранения основано на двумерной интерполяции временных зависимостей скорости этих частиц (рис. 7).

Начальная стадия процесса моделируется с помощью 2Т-гидродинамики. При воздействии коротких лазерных импульсов температура электронов, поглощающих лазерное излучение, может значительно превосходить температуру ионной подсистемы. С помощью гидродинамического моделирования проводится полный расчет поглощения лазерного импульса, сопряженного с процессами электрон-ионной релаксации и теплопроводности. На временах, больших по сравнению с временами электрон-электронной и ион-ионной релаксации, электронная и ионная подсистемы обладают своими квазиравновесными температурами T_e и T_i [3]. При этом время 2Т-стадии, в течение которого $T_e \gg T_i$ и которое определяется темпом электрон-ионной релаксации, благодаря большому различию масс электронов и ионов может быть существенно больше. При достаточно большой энергии лазерного импульса движение вещества становится заметным уже на

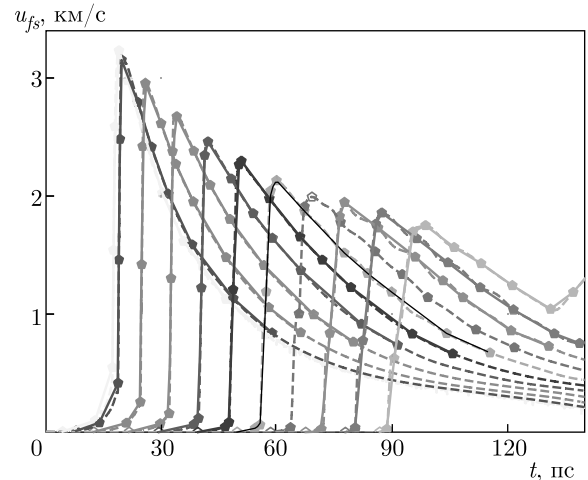


Рис. 6. (В цвете онлайн) История удвоенной скорости лагранжевых частиц из МД-моделирования с начальными положениями 150, 160, 200, ..., 600 нм (кривые слева направо). Точки соединяются кусочно-линейной функцией, которая используется при аппроксимации функции $u(h, t)$ и изображена сплошными линиями. Штриховые линии построены на основе исходных данных МД-моделирования

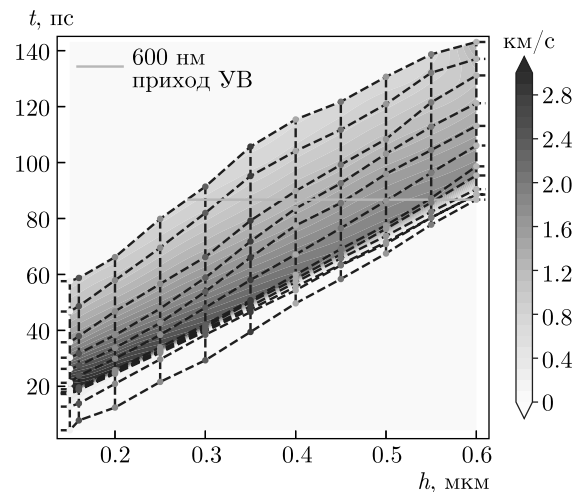


Рис. 7. (В цвете онлайн) Функции $t_i(h)$ заданы в виде кусочно-линейной интерполяции и построены по опорным точкам с рис. 6. Раскраска в соответствии со значением скорости свободной границы $u_{fs}(h, t)$. Кружки показывают положение опорных точек, а их цвет соответствует цвету кривых на рис. 6

2Т-стадии, что делает необходимым рассматривать тепловую задачу совместно с уравнениями движения в рамках единой 2Т-гидродинамики [64]. Система уравнений 2Т-гидродинамики имеет вид [65, 66]

$$\frac{\partial x(x^0, t)}{\partial t} = u(x^0, t), \quad \frac{\rho \partial x(x^0, t)}{\partial x^0} = \rho_0,$$

$$\frac{\partial u(x^0, t)}{\partial t} = -\frac{\partial P(x^0, t)}{\rho^0 \partial x^0}, \quad P = P_e + P_i,$$

$$\frac{\partial E_e(x^0, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\rho^0 \partial x^0} \left(\frac{\kappa_e \rho}{\rho^0} \frac{\partial T_e}{\partial x^0} \right) - Q_{ei} + \frac{Q(x^0, t)}{\rho} - P_e \frac{\partial u}{\rho^0 \partial x^0},$$

$$\frac{\partial E_i(x^0, t)}{\partial t} = Q_{ei} - P_i \frac{\partial u}{\rho^0 \partial x^0},$$

$$Q_{ei} = \alpha(T_e - T_i),$$

где E_e , E_i , α — удельные (на единицу массы) электронная и ионная энергии и коэффициент электрон-ионного теплообмена, κ_e — коэффициент электронной теплопроводности. При постоянной начальной плотности ρ^0 в качестве лагранжевой переменной можно использовать начальную координату x^0 . Система замыкается уравнениями состояния (УРС) вещества и материальными моделями коэффициентов теплопроводности и электрон-ионного теплообмена. Ионная (фононная) теплопроводность отсутствует, так как пренебрежимо мала по сравнению с электронной. Облучаемая мишень состоит из железа и стекла, на которое оно нанесено. Поскольку они имеют существенно разные плотности, в лагранжевом описании надо задать или начальную длину ячеек в стекле больше (обратно пропорционально отношению плотностей стекла и железа), или различную массу в ячейках (пропорционально начальной плотности). Был использован второй подход, дающий более точное описание движения в стекле.

Картина возникающей при этом волны сжатия характеризуется наличием слоя прогрева, связанного с теплопроводностью, с одной стороны, и опережающей УВ, с другой. УВ опережает волну теплопроводности на глубине 500 нм. Мы же извлекаем профиль скорости лагранжевой частицы как функцию времени, используя в МД-расчете этот профиль при воздействии на образец железа подвижным потенциальным барьером с такой же зависимостью скорости от времени. Таким образом имитируется воздействие лазерной УВ, проникающей внутрь пленки железа.

Для описания ионной подсистемы (без вклада электронной подсистемы) железа (P_i , E_i) использовалось табулированное широкодиапазонное УРС для α -железа в твердом состоянии, составленное Хищенко на основе работ [67–69].

Для электронной подсистемы железа (УРС, коэффициент теплопроводности, коэффициент элект-

рон-ионного теплообмена) использовались аналитические формулы, полученные из анализа результатов расчетов методами теории функционала плотности (DFT) с помощью пакета VASP. Использовались аналитические формулы построенные Петровым для переходных металлов [70].

В стекле свободные электроны отсутствуют, $P_e = 0$, $E_e = 0$, т.е. применяется однотемпературная гидродинамика. Используется калорическое УРС (типа Ми–Грюнайзена), предоставленное Хищенко. Начальная плотность в стекле при этом $\rho_0 = \rho_{0, glass} = 2.2 \text{ г/см}^3$.

За время действия лазерного импульса смещение вещества очень мало. Тепловой источник Q , описывающий поглощение лазерного излучения в железе с $x^0 > 0$, можно взять в простейшем виде с замороженным в вещество (зависящим только от x^0) пространственным профилем:

$$Q(x^0 > 0, t) = \frac{F_{abs}}{\sqrt{\pi} d_{skin} \tau} \times \exp \left[-\frac{x^0}{d_{skin}} - \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \right]. \quad (10)$$

Здесь для железа F_{abs} — поглощенный флюенс, d_{skin} — толщина скин-слоя (глубина поглощения), τ — длительность импульса. Время t отсчитывается от максимума импульса.

Величина поглощенного тепла рассчитывалась на основе экспериментальных данных и качественно-эмпирических соотношений. Количественная оценка плотности поглощенной энергии от падающей энергии F_0 определяется коэффициентом поглощения в железе [71] и равна 1.1 мДж/см^2 . Затем энергия делится между пластинкой железа и стеклом. В предположении, что на границе железа и стекла произошел пробой и горячие электроны из металла передали часть тепла в стекло, доли поглощенной энергии в металле и в стекле определяются на основе наилучшего совпадения расчетного и экспериментального профилей скорости свободной поверхности в пленке железа толщиной 160 нм. В расчете было взято $F_{abs} = 400 \text{ мДж/см}^2$, $d_{skin} = 15 \text{ нм}$, $\tau = 0.5 \text{ пс}$.

Нагрев стекла с $x^0 < 0$ моделировался тепловым источником Q в виде

$$Q(x^0 < 0, t) = \frac{F_{glass}}{\sqrt{\pi} d_{glass} \tau} \times \exp \left[\frac{x^0}{d_{glass}} - \left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \right], \quad (11)$$

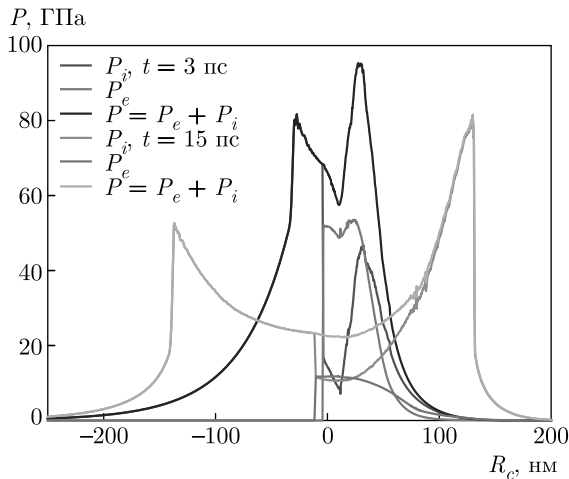


Рис. 8. (В цвете онлайн) Профили давления вблизи границы железо–стекло в моменты времени 3 и 15 пс в зависимости от расстояния R_c от этой границы. Для железа показаны ионное P_i , электронное P_e и полное $P = P_i + P_e$ давление. В стекле существует только полное давление $P = P_i$, электронный вклад отсутствует

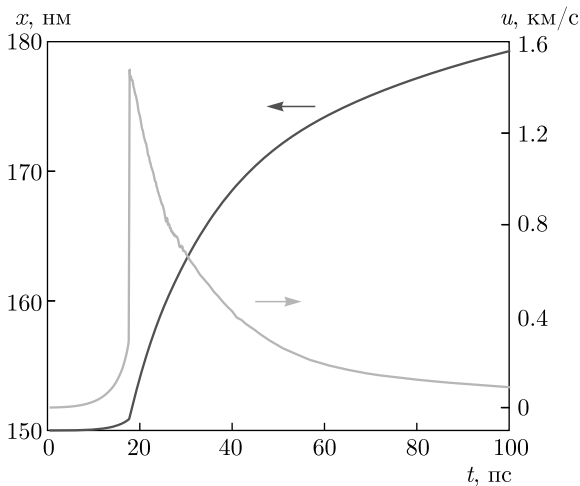


Рис. 9. (В цвете онлайн) Координата x и скорость u лагранжевого узла с начальной координатой $x = 150$ нм

где $F_{glass} = 700$ мДж/см² — поглощенный флюенс, $d_{glass} = 50$ нм — толщина скин-слоя.

На рис. 8 для примера приведен характерный вид профилей давления в конце 2Т-стадии (3 пс) и в момент времени, когда вклад электронной составляющей убывает (15 пс).

В МД-моделировании расчет использует информацию о скорости лагранжевого узла на глубине 150 нм, полученной в гидродинамическом 2Т-моделировании поглощения лазерного импульса тонкой пленкой на стеклянной подложке. На рис. 9 показан ход положения и скорости этого узла во времени.

МД-моделирование проводится в образце размерами $600 \times 60 \times 10$ нм³ и состоит из периодически повторяемой поликристаллической структуры размерами $60 \times 60 \times 10$ нм³, размноженной 10 раз вдоль оси распространения ультракороткого импульса. На левой границе на образец в начальный момент времени начинает действовать потенциальный барьер, движущийся по закону, повторяющему историю движения частицы в расчете 2Т-гидродинамики. Результаты МД-моделирования были обработаны для извлечения истории эволюции группы лагранжевых частиц. Лагранжевы частицы представляют собой срезы шириной 0.25 нм одномерных профилей вдоль оси распространения волны.

Аппроксимация функции $u(h, t)$ показана выше на рис. 7 с выделением узловых точек и градациями серого соответственно значениям скорости свободной поверхности. Метод воспроизводит напряжения и деформации, наблюдаемые в расчете методом МД. На рис. 10а изображены ударные адиабаты упругой и пластической α -фазы, адиабата ϵ -фазы и расчетная адиабата ϵ -фазы для использованного МД-потенциала. На рис. 10б показаны временные зависимости продольного напряжения для различных лагранжевых частиц. Последний момент времени, для которого историю напряжения можно восстановить, ограничен моментом прихода УВ в лагранжеву частицу с наибольшей начальной координатой.

На рис. 10в приведены карты распределений локальных параметров порядка атомов Q_4 и Q_6 , предложенные в работах [72, 73]. Для визуализации атомной структуры в МД можно было использовать лишь параметр центральной симметрии [74]. Однако существует проблема в определении различных кристаллических структур, что связано с увеличивающимися флуктуациями потенциальной энергии атомов с ростом температуры. Преимуществом этого метода определения кристаллической структуры [71, 72] является слабая зависимость от температуры и независимость от плотности в совокупности с малой вычислительной сложностью.

Для выделенного атома функции Q_{lm} в сферической системе координат зависят только от углов, характеризующих радиус-вектор $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ между парой атомов. Среднее по соседним атомам окружения выделенного атома рассчитывается следующим образом:

$$\bar{Q}_{lm}(i) = \langle Y_{lm}(\theta(\mathbf{r}_{ij}), \phi(\mathbf{r}_{ij})) \rangle, \quad (12)$$

$$Q_l^2 = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |\bar{Q}_{lm}|^2, \quad (13)$$

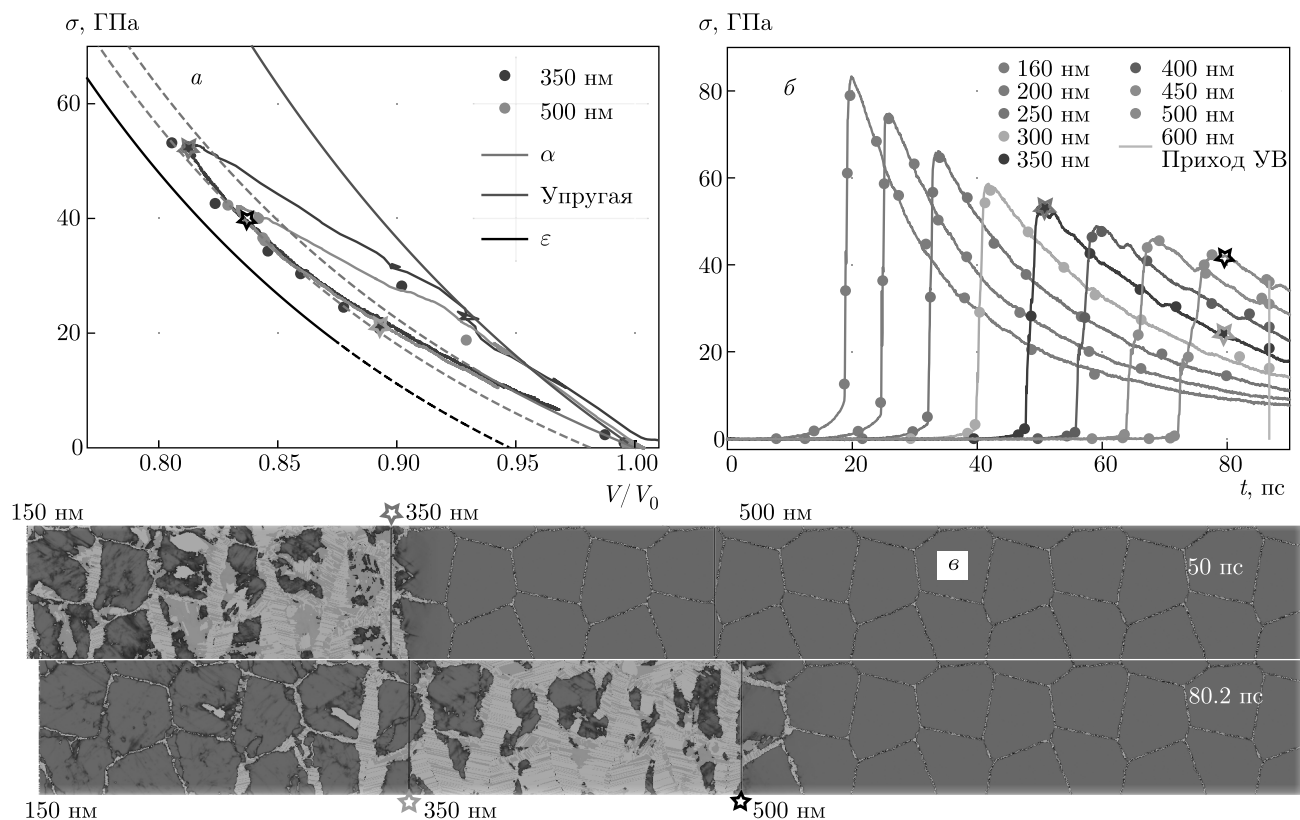


Рис. 10. (В цвете онлайн) *а)* Расчет фазовой кривой $\sigma - V/V_0$ на основе кинематических соотношений из МД-моделирования для пленок толщиной 350 и 500 нм. Восстановленные точки методом обратного анализа располагаются вблизи сплошных линий того же цвета, что соответствует расчетам методом МД. Ударные адиабаты различных фаз железа показаны сплошными (в стабильной фазе) и штриховыми (в метастабильной фазе) линиями. Адиабата ε -фазы железа в МД-моделировании показана штриховой серой линией. *б)* Восстановленные временные профили напряжения для лагранжевых частиц с различными начальными координатами. *в)* Карты распределения параметров симметрии [74]. Синий, красный и зеленый цвета соответствуют α -, γ - и ε -фазам железа. Звездочки показывают положение лагранжевых частиц с координатами 350 и 500 нм в моменты времени 50 и 80.2 пс. Левый край образца контролируется движением лагранжевой частицы с координатой 150 нм, взятой из гидродинамического моделирования (см. разд. 2.4)

где Y_{lm} — сферические гармоники, θ и ϕ — полярный и азимутальный углы сферической системы координат для вектора \mathbf{r}_{ij} . Усреднение проводится по соседним атомам, которые являются соседями в локальной диаграмме Вороного. Локальный параметр порядка инвариантен по отношению к ориентации системы координат и преобразований вращения системы атомов, которым и является квадрат Q_l в уравнении (13). Более того, параметры порядка, для которых $l = 4$ и $l = 6$, различают тип кристаллической решетки и при высоких температурах [75].

Координата в плоскости Q_4 – Q_6 определяет раскраску кристаллических фаз железа на рис. 10в, в том числе при температурах, таких что области возможных значений параметров Q_4 и Q_6 для разных типов кристаллических решеток могут пере-

крываться. ОЦК-фаза характеризуется значениями

$$Q_4^{bcc} = 0.03636965, \quad Q_6^{bcc} = 0.5106882$$

для идеального кристалла, ГПУ-фаза —

$$Q_4^{hcp} = 0.09722222, \quad Q_6^{hcp} = 0.4847617,$$

а ГЦК-фаза —

$$Q_4^{fcc} = 0.1909407, \quad Q_6^{fcc} = 0.5745243.$$

Близость ГЦК- и ГПУ-структур затрудняет их различие, однако сосуществование как ε -, так и γ -фаз железа экспериментально наблюдалось при коротких лазерных воздействиях [76]. Для различия фаз на плоскости в координатах Q_4 и Q_6 выделены границы значений для каждой фазы, а также условие

для значения параметра центральной симметрии C_S [74]. Проверка по условию $C_S < 2.5$ позволяет определить, что данное вещество является либо кристаллом, либо жидкой фазой. Кубические и гексагональные решетки разграничены пороговым значением параметра центральной симметрии $C_S > 4.9$. Если решетка кубическая, то при $Q_4 > Q_4^{hcp}$ пиксель на карте раскрашивается согласно ГЦК, а в противном случае — ОЦК.

3.5. Расчеты из кинематических соотношений

Применим описанную методику к расчетам диаграмм $\sigma-V/V_0$ с использованием экспериментальных данных для скорости свободной поверхности $u_{fs}(t)$. Первым шагом является аппроксимация функции $u_{fs}(h, t)$. Опорные точки целесообразно выбирать соответствующими физически одинаковым изломам на графиках профилей скорости для разных значений h , что вносит предположение о наличии одинакового числа таких особенностей на графиках. Хотя при отсутствии, например, явно выраженного упругого предвестника можно внести большее число точек в аппроксимацию фронта пластической волны.

Выше на рис. 4 показан выбор набора точек — по 12 штук с каждого профиля, всего 5 профилей. В результате получены упрощенные профили, где соседние точки соединены прямыми линиями. На каждом профиле первая точка 1 относится к приходу волны, 2–3–4–5–6–7 — участок подъема до максимальной амплитуды, причем точки выбирались на изломах профилей, а точки 8–9–10–11–12 соответствуют убывающей части. Двенадцать функций $u_i(h)$ и $t_i(h)$ для каждого набора из пяти точек задают функцию двух переменных, которая показана выше на рис. 5, где штриховыми линиями выделены кусочно-линейные функции $t_i(h)$. Выбор точек на схожих особенностях профилей позволяет получать более гладкие зависимости $u_i(h)$ и $t_i(h)$.

На рис. 11 представлены результаты расчета диаграмм напряжения и деформации для профилей пленок толщиной 480, 580, 740 и 970 нм. Для расчета проводится численное интегрирование выражений (4) и (5) с использованием граничного условия для функции $u(h, t_1(h)) = 0$ вдоль границы до прихода волны. Другими словами, нижние пределы интегрирования по переменным h или t для данных $t_1(h)$ или $h_1(t)$ соответствуют точкам на нижней штриховой кривой на рис. 5. В нашей работе в аппроксимации функции $u(h, t)$ отсутствует явный учет раз-

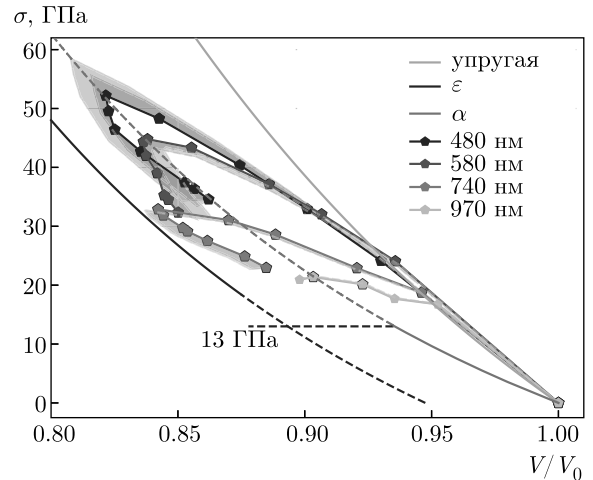


Рис. 11. (В цвете онлайн) Расчет фазовой кривой методом обратного анализа кинематических данных показан точками, соединенными сплошными линиями. Точки соответствуют набору опорных точек с рис. 4. Ударные адиабаты различных фаз железа показаны сплошными (в стабильной фазе) и штриховыми (в метастабильной фазе) линиями. Области отклонения траекторий состояний лагранжевых частиц от соответствующих траекторий по исходным экспериментальным данным показаны градиациями цветов между соответствующими траекториями. Отклонения основаны на варьировании толщин пленок 480 и 580 нм с корректировкой времени прихода УВ в пленки с проварьированной толщиной. Значение давления прямого фазового превращения $\alpha \rightarrow \epsilon$ на субмикросекундном масштабе отмечено черной штриховой прямой

рывов, в отличие от работы [59]. Все точки соединены кусочно-линейной интерполяцией. Численное интегрирование функций (4) и (5) проводится с использованием библиотеки Quadpack [77]. Процедура расчета реализована в виде интерактивных скриптов на языке Python в среде Jupyter [78]. Поиск напряжения и деформации проводится лишь в области интерполяции, поэтому мы ограничены моментом прихода упругой волны для профиля наибольшей толщины. Данный момент времени отмечен горизонтальной желтой сплошной прямой на рис. 5. При расчете диаграммы $\sigma-V/V_0$ последний момент времени равен приблизительно 160 пс. Поэтому, в частности, профиль скорости свободной поверхности в пленке толщиной 970 нм рассчитан лишь частично.

Таким образом, на рис. 11 представлена диаграмма $\sigma-V/V_0$ лагранжевых частиц для пленок толщиной 480, 580, 740 и 970 нм. Ударная адиабата упругой УВ построена по точкам с номером 2 на профилях с рис. 4. Для первого профиля скорость УВ

оценивается из ширины пленки и времени прихода, а для остальных пленок — по отношению разницы толщин пленок к разнице времен для точек с номером 2 текущего и предыдущего профилей с меньшей толщиной. Ударные адиабаты заданы линейной зависимостью скорости ударной волны от скорости вещества за фронтом ($c_a + s_a u$) и начальной плотностью ρ_0 . Для упругой ударной адиабаты величина $c_a = 6$ км/с полагалась равной скорости звука из работы [20]. Параметр $s_a = 1.148$ рассчитан методом наименьших квадратов. Пластические ударные адиабаты основаны на экспериментальных данных [41] со следующим набором параметров для α -фазы:

$$c_a^\alpha, s_a^\alpha, \rho_0^\alpha = 4.63 \text{ км/с}, 1.33, 7.874 \text{ кг/м}^3,$$

а для ε -фазы:

$$c_a^\varepsilon, s_a^\varepsilon, \rho_0^\varepsilon = 4.83 \text{ км/с}, 1.33, 8.31 \text{ кг/м}^3.$$

Давление 13 ГПа отмечает границу существования стабильной α -фазы железа. На рис. 11 сплошной линией показана стабильная часть ударной адиабаты ε -фазы при высоких давлениях, а штриховой — метастабильная фаза. Результаты расчетов исследуются на предмет влияния варьирования толщины пленки и соответствующего времени прихода УВ.

На рис. 11 представлены два варианта варьирования, которые изображаются градациями цветов соответствующих траекторий лагранжевых частиц в области возможных значений и ограничены серыми штриховыми линиями. В первом варианте толщина пленки увеличена от 580 до 600 нм и соответствующее время прихода УВ запаздывает на 2.3 пс (более насыщенный цвет); во втором — помимо варьирования толщины пленки 580 нм, была уменьшена до 460 нм толщина пленки 480 нм с учетом более раннего прихода волны на 2.3 пс (серые штрихи). Как варьирование, так и расчеты по исходным данным приводят к качественно одинаковым результатам.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Переход $\alpha \rightarrow \varepsilon$ может происходить в области за пиком давления в волне разгрузки, что наблюдается частично для пленок толщиной 480, 580 и 740 нм при использовании метода обратного анализа (см. рис. 11).

В пленке толщиной 480 нм пик давления наблюдается в пластической волне в α -фазе железа.

За пиком следует волна разгрузки, хотя давления остаются достаточно высокими (более 30 ГПа), заметен частичный переход в ε -фазу и возвращение на метастабильную ветку α -фазы. Явление необычно, так как давление обратного перехода снижается до 10 ГПа (в сравнении с 13 ГПа в прямом переходе) при разгрузке из состояния ударного сжатия при 23 ГПа [79] либо 13 ГПа [41] при гидростатическом изотермическом сжатии [49]. Разброс значений напряжений и деформации, связанный с варьированием времени прихода и толщины пленки по принципу увеличения или уменьшения толщины пленки на ± 20 нм с соответствующим изменением времени прихода волны (± 2.3 пс), слабо влияет на фазовый состав в пике давления и на разгрузке.

В пленке толщиной 580 нм наблюдается схожая начальная картина — давление достигает своего максимума на ударной адиабате α -фазы. Затем при разгрузке происходит частичное превращение в ε -фазу. Возможный разброс данных при изменении толщин пленок и времен прихода УВ показывает как возможность продолжения процесса превращения в ε -фазу, так и возврат к α -фазе.

В пленке толщиной 740 нм максимум давления достигается вблизи ε -фазы, а разгрузка приводит к постепенному переходу обратно в α -фазу железа. В пленке толщиной 970 нм записанная история ограничена приходом УВ в пленку толщиной 1160 нм, что связано с ограниченностью области интерполяции напряжений по экспериментальным данным первым измерением скорости свободной поверхности для пленки железа наибольшей толщины.

Аналогичный обратный анализ профилей в работе [21] позволяет изучать переход $\alpha \rightarrow \varepsilon$, который наблюдается за фронтом УВ в сжатом веществе при высокой скорости деформации. Отличие настоящей работы от [21] состоит в том, что за УВ следует волна разрежения, что способствует более медленному фазовому переходу вплоть до остановки и обратного превращения $\varepsilon \rightarrow \alpha$, что наблюдается для пленок толщиной 480 и 740 нм (см. рис. 11). Качественное поведение воспроизводится при гибридном математическом моделировании, что дает представление о неоднородности и сосуществовании различных фаз железа в волнах сжатия и разрежения.

Благодарности. Авторы благодарят К. В. Хищенко за предоставленные уравнения состояния железа и стекла и Ю. В. Петрова за аналитические формулы расчета электронных свойств в переходных металлах.

Финансирование. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (авторы С. И. А., Е. В. С. и П. С. К. — Госзадание ОИВТ № 075-00892-20-00; авторы В. А. Х. и Н. А. И. — Госзадание ИТФ № 00029-2019-0003).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Анисимов, А. М. Прохоров, В. Е. Фортов, Изв. АН СССР, серия физ. **46**, 1081 (1982).
2. С. И. Анисимов, А. М. Прохоров, В. Е. Фортов, УФН **142**, 395 (1984).
3. С. И. Анисимов, Б. Л. Капелиович, Т. Л. Перельман, ЖЭТФ **66**, 776 (1974).
4. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, С. И. Ашитков и др., ЖЭТФ **134**, 5 (2008).
5. N. A. Inogamov, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, and V. V. Zhakhovsky, Opt. Quant. Electron. **52**, 63 (2020).
6. В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, Письма в ЖЭТФ **92**, 574 (2010).
7. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров и др., Письма в ЖЭТФ **69**, 284 (1999).
8. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., Письма в ЖЭТФ **77**, 606 (2003).
9. R. Fabbro, J. Fournier, P. Ballard et al., J. Appl. Phys. **68**, 775 (1990).
10. Н. А. Иногамов, В. А. Хохлов, В. В. Жаховский, Письма в ЖЭТФ **108**, 439 (2018).
11. Yu. V. Petrov, N. A. Inogamov, V. V. Zhakhovsky, and V. A. Khokhlov, Contrib. Plasma Phys. **59**, e201800180 (2019).
12. C. A. Bolme, S. D. McGrane, D. S. Moore, and D. J. Funk, J. Appl. Phys. **102**, 033513 (2007).
13. Michael R. Armstrong, Jonathan C. Crowhurst, Sorin Bastea, and Joseph M. Zaug, J. Appl. Phys. **108**, 023511 (2010).
14. С. И. Ашитков, М.Б. Агранат, Г. И. Канель и др., Письма в ЖЭТФ **92**, 568 (2010).
15. V. H. Whitley, S. D. McGrane, D. E. Eakins et al., J. Appl. Phys. **109**, 013505 (2011).
16. Jonathan C. Crowhurst, Michael R. Armstrong, Kimberly B. Knight et al., Phys. Rev. Lett. **107** 144302 (2011).
17. R. F. Smith, J. H. Eggert, R. E. Rudd et al., J. Appl. Phys. **110**, 123515 (2011).
18. Gennady I. Kanel, AIP Conf. Proc. **1426**, 939 (2012).
19. S. I. Ashitkov, M. B. Agranat, G. I. Kanel, and V. E. Fortov, AIP Conf. Proc. **1426**, 1081 (2012).
20. С. И. Ашитков, П. С. Комаров, М. Б. Агранат и др., Письма в ЖЭТФ **98**, 439 (2013).
21. Jonathan C. Crowhurst, Bryan W. Reed, Michael R. Armstrong et al., J. Appl. Phys. **115**, 113506 (2014).
22. С. И. Ашитков, П. С. Комаров, Е. В. Струлева и др., Письма в ЖЭТФ **101**, 294 (2015).
23. Vasily V. Zhakhovsky, Mikalai M. Budzevich, Nail A. Inogamov et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 135502 (2011).
24. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, В. В. Шепелев, Письма в ЖЭТФ **93**, 226 (2011).
25. Brian J. Demaske, Vasily V. Zhakhovsky, Nail A. Inogamov, and Ivan I. Oleynik. Phys. Rev. B **87**, 054109 (2013).
26. Vasily V. Zhakhovsky, Nail A. Inogamov, Brian J. Demaske et al., J. Phys. Conf. Ser. **500**, 172007 (2014).
27. R. Perriot, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov, and I. I. Oleynik, J. Phys. Conf. Ser. **500**, 172008 (2014).
28. K. Khishchenko and A. Mayer, Int. J. Mech. Sci. **189**, 105971 (2020).
29. R. Evans, A. D. Badger, F. Fallies et al., Phys. Rev. Lett. **77**, 3359 (1996).
30. K. T. Gahagan, D. S. Moore, D. J. Funk et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 3205 (2000).
31. David J. Funk, D. S. Moore, K. T. Gahagan et al., Phys. Rev. B **64**, 115114 (2001).
32. K. T. Gahagan, D. S. Moore, D. J. Funk et al., J. Appl. Phys. **92**, 3679 (2002).
33. Tomokazu Sano, Takayuki Eimura, Ryota Kashiwabara et al., J. Laser App. **29**, 012005 (2017).
34. Terumasa Kawashima, Tomokazu Sano, Akio Hirose et al., J. Mater. Proc. Technol. **262**, 111 (2018).
35. Uros Trdan, Tomokazu Sano, Damjan Klobcar et al., Corrosion Sci. **143**, 46 (2018).
36. Jake D. G. Greener, Elton de Lima Savi, Andrey V. Akimov et al., ACS Nano **13**, 11530 (2019).
37. Y. Wang, D. H. Hurley, Z. Hua et al., Nature Comm. **11**, 1597 (2020).

38. Е. И. Уразаков, Л. А. Фальковский, ЖЭТФ **63**, 2297 (1973).
39. В. В. Косачев, Ю. Н. Лохов, В. Н. Чуков, ЖЭТФ **94**, 162 (1988).
40. Y. Sugawara, O. B. Wright, O. Matsuda et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 185504 (2002).
41. S. I. Ashitkov, V. V. Zhakhovsky, N. A. Inogamov et al., AIP Conf. Proc. **1793**, 100035 (2017).
42. V. V. Zhakhovsky, K. P. Migdal, N. A. Inogamov, and S. I. Anisimov, AIP Conf. Proc. **1793**, 070003 (2017).
43. Г. И. Канель, В. Е. Фортов, С. В. Разоренов, УФН **177**, 809 (2007).
44. Г. И. Канель, Е. Б. Зарецкий, С. В. Разоренов и др., УФН **187**, 525 (2017).
45. Г. И. Канель, С. В. Разоренов, Г. В. Гаркушин и др., ФТТ, **56**, 1518 (2014).
46. Л. В. Альтшулер, УФН **165**, 199 (1965).
47. G. I. Kerley, Report SAND93-0027, Sandia National Laboratories, Albuquerque (1993).
48. D. Bancroft, E. L. Peterson, and S. Minshall, J. Appl. Phys. **27**, 291 (1956).
49. L. M. Barker and R. E. Hollenbach, J. Appl. Phys. **45**, 4872 (1974).
50. G. E. Duvall and R. A. Graham, Rev. Mod. Phys. **49**, 523 (1977).
51. А. В. Ананьин, А. Н. Дремин, Г. И. Канель, ФГВ **3**, 93 (1981).
52. В. Д. Глузман, Г. И. Канель, В. Ф. Лоскутов и др., Проблемы прочности **8**, 52 (1985).
53. S. A. Dyachkov, D. K. Ilnitsky, A. N. Parshikov, and V. V. Zhakhovsky, J. Phys. Conf. Ser. **1556**, 012032 (2020).
54. J. P. Geindre, P. Audebert, S. Rebibo, and J. C. Gauthier, Opt. Lett. **26** 1612 (2001).
55. S. Ogata, J. Li, N. Hirotsuki, Y. Shibutani, and S. Yip, Phys. Rev. B **70**, 104104 (2004).
56. D. M. Clatterbuck, D. C. Chrzan, and J. W. Morris, Acta Materialia **51**, 2271 (2003).
57. John B. Aidun and Y. M. Gupta, J. Appl. Phys. **69**, 6998 (1991).
58. Jonathan C. Boettger and Duane C. Wallace, Phys. Rev. B **55**, 2840 (1997).
59. Bryan W. Reed, James S. Stolken, Roger W. Minich, and Mukul Kumar. J. Appl. Phys. **110**, 113505 (2011).
60. Bryan W. Reed, J. Reed Patterson, Damian C. Swift et al., J. Appl. Phys. **110**, 113506 (2011).
61. T. Q. Qiu and C. L. Tien, J. Heat Transfer. **115**, 835 (1993).
62. Vasily V. Temnov, Klaus Sokolowski-Tinten, Ping Zhou, and Dietrich von der Linde, J. Opt. Soc. Amer. B **23**, 1954 (2006).
63. Н. А. Иногамов, В. В. Жаховский, В. А. Хохлов, ЖЭТФ **127**, 79 (2018).
64. С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов и др., ЖЭТФ **130**, 212 (2006).
65. N. A. Inogamov, S. I. Anisimov, Yu. V. Petrov et al., Proc. SPIE **7005**, 70052F (2008).
66. S. I. Ashitkov, P. S. Komarov, V. V. Zhakhovsky et al., J. Phys. Conf. Ser. **774**, 012097 (2016).
67. K. V. Khishchenko, J. Phys. Conf. Ser. **98**, 032023 (2008).
68. K. V. Khishchenko, J. Phys. Conf. Ser. **653**, 012081 (2015).
69. K. V. Khichshenko, Mathematica Montisnigri **XL**, 140 (2017).
70. Yu. Petrov, K. Migdal, N. Inogamov et al., Data in Brief **28**, 104980 (2020).
71. E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids*, Acad. Press, Boston (1985).
72. Paul J. Steinhardt, David R. Nelson, and Marco Ronchetti, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
73. W. Lechner and C. Dellago, J. Chem. Phys. **129**, 114707 (2008).
74. Cynthia L. Kelchner, S. J. Plimpton, and J. C. Hamilton, Phys. Rev. B **58**, 11085 (1998).
75. B. A. Klumov, S. A. Khrapak, and G. E. Morfill, Phys. Rev. B **83**, 184105 (2011).
76. H. Hwang, E. Galtier, H. Cynn et al., Sci. Adv. **6**, eaaz5132 (2020).
77. R. Piessens, E. D. Doncker-Kapenga, C. Ueberhuber, and D. Kahaner, *Quadpack: a Subroutine Package for Automatic Integration*, Springer (2011).
78. Thomas Kluyver, Benjamin Ragan-Kelley, Fernando Pérez et al., *Positioning and Power in Academic Publishing: Players, Agents and Agendas*, IOS Press, (2016), pp. 87–99.
79. Thomas J. Ahrens, *Shock Wave Experiments*, Springer Netherlands, Dordrecht (2007), pp. 912–920.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКЛИКА ДЕТЕКТОРА LSD НА НЕЙТРИННУЮ ВСПЫШКУ ОТ SN1987A

К. В. Мануковский^{a*}, А. В. Юдин^{a,b**}, Н. Ю. Агафонова^{c***},

А. С. Мальгин^c, О. Г. Рязская^c

^a Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт» —
Институт теоретической и экспериментальной физики
117218, Москва, Россия

^b Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

^c Институт ядерных исследований Российской академии наук
117312, Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 ноября 2021 г.,
после переработки 6 декабря 2021 г.
Принята к публикации 6 декабря 2021 г.

При помощи кода Geant4 проведено полномасштабное моделирование отклика детектора LSD на нейтринную вспышку от сверхновой SN1987A. Параметры нейтринного потока выбирались согласно одной из моделей: стандартного коллапса или ротационной модели взрыва сверхновой. Было показано, что в зависимости от выбираемых параметров можно или получить требуемое число импульсов в установке, или воспроизвести их энергетический спектр, но не то и другое вместе. В моделировании учитывалось взаимодействие нейтринного излучения как с самим детектором LSD, так и с веществом находящегося вокруг грунта. Была также исследована гипотеза, что весь уникальный сигнал LSD в 2:52 UT был вызван потоками нейтронов из окружающего гранита. Однако по результатам моделирования данное предположение не подтвердилось. Полученные результаты предоставляют богатый материал для возможных интерпретаций.

DOI: 10.31857/S0044451022030038

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхновая SN1987A, вспыхнувшая 23 февраля 1987 г., инициировала бурное развитие теории взрывов сверхновых и экспериментальных методов детектирования нейтрино. Эту сверхновую обнаружили в оптическом диапазоне [1], а затем наблюдали во всех диапазонах спектра электромагнитного излучения. Но, кроме того, она была зарегистрирована четырьмя нейтринными детекторами: сцинтилляционными — LSD [2], БПСТ [3], и черенковскими — IMB [4], Kamiokande II (далее КП) [5]. Следует подчеркнуть, что это первый и пока, к сожалению,

единственный случай детектирования нейтрино от сверхновых звезд.

Сигнал детектора LSD от SN1987A, зарегистрированный примерно на 5 ч раньше сигналов детекторов IMB, КП и БПСТ, до сих пор вызывает дискуссии о своем происхождении. В общепринятой модели стандартного коллапса (сферически-симметричная невращающаяся звезда) [6, 7] излучение нейтрино должно быть однократным, с длительностью порядка 10 с, и поэтому сигнал в LSD должен был наблюдаться одновременно с сигналами в остальных детекторах. Кроме того, число импульсов в LSD должно быть меньше, чем в IMB и КП, так как массы рабочего вещества IMB (5000 т H₂O) и КП (2140 т H₂O) больше массы LSD (90 т C_nH_{2n}). Стоит отметить, что все эти детекторы были предназначены для регистрации электронных антинейтрино.

Однако существуют модели [8–11], допускающие и двойной нейтринный всплеск от сверхновой. Как

* E-mail: manu@itep.ru

** E-mail: yudin@itep.ru

*** E-mail: agafonova@inr.ru

было показано в [12], сигнал в 2:52 UT, зарегистрированный только на установке LSD и содержащий 5 импульсов, может найти объяснение в рамках модели вращающегося коллапсара [10] как результат взаимодействия электронных нейтрино высоких энергий с элементами конструкции детектора, которые содержали порядка 170 т железа.

Помимо этого, обращает на себя внимание схожесть энергетических характеристик сигнала в LSD со спектром гамма-квантов от захватов нейтронов ядрами железа $n + {}^{56}\text{Fe} \rightarrow {}^{57}\text{Fe} + \gamma$ [13]. Не могли окружающий детектор грунт (гранит Монблана), облучаемый потоками нейтрино от сверхновой, стать источником нейтронов от νA -взаимодействий? Эти нейтроны могли бы захватываться металлическими конструкциями LSD и производить гамма-кванты. Учитывая, что пробег гамма-кванта с характерной энергией 8 МэВ в железе составляет порядка 4 см, такие гамма-кванты могут свободно выходить из конструкций детектора и производить сигнал в сцинтилляционных счетчиках. Эта возможность нуждается в тщательной проверке.

Существенная неопределенность в параметрах нейтрино (в особенности энергии), излучаемых в процессе коллапса ядра сверхновой с сильным вращением, при отсутствии убедительных численных расчетов придает смысл попытке решения обратной задачи. То есть можно попытаться ответить на вопрос: если все 5 импульсов LSD обусловлены взаимодействием нейтринного излучения от сверхновой SN1987A, то какими характеристиками оно должно было обладать? Ответ на такой вопрос можно получить только с помощью прямого моделирования взаимодействия нейтрино с веществом детектора LSD и окружающим его грунтом.

Целью нашей работы является моделирование отклика детектора LSD на нейтринное излучение от сверхновой SN1987A в рамках двух возможных сценариев:

— «стандартный» коллапс со средней энергией нейтрино $\langle E \rangle_{\bar{\nu}_e} \approx 15$ МэВ;

— модель вращающегося коллапсара с двумя нейтринными сигналами. Первый состоит преимущественно из электронных нейтрино высоких энергий $\langle E \rangle_{\nu_e} \approx 40$ МэВ, а второй близок по своим параметрам к стандартному сценарию [10].

Вопрос об энергетических характеристиках нейтрино в ротационном механизме рассматривался, например, в работах [14, 15]. Было показано, что характерная энергия при определенных условиях действительно может достигать значения в 40 МэВ. Для выяснения чувствительности получаемых ре-

зультатов к этому конкретному значению нами был дополнительно рассмотрен случай с промежуточной энергией 30 МэВ.

Статья построена следующим образом. Сначала описывается детектор LSD, затем каналы взаимодействия нейтрино с веществом детектора. Далее приводятся характеристики уникального события LSD в 2:52 UT. Затем описывается метод моделирования отклика детектора. Результаты расчетов приведены в виде энергетических спектров для основных реакций и в сводной таблице для взаимодействий разных типов нейтрино с энергиями 15, 30 и 40 МэВ. В заключение обсуждаются результаты для обоих исследуемых сценариев взрыва сверхновой SN1987A.

Везде ниже будем называть единичное энерговыделение в детекторе, обладающее всеми характерными признаками взаимодействия нейтрино, «импульсом», совокупность таких импульсов, близких по времени, — «событием».

2. ДЕТЕКТОР LSD

Жидкостной сцинтилляционный детектор (Liquid Scintillation Detector, LSD), работавший с 1984 г., предназначался для регистрации нейтрино от коллапсов звездных ядер [16]. Он был сооружен совместно Институтом ядерных исследований АН СССР (в настоящее время ИЯИ РАН) и Институтом космогеофизики Национального совета исследований Италии в туннеле под Монбланом на глубине 5200 м в.э. Такая толщина грунта над установкой обеспечивает снижение потока мюонов космических лучей на шесть порядков. Автотранспортный туннель длиной 12 км, соединяющий Италию и Францию, проходит с юго-востока на северо-запад.

LSD состоял из 72 сцинтилляционных счетчиков размерами $1.0 \times 1.5 \times 1.0$ м³ каждый. Корпус счетчика был изготовлен из нержавеющей стали толщиной 0.4 см. Счетчики образовывали три трехуровневые секции (колонны) в виде параллелепипеда с площадью 6×7 м² и высотой 4.5 м (см. ниже рис. 4–6).

Структуру установки составляли железные контейнеры, поставленные друг на друга и вмещавшие по два счетчика. Стенки контейнеров имели разную толщину для того, чтобы между сопредельными гранями счетчиков в колонне был слой железа 2 см. Обращенные к коридорам боковые стенки и донья контейнеров имели толщину 2 см. Таким образом, с учетом толщины стенок счетчиков 0.4 см сцинтиллятор счетчиков в колонне был разде-

лен слоями железа 2.8 см. Между сцинтиллятором соседних колонн слой железа составлял 2.8 см, между скальным грунтом и сцинтиллятором — 4.4 см. Установка стояла на железной платформе толщиной 10 см. Для снижения влияния естественной радиоактивности грунта стенки камеры были облицованы стальными плитами общим весом около 114 т.

Над детектором и под ним имелось пространство высотой 6 см, куда предполагалось поместить два слоя резистивных стримерных камер для экспериментов по физике мюонов, но с появлением в 1982 г. проекта NUSEX [17], способного решать эти задачи, от резистивных камер было решено отказаться.

Сцинтиллятор на базе уайт-спирита C_nH_{2n} , $\langle n \rangle \approx 9.6$, содержал добавки РРО (1 г/л) и РОРОР (0.03 г/л). Каждый счетчик просматривался тремя фотоэлектронными умножителями ФЭУ-49Б с диаметром фотокатода 15 см. Энерговыделению 1 МэВ в счетчике соответствовал суммарный сигнал трех ФЭУ, образуемый примерно 15 фотоэлектронами. Величины энерговыделения в счетчике анализировались при совпадении сигналов от трех ФЭУ с разрешающим временем 200 нс.

Энергетический порог более защищенных от фона внутренних 16 счетчиков $E_{HET}^{in} = 5$ МэВ, для внешних 56 счетчиков порог регистрации $E_{HET}^{ex} = 7$ МэВ. Импульс от схемы совпадений любого из 72 счетчиков являлся триггером для всего детектора в целом. В этом случае проводилась запись амплитуды (с энерговыделением выше $E_{LET} = 0.8$ МэВ) и времени импульса во временном окне 500 мкс в каждом из 72 счетчиков.

Энергетическая калибровка счетчиков проводилась по пикам от энерговыделений атмосферных мюонов (175 МэВ для вертикальных мюонов) и гамма-квантов от захватов нейтронов (продуктов спонтанного деления ^{252}Cf) ядрами водорода ($E_\gamma = 2.2$ МэВ) и никеля ($E_\gamma \approx 9$ МэВ).

Энергетическое разрешение сцинтилляционного счетчика описывается формулой

$$\frac{\sigma}{E} = \frac{1}{2.35} \left(0.26 \pm \sqrt{\frac{0.31}{E [\text{МэВ}]} + 0.055} \right), \quad (1)$$

которая базируется на определении разрешения $\eta = \Delta E/E$, $\Delta E = 2.35\sigma$, $\sigma = 1/\sqrt{N_{pe}} = 1/\sqrt{aE}$, где ΔE — ширина функции разрешения (квазигаусс) на половине высоты, σ — доверительный интервал (погрешность измерений 68%), N_{pe} — число фотоэлектронов на трех ФЭУ, a — число фотоэлектронов на трех ФЭУ от энерговыделения 1 МэВ. Первый член в скобках представляет разброс коэффициента све-

тосбора в зависимости от места вспышки в счетчике, первый член суммы под радикалом определяется флуктуациями числа фотоэлектронов N_{pe} , второй — разбалансом коэффициентов усиления ФЭУ.

3. ВЫДЕЛЕНИЕ КАНДИДАТОВ НА РЕГИСТРАЦИЮ СИГНАЛА

Система регистрации эксперимента LSD позволяла детектировать продукты взаимодействия электронного антинейтрино ($\bar{\nu}_e$) со сцинтиллятором: позитроны из реакции $\bar{\nu}_e + p \rightarrow n + e^+$ (IBD-реакция Райнеса–Коуэна) и гамма-кванты от захвата нейтрона протонами $n + p \rightarrow d + \gamma$ или ядрами железа $n + \text{Fe} \rightarrow \text{Fe} + \sum \gamma$. Эта последовательность реакций дает основную «сигнатуру» регистрации антинейтрино.

Если детектируется позитрон, то амплитуда равна сумме кинетической энергии позитрона и энергии гамма-квантов e^+e^- -аннигиляции (~ 1 МэВ).

Эффективность регистрации частиц определяется функциями верхнего E_{HET} и нижнего E_{LET} порогов и краевым эффектом [18].

Средний темп счета триггерных импульсов детектора около 45 в час. Среднее число нейтроноподобных импульсов во временном окне 500 мкс — 0.1 и 0.8 соответственно для внутренних и внешних счетчиков.

Нейтринная вспышка идентифицируется по появлению серии импульсов с амплитудой больше E_{HET} за время $t < 20$ с. Фон детектора может имитировать истинное событие. В онлайн-анализе данных детектора оценивалась частота имитации фоном

$$F_{im} = m \frac{(mt)^{k-1}}{(k-1)!} \exp(-mt),$$

где m — частота фоновых импульсов, t — длительность пачки импульсов, k — число импульсов. Информация о серии импульсов с низкой частотой имитации (меньше 1/(5–50) лет) посылалась на распечатку с компьютера детектора.

Подробно процедура отбора импульсов-кандидатов на нейтринные сигналы от гравитационных коллапсов описана в работах [19, 20].

3.1. Реакции взаимодействия нейтрино с веществом детектора LSD

Помимо IBD-реакции, детектор LSD был способен регистрировать частицы от взаимодействия нейтрино с ядрами углерода и железа, входящими

Таблица 1. Реакции взаимодействия нейтрино по заряженным токам (CC)

Тип нейтрино	Ядро: C	Ядро: Fe
$\tilde{\nu}_e$	$\tilde{\nu}_e + {}^{12}\text{C} \rightarrow {}^{12}\text{B} + e^+ (E_{th} = 14.4 \text{ МэВ})$ ${}^{12}\text{B} \rightarrow {}^{12}\text{C} + e^- + \tilde{\nu}_e$	$\tilde{\nu}_e + {}^{56}\text{Fe} \rightarrow {}^{56}\text{Mn}^* + e^+ (E_{th} = 12.5 \text{ МэВ})$ ${}^{56}\text{Mn}^* \rightarrow {}^{56}\text{Mn} + \gamma$ ${}^{56}\text{Mn}^* \rightarrow {}^{55}\text{Mn} + n$ ${}^{56}\text{Mn}^* \rightarrow {}^{55}\text{Cr} + p$
ν_e	$\nu_e + {}^{12}\text{C} \rightarrow {}^{12}\text{N} + e^- (E_{th} = 17.3 \text{ МэВ})$ ${}^{12}\text{N} \rightarrow {}^{12}\text{C} + e^+ + \nu_e$	$\nu_e + {}^{56}\text{Fe} \rightarrow {}^{56}\text{Co}^* + e^- (E_{th} = 10 \text{ МэВ})$ ${}^{56}\text{Co}^* \rightarrow {}^{56}\text{Co} + \gamma$ ${}^{56}\text{Co}^* \rightarrow {}^{55}\text{Co} + n$ ${}^{56}\text{Co}^* \rightarrow {}^{55}\text{Fe} + p$

Таблица 2. Реакции взаимодействия нейтрино по нейтральным токам (NC) и рассеяние на электроне (ES)

Тип нейтрино	Ядро: C	Ядро: Fe	e^-
$\tilde{\nu}_e$	$\nu_i + {}^{12}\text{C} \rightarrow \nu_i + {}^{12}\text{C}^*$	$\nu_i + {}^{56}\text{Fe} \rightarrow \nu_i + {}^{56}\text{Fe}^*$	$\nu_i + e^- \rightarrow \nu_i + e^-$
ν_e	$(E_{th} = 15.1 \text{ МэВ})$	$(E_{th} = 15 \text{ МэВ})$	
$\tilde{\nu}_{\mu,\tau}$	${}^{12}\text{C}^* \rightarrow {}^{12}\text{C} + \gamma$	${}^{56}\text{Fe}^* \rightarrow {}^{56}\text{Fe} + \gamma$	
$\nu_{\mu,\tau}$	${}^{12}\text{C}^* \rightarrow {}^{11}\text{C} + n$	${}^{56}\text{Fe}^* \rightarrow {}^{55}\text{Fe} + n$	
	${}^{12}\text{C}^* \rightarrow {}^{11}\text{B} + p$	${}^{56}\text{Fe}^* \rightarrow {}^{55}\text{Mn} + p$	

в состав сцинтиллятора и конструкции установки. Реакции и пороги регистрации приведены в табл. 1 и 2. Задержанные импульсы (гамма-кванты и нейтроны) от снятия возбуждения ядер Mn, Fe и Co детектор может регистрировать благодаря низкому порогу E_{LET} , который «открывает» для чтения все счетчики после прихода триггера — импульса выше E_{HET} . Импульсы от этих γ -квантов и γ -квантов от захватов нейтронов железом установки в реакциях $\tilde{\nu}_e(\nu_e)$ с веществом детектора и окружающего его грунта могут иметь энергии до 15 МэВ и тоже регистрироваться детектором как одиночные триггеры.

4. СОБЫТИЕ, ЗАРЕГИСТРИРОВАННОЕ ДЕТЕКТОРОМ LSD ВО ВРЕМЯ ВСПЫШКИ SN1987A

23 февраля 1987 г. в 2 ч 52 мин всемирного времени (UT) в эксперименте LSD была зарегистрирована серия из 5 импульсов за 7 с. Информация с характеристиками сигнала была послана в Международный астрономический союз (IAU) 28 февраля [2, 21]. Далее будем называть импульсы около времени 2:52 UT первым сигналом.

Коллаборация Камиоканде II (Япония, США) 6 марта сообщила о регистрации нейтрино от SN1987A в IAU и подготовила публикацию [5]. Команда эксперимента IMB (США) отослала 11 марта такое же сообщение в IAU и 12 марта у нее был готов текст публикации [4]. Группа Баксанского телескопа БПСТ [3] заявила 6 апреля о выделении нейтринного сигнала из своих данных. С поправками на точность часов все три сигнала произошли одновременно в 7:35 UT. Детектором LSD в 7:35 UT [2] были зарегистрированы два импульса. Импульсы около времени 7:35 будем называть вторым сигналом.

Методика экспериментов как черенковских детекторов КП и IMB, так и сцинтилляционного телескопа БПСТ не позволяла идентифицировать именно $\tilde{\nu}_e p$ -взаимодействия: установки не могли детектировать np -захват и, таким образом, в отличие от LSD, не имели сигнатуры данной реакции.

Сигнал КП, содержащий 11 импульсов (первоначально 12), авторами интерпретировался как произведенный $\tilde{\nu}_e p$ -взаимодействиями на основании приблизительной изотропности направления треков частиц в импульсах. Тот факт, что треки частиц в 7 из 11 импульсов направлены в перед-

Таблица 3. Характеристики зарегистрированного кластера LSD

Номер счетчика	Время импульса, час. мин. сек.	Амплитуда, МэВ	Нейтронopodobный импульс
31 наружный	2.52.36.792	6.2	—
14 внутренний	2.52.40.649	5.8	—
25 наружный	2.52.41.007	7.8	+1.0 после 278 мкс
35 внутренний	2.52.42.696	7.0	—
33 внутренний	2.52.43.800	6.8	—

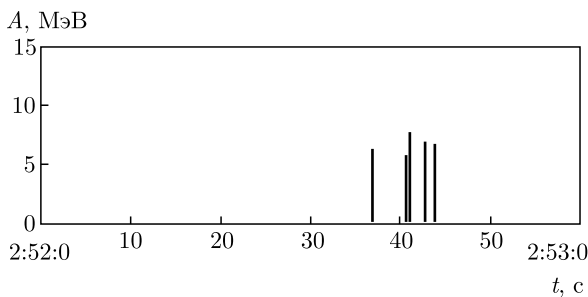


Рис. 1. Серия импульсов, зарегистрированная в LSD (2 ч 52 мин UT)

ную полусферу, авторы объясняли флуктуациями. Похожая ситуация с сигналом IMB: 7 треков из 8 также направлены в среднюю полусферу. Авторами КП допускалось, что в их сигнале 2 импульса из 11 могли быть вызваны νe -рассеянием, но такое количество νe -взаимодействий приводило к противоречию с теоретическими предсказаниями о полной энергии потока нейтрино [22–24].

Итак, зарегистрированный кластер LSD содержал 5 импульсов во временном интервале 7 с, ограниченном первым и последним импульсами (рис. 1).

Кластеры-кандидаты следовали на LSD с частотой около 0.5 в сутки, но данный кластер имел исключительно низкую частоту имитации фоном $F_{im} \approx 1.8 \cdot 10^{-3}$ в сутки и появился впервые с начала работы установки в январе 1985 г. Близкий по частоте имитации $\approx 4 \cdot 10^{-3}$ кластер был зарегистрирован только 27 апреля 1986 г., он состоял из 11 импульсов за 67 с [25].

Время появления импульсов в LSD и их амплитуды (уточненные после дополнительных калибровок [20]) приведены в табл. 3. Из пяти измеренных импульсов только один сопровождался нейтронopodobным импульсом, отстоящим от триггерного сигнала в детекторе на время 278 мкс с энергией 1.4 МэВ.

Таблица 4. Сигналы, зарегистрированные детекторами IMB, КП и БПСТ

Детектор	Время первого–последнего импульсов, час. мин. сек	Число импульсов
IMB	7.35.35–7.35.47	12
КП	7.35.41–7.35.44	8
БПСТ	7.36.06–7.36.21	6

Для информации в табл. 4 приведены время и число импульсов в детекторах IMB [5], КП [4] и БПСТ [3]. Такое небольшое количество импульсов было вызвано не только расстоянием до источника (около 50 кпк от Земли), но и относительно небольшими размерами детекторов.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКЛИКА LSD

Моделирование проводилось с использованием программного комплекса Geant4 версии 10.3 [26]. Данный программный комплекс позволяет проводить детальные расчеты прохождения элементарных частиц через вещество с помощью метода Монте-Карло. Также Geant4 имеет необходимые средства для задания объектов сложной геометрии и включает в себя широкий набор теоретических моделей, описывающих взаимодействие элементарных частиц с веществом. Подробное описание набора физических моделей, применявшегося в расчетах, можно найти в работе [27]. Следует отметить, что указанные физические настройки были специально подобраны и оптимизированы для моделирования экспериментальных установок в подземных низкофоновых лабораториях. Тестирование и отладка прово-

дильсь на целом ряде экспериментальных данных, начиная с относительно простых экспериментов по взаимодействию протонов и π -мезонов фиксированной энергии с железными и свинцовыми мишенями и заканчивая более сложными экспериментальными установками с детекторами на основе жидкого сцинтиллятора на Артемовской научной станции ИЯИ в гипсовой (25 мв.э.) и соляной (316 и 570 мв.э.) шахтах. Полученные в численных расчетах результаты хорошо согласовывались с результатами экспериментов [28].

В пакете библиотек Geant4 отсутствуют модели для описания взаимодействия нейтрино с веществом. Поэтому информация о процессах с участием нейтрино должна быть добавлена в расчет извне. Мы использовали стандартные формулы (см., например, [29]) для описания процессов 1) захвата нейтрино ядром, 2) неупругого рассеяния нейтрино на ядре, 3) рассеяния на электроне. Основной проблемой здесь является расчет величины и распределения гамов-теллеровских и фермиевских резонансов в дочернем ядре, которые доминируют в указанных процессах на ядрах при рассматриваемых характерных энергиях нейтрино. Для полного расчета нам нужна информация по взаимодействию нейтрино как в сцинтилляторе установки, так и в защитных металлических конструкциях LSD и в окружающей установку грунте. Ниже представлена компиляция использованных библиографических данных по учитываемым элементам (с изотопами): ^1H [29–31], $^{12,13}\text{C}$ [32–36], $^{16,18}\text{O}$ [35, 37–41], ^{27}Al [42, 43], ^{28}Si [44, 45], $^{50,52-54}\text{Cr}$ [46–49], $^{54,56,57}\text{Fe}$ [33, 34, 40, 50–54], $^{58,60}\text{Ni}$ [35, 53, 54].

На рис. 2 приведены рассчитанные сечения взаимодействия нейтрино и антинейтрино с несколькими наиболее важными мишенями: с ядрами водорода и углерода (состав сцинтиллятора — C_nH_{2n}), железа (защитные и несущие конструкции установки) и электронами. Сплошными линиями показан результат для взаимодействия электронного нейтрино по заряженному каналу, штриховыми — то же для электронного антинейтрино. Пунктирные линии — неупругое рассеяние, штрихпунктирной линией показано рассеяние на электронах. Как видно, сечение реакции $\nu_e + ^{56}\text{Fe}$ уже примерно при 15 МэВ превосходит сечение основной IBD-реакции, что особенно важно для рассматриваемого нами ротационного механизма взрыва сверхновой [12], в рамках которого как раз и могут возникать нейтрино высоких энергий.

Для того чтобы продемонстрировать имеющуюся в литературе неопределенность в отношении рас-

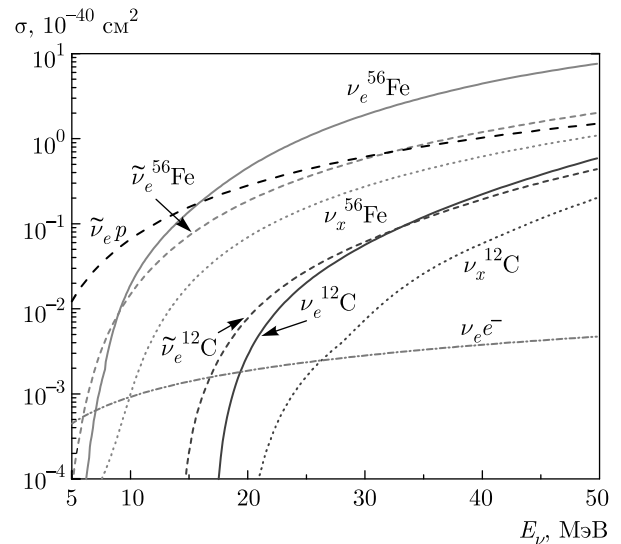


Рис. 2. Сечения взаимодействия нейтрино с несколькими избранными мишенями как функции энергии

Таблица 5. Сечение взаимодействия нейтрино с ядром железа при $E_\nu = 40$ МэВ

Ссылка	$\sigma_\nu, 10^{-40} \text{ см}^2$
[55]	3.72
[40]	5.41
[50]	2.1
[52]	3.04
[56]	4.2
Данная работа	4.3

считываемых величин сечений, в табл. 5 приведены значения сечения взаимодействия нейтрино с ядром железа $\nu_e + ^{56}\text{Fe} \rightarrow ^{56}\text{Co} + e^-$ при энергии нейтрино $E_\nu = 40$ МэВ согласно некоторым работам. Как видно, имеющиеся данные позволяют находить сечения с точностью до множителя двойка. Это следует учитывать при последующем анализе полученных результатов. Заметим, однако, что основной канал регистрации — реакция взаимодействия электронного антинейтрино с водородом — не содержит подобных неопределенностей.

5.1. Конструкция LSD и окружающий грунт

Особое внимание и значительное количество усилий было уделено созданию геометрии детектора

Таблица 6. Химический состав гранита

Соединение	Массовая доля, %
SiO ₂	72.76
Al ₂ O ₃	13.96
K ₂ O	4.35
Na ₂ O	3.76
Fe ₂ O ₃	2.18
CaO	1.09
H ₂ O	0.99
MgO	0.65
TiO ₂	0.26

Таблица 7. Массовые доли химических элементов

Элемент	Массовая доля, %
O	49.23
Si	34.01
Al	7.39
K	3.61
Na	2.79
Fe	1.53
Ca	0.78
Mg	0.39
Ti	0.16
H	0.11

LSD. По возможности необходимо было включить в модель все элементы конструкции, которые могли повлиять на результаты численного моделирования. Также расчетная геометрия учитывала гранит, окружающий установку. Гранит массива Монблана в основном состоит из диоксида кремния SiO₂. Химический состав гранита, использовавшийся в расчетах, и массовые доли основных химических элементов показаны в табл. 6 и 7. В силу высокой защиты установки LSD от различных источников фона, единственными продуктами взаимодействия нейтрино с ядрами гранита, которые могли бы до-

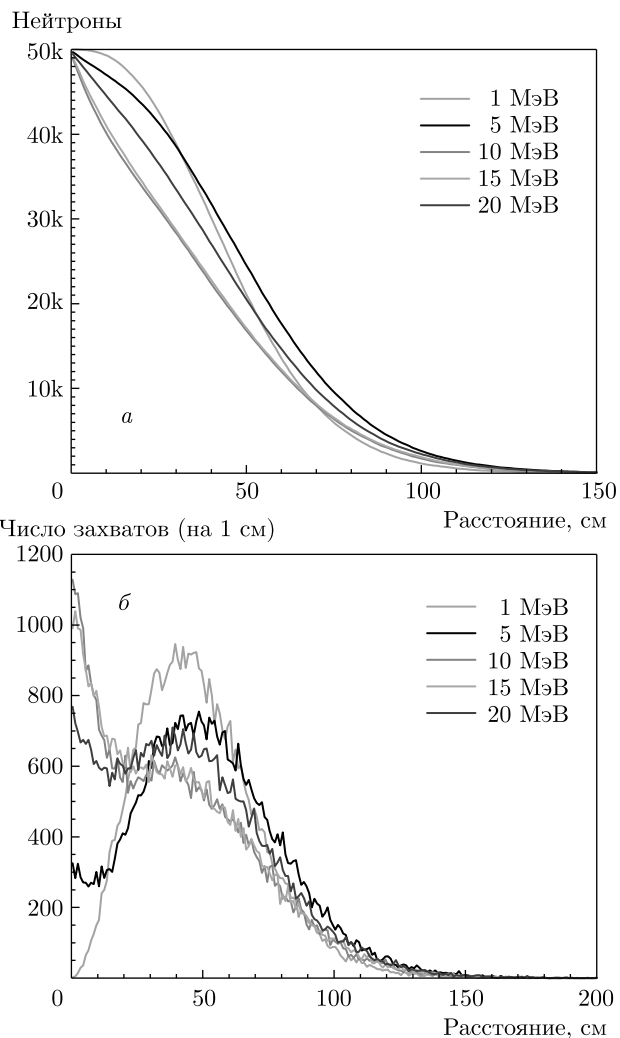


Рис. 3. (В цвете онлайн) а) Изменение числа нейтронов по мере удаления от точки источника в граните. б) Распределение точек захвата нейтронов в граните как функция расстояния

стигнуть внутреннего объема детектора и привести к регистрации сигнала счетчиками, являются нейтроны. Поэтому в предварительных расчетах была изучена проникающая способность нейтронов в граните. Как показало моделирование (см. рис. 3) для различных значений начальной энергии нейтронов (от 1 до 20 МэВ), максимальная глубина проникновения не превышает 1.5 м, и только примерно 5% нейтронов преодолевают расстояние более 100 см. Поэтому в расчетах слой гранита, чувствительный к взаимодействию с нейтрино, имел толщину равную 1 м. Общая же толщина гранита, окружающего зал с детектором LSD и прилегающий участок автомобильного тоннеля, в численной геометрии составляла 3 м.

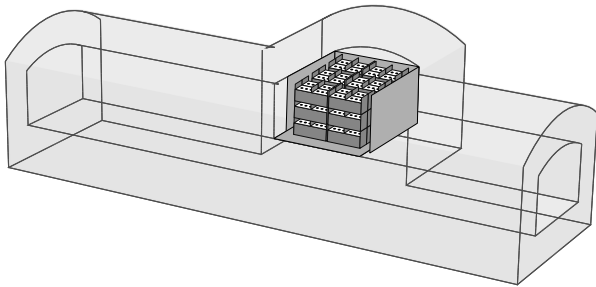


Рис. 4. Общий вид численной геометрии установки LSD, использованной в расчетах

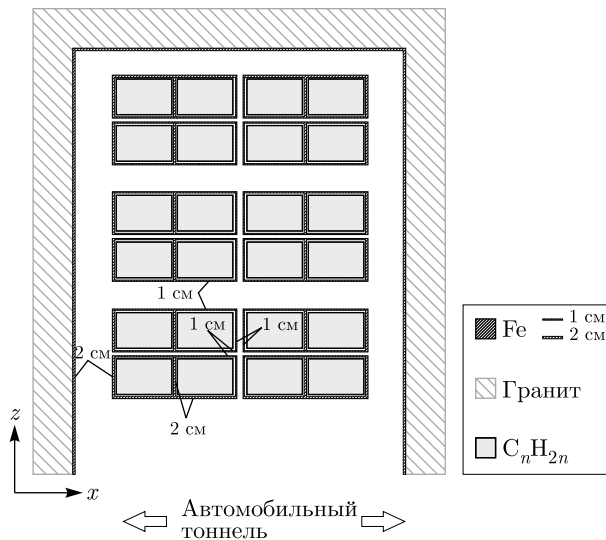


Рис. 5. Геометрия детектора LSD (вид сверху)

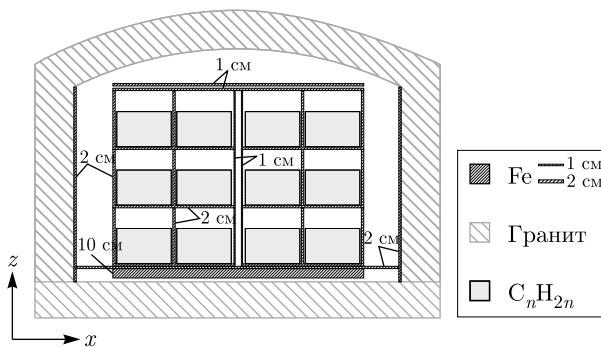


Рис. 6. Геометрия детектора LSD (вид со стороны автомобильного тоннеля)

Общий вид геометрии для установки LSD с внутренним детектирующим объемом (счетчиками в железных контейнерах), внешними защитными стальными плитами и слоем гранита вокруг экспериментального зала и фрагмента тоннеля приведен на

рис. 4. Более детально внутреннее устройство детектора в окружении метрового слоя гранита показано на рис. 5 и 6.

В расчете геометрия детектора представляет собой совокупность отдельных объемов сложной формы, которые создаются посредством логических операций из набора элементарных геометрических фигур (цилиндров, конусов, параллелепипедов и т. д.). В пределах одного объема задаются однородные химический состав и плотность. Заранее вычисленные сечения реакций нейтрино с различными ядрами (см. выше) использовались для моделирования взаимодействия нейтринного излучения с элементами конструкции детектора LSD.

5.2. Расчет взаимодействия нейтрино с элементами установки

Рассмотрим некоторый объем геометрии экспериментальной установки с индексом i , полной массой M^i и химическим составом, заданным массовыми долями отдельных ядер $X_{A,Z}^i$, входящих в его химический состав. Здесь Z и A — соответственно заряд и массовое число ядра. Тогда число взаимодействий нейтрино по данному каналу реакций q с ядром (A, Z) в рассматриваемом объеме i в пересчете на единичный поток нейтрино заданного сорта составит

$$N_{A,Z}^i = \frac{M^i}{m_u} \frac{X_{A,Z}^i}{A} \sigma_{A,Z}^q(E_\nu), \quad (2)$$

где $\sigma_{A,Z}^q$ — сечение соответствующей реакции, m_u — атомная единица массы. Как нетрудно понять, полное число реакций (опять же в пересчете на единичный поток) нейтрино с энергией E_ν по каналу p с веществом данного объема будет равно

$$N^i = \sum_{A,Z} N_{A,Z}^i = \frac{M^i}{m_u} \sum_{A,Z} \frac{X_{A,Z}^i}{A} \sigma_{A,Z}^q(E_\nu), \quad (3)$$

а полное число взаимодействий с установкой в целом определяется выражением

$$N_{tot} = \sum_i N^i. \quad (4)$$

Вероятность того, что реакция произойдет в объеме с индексом i , дается отношением выражений (3) и (4). Далее в расчете следует аналогичный розыгрыш ядра, с которым взаимодействует нейтрино. Вероятность реакции с ядром (A, Z) равна отношению (2) к (3). Продукты реакции (дочерние ядра, возможно, в возбужденном состоянии, электроны/позитроны и т. д.) используются в качестве первичных частиц в

расчете с использованием Geant4. Полученные результаты нормируются на полное число реакций нейтрино с расчетной геометрией детектора, которое вычисляется исходя из заданного потока нейтрино. Например, для монохроматических нейтрино с энергией E_ν от сверхновой SN1987A при условии, что полная энергия, выделившаяся изотропно в виде таких нейтрино, составила E_{tot} , число взаимодействий можно оценить по формуле

$$N_{int} \approx 1.2 \frac{E_{tot}}{10^{53} \text{ эрг}} \frac{10 \text{ МэВ}}{E_\nu} \frac{M_{tot}}{100 \text{ т}} \times \left(\frac{51.4 \text{ кпк}}{R_{SN}} \right)^2 \sum_{A,Z,q} \frac{X_{A,Z}}{A} \frac{\sigma_{A,Z}^q(E_\nu)}{10^{-42} \text{ см}^2}, \quad (5)$$

где R_{SN} [кпк] — расстояние до сверхновой. В общем же случае необходимо проводить интегрирование по спектру приходящих нейтрино.

Сбор данных и регистрация сигналов в счетчиках в ходе численного моделирования осуществлялась способом, аналогичным работе регистрирующей аппаратуры в эксперименте.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ

6.1. Моделирование отклика LSD на потоки нейтронов из грунта

На первом этапе моделирования исследовалось предположение о связи сигнала, зарегистрированного на LSD в 2:52 UT, с нейтронами, которые могут рождаться в реакциях взаимодействия нейтрино с веществом гранита, окружавшего установку.

Во-первых, была изучена проникающая способность нейтронов в грунте (см. выше рис. 3), чтобы оценить эффективный объем (и массу) гранита, который может влиять на установку. Для всего диапазона возможных энергий нейтронов глубина проникновения составила порядка 100 см. Следует заметить, что после выхода из гранита нейтронам еще необходимо преодолеть более 4 см железной защиты. Тем не менее объем гранита, в котором могут рождаться нейтроны, способные выйти в зал с экспериментальной установкой, оказывается довольно внушительным. Масса гранита в этом объеме составляет более 1300 т, что почти на порядок превышает массу всех железных и стальных конструкций.

Во-вторых, был смоделирован отклик детектора на нейтроны, приходящие из гранита. Эти расчеты также показали слабую зависимость результа-

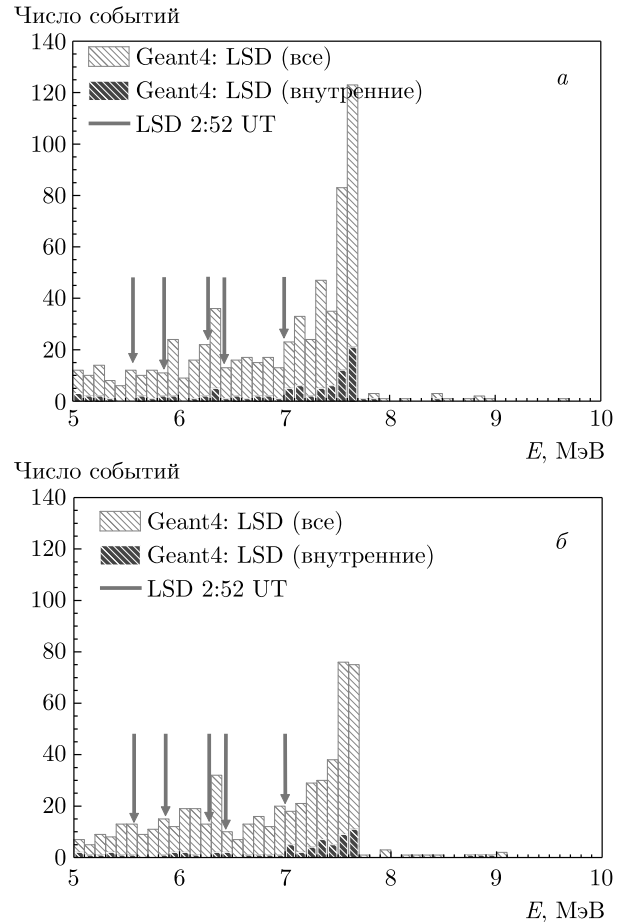


Рис. 7. Спектр энерговыделений (с энергией выше 5 МэВ) в счетчиках LSD для рожденных в граните нейтронов с начальной энергией 1 МэВ (а) и 8 МэВ (б). Распределение по энергии для внутренних счетчиков установки показано темным цветом, для всех — светлым. Стрелками показаны энергии сигналов, зарегистрированных на LSD в 2:52 UT

тов от начальной энергии нейтрона. Для примера приведем распределения по энергии сигналов, зарегистрированных счетчиками LSD, для двух значений начальной энергии — 1 и 8 МэВ (см. рис. 7). Как видно, результаты довольно хорошо согласуются по энергии с экспериментальными данными, что делает предположение [13] о возможной роли гранита в объяснении зарегистрированного сигнала весьма правдоподобной. Однако, несмотря на большую массу гранита, окружавшего детектор, расчеты взаимодействия с нейтринным излучением показали, что нейтроны являются крайне редким продуктом во всех возможных реакциях нейтрино с ядрами, входящими в состав гранита, что совершенно не позволяет объяснить число зарегистрированных импульсов (см. табл. 8 ниже).

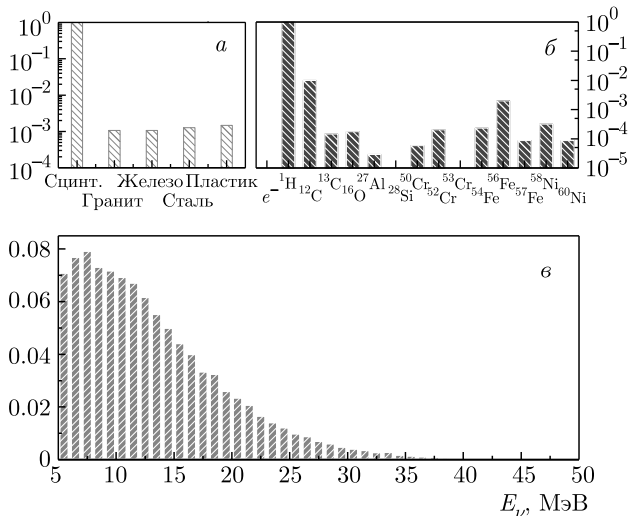


Рис. 8. Относительное число реакций в различных веществах (а) и на различных ядрах (б), сопровождавшихся регистрацией сигнала с энергией более 5 МэВ. в) Нормированный спектр энерговыделений в счетчиках для электронных антинейтрино с энергией, распределенной по равновесному спектру со средним значением 15 МэВ, в реакциях по заряженному току

6.2. Моделирование отклика LSD на вспышку нейтринного излучения

Была проведена серия расчетов по изложенной выше методике для различных энергий, сортов и каналов реакций нейтрино. В процессе расчета установка и окружающий ее гранит облучались потоком нейтрино определенного состава (с фиксированной или распределенной по равновесному спектру энергией). Полная энергия, излученная сверхновой в виде нейтрино, во всех расчетах равнялась 10⁵³ эрг. На рис. 8 приведены результаты моделирования для потока электронных антинейтрино с энергией, распределенной по равновесному спектру

$$F_{\nu}(E_{\nu}) \propto E_{\nu}^3 \exp\left(-\frac{3E_{\nu}}{\langle E_{\nu} \rangle}\right)$$

со средним значением $\langle E_{\nu} \rangle = 15$ МэВ, для канала реакций по заряженному току. Спектр энерговыделений в счетчиках имеет максимум на энергиях около 7–8 МэВ и медленно убывающий «хвост». В расчете было смоделировано 50000 реакций нейтрино с заданными свойствами. Как и ожидалось, большинство реакций, которые привели к регистрации в сцинтилляционных счетчиках сигналов с энергией более 5 МэВ, происходили в самом сцинтилляторе. А основным ядром, вступающим в реакции с нейт-

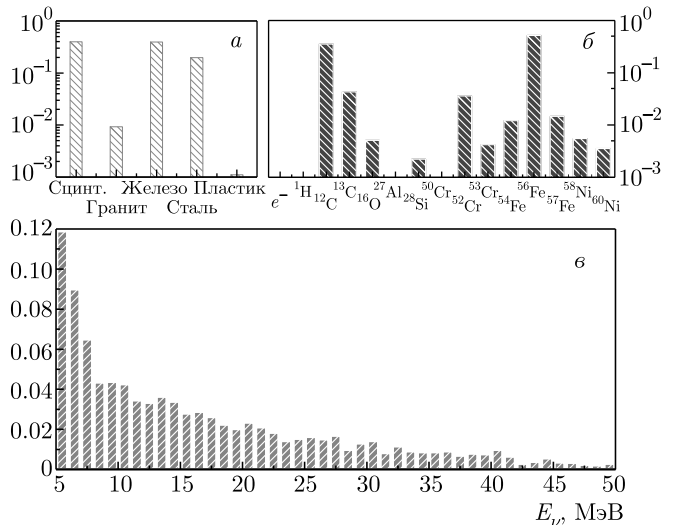


Рис. 9. То же, что и на рис. 8, но для электронных нейтрино с энергией, распределенной по равновесному спектру со средним значением 40 МэВ, в реакциях по заряженному току

рино, был водород (следует обратить внимание на логарифмический масштаб на рис. 8а,б).

На рис. 9 приведены те же данные, но для потока электронных нейтрино с энергией, распределенной по равновесному спектру с более высоким значением средней энергии 40 МэВ (см. [12]), в реакциях по заряженному току. Спектр энерговыделений в этом случае получается достаточно протяженным (приблизительно до 50 МэВ) и монотонно убывающим. Нейтрино в основном реагируют с веществом железных и стальных конструкций установки, однако сравнимое число реакций происходит и в сцинтилляторе. Изотопы железа и углерода — ядра, наиболее часто вступающие в реакции с нейтрино.

Наконец, на рис. 10 показаны результаты расчета для канала реакций по нейтральным токам и рассеянию нейтрино на электронах. Спектр нейтрино — равновесный со средней энергией 40 МэВ. Спектр энерговыделений имеет ярко выраженный максимум в интервале энергий 5–10 МэВ, что вполне соответствует энергиям, зафиксированным в эксперименте. Тем не менее все же стоит отметить наличие в спектре и сигналов с высокими значениями энергии (вплоть до ~ 30 МэВ). Как и в предыдущем варианте, основную роль играют железо, сталь и сцинтиллятор. Однако наряду с изотопами железа и углерода заметный вклад в число зарегистрированных импульсов вносят реакции рассеяния нейтрино на электронах.

Таблица 8. Сводная таблица результатов расчетов для различных типов реакций и энергий нейтрино от сверхновой SN1987A

Тип реакции	Средняя энергия нейтрино, МэВ	Полное число ожидаемых импульсов	Вероятность, что один импульс попал в интервал 5–10 МэВ	Доля реакций в грунте, $\times 10^{-2}$	Доля импульсов с образованием нейтронов, $\times 10^{-2}$
$\bar{\nu}_e$	15	1.92	0.379	0.11	0.06
	30	5.6	0.175	0.29	0.92
	40	8.46	0.135	0.54	1.96
ν_e	15	0.08	0.635	0.17	1.10
	30	1.1	0.449	0.45	2.43
	40	2.6	0.371	0.93	2.86
NC+ES	15	0.046	0.69	0.06	0.68
	30	0.22	0.69	0.92	1.64
	40	0.41	0.69	1.93	3.52

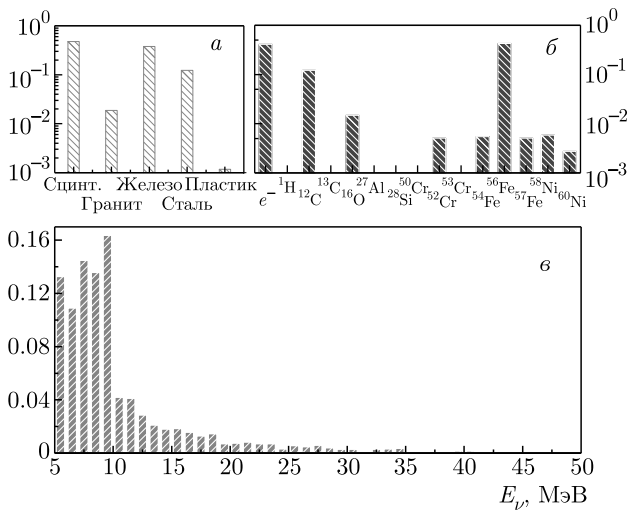


Рис. 10. То же, что и на рис. 8, но для произвольного сорта нейтрино с энергией, распределенной по равновесному спектру со средним значением 40 МэВ, в реакциях по нейтральным токам и рассеянию на электронах

В табл. 8 суммированы наиболее важные результаты численного моделирования для широкого набора энергий и типов реакций нейтрино. Расстояние до источника нейтринного излучения полагалось равным расстоянию до сверхновой SN1987A. При этом поток нейтрино считался изотропным, а его полная энергия в каждом расчете равнялась 10^{53} эрг. В табл. 8 приводятся ожидаемое (по результатам моделирования) число импульсов в детекторе LSD, вероятность того, что данное энерговыде-

ление попало в интервал 5–10 МэВ, доля импульсов от реакций в граните, а также доля импульсов от реакций, среди продуктов которых были нейтроны. Как видно из последних двух столбцов таблицы, вклад гранита и нейтронов в число регистрируемых импульсов от нейтринного излучения ничтожен при всех возможных значениях энергий и каналов реакций. По-видимому, это связано с тем, что гранит, окружающий LSD, сложен в основном из α -частичных ядер (^{16}O , ^{28}Si , см. табл. 7), имеющих высокие энергии связи и энергии отделения нейтронов. Из все же образовавшихся нейтронов лишь малая часть сумеет выйти из грунта (см. рис. 3) и еще меньшая сумеет пройти защитные конструкции LSD, чтобы дать сигнал в счетчиках. Таким образом, к сожалению, красивая идея [13] о влиянии окружающего грунта на детектируемый в LSD сигнал от сверхновой оказывается нерабочей.

Как видно из табл. 8, основным фактором, приводящим к увеличению полного числа зарегистрированных событий, является высокая энергия. Реакции рассеяния нейтрино вносят незначительный вклад в полное число событий при всех возможных значениях энергии. С другой стороны, спектр энерговыделений, наблюдавшихся в эксперименте, наиболее близко воспроизводится как раз в реакциях рассеяния.

6.3. Погрешности полученных результатов

На полученные величины в результирующей табл. 8 влияют погрешности в определении неко-

торых характеристик детектора и потока нейтрино. В систематическую ошибку наших расчетов вносит вклад также разброс параметров разных версий Geant4.

Для снижения статистической погрешности моделирования проводилось достаточно большое количество розыгрышей. Для каждого набора параметров число реакций с нейтрино составляло $5 \cdot 10^4$. Это позволило довести величину статистической ошибки для основных величин, получаемых при моделировании (полного числа ожидаемых событий и вероятности попадания в интервал энергий 5–10 МэВ), до уровня долей процента. Значения величин в двух последних столбцах табл. 8 (доли реакций в грунте и событий с образованием нейтронов) получены с меньшей точностью в силу того, что эти события достаточно редкие. Но и для них величина статистической погрешности не превышала 20 %.

О систематических ошибках при включении в моделирование набора сечений взаимодействий нейтрино дает представление пример с ^{56}Fe (табл. 5). Как видно, различие в сечениях оказывается порядка множителя двойка и эта величина сильно зависит от энергии и от типа ядра. Однако для основной реакции $\bar{\nu}_e p$ сечение хорошо известно.

Погрешности, связанные с использованными при моделировании массами материалов и геометрией детектора и экспериментального зала, дают вклад не больше 12 % в систематическую ошибку полученных результатов.

Как показывает опыт, результат также в некоторой степени зависит от используемой версии Geant4 [28]. Это связано с деталями физики и параметрами процессов, включаемыми разработчиками в версии программных пакетов. В наших расчетах использовалась версия Geant4 10.3.0.

Основная неопределенность связана с используемыми характеристиками нейтринной вспышки, а именно: полной энергией вспышки (порядка 10^{53} эрг), предположением о сферической симметрии излучения нейтрино, энергетическими характеристикам потоков нейтрино и т.д. В реальном случае SN1987A они могут отличаться от используемых в расчете. Однако частично эта неопределенность может быть скорректирована в зависимости от подразумеваемой модели сверхновой: например, использование другой полной энергии приводит просто к перенормировке полученных чисел импульсов в установке и т.д.

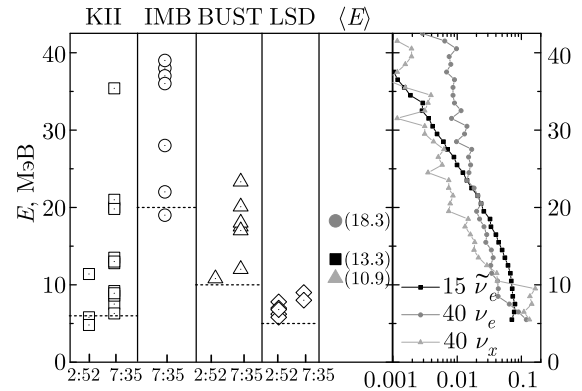


Рис. 11. (В цвете онлайн) Компиляция экспериментальных данных по четырем установкам. Квадраты — KII, кружки — IMB, треугольники — БПСТ, ромбы — LSD. Показаны только значения зарегистрированных энергий. Для всех установок, кроме IMB, первый набор данных соответствует времени 2:52 UT, второй — 7:35 UT

7. ОБСУЖДЕНИЕ

Перейдем к обсуждению полученных результатов и сравнению их с экспериментальными данными. Для этих целей мы воспользуемся рис. 11.

На рис. 11 приведена компиляция экспериментальных данных по четырем установкам [57]: квадраты — KII, кружки — IMB, треугольники — БПСТ, ромбы — LSD. Показаны только значения зарегистрированных энергий. Для всех установок, кроме IMB, первый набор данных соответствует времени (примерно) 2:52 UT, второй — 7:35 UT. IMB не «увидел» первый сигнал, в отличие от остальных детекторов (см. обсуждение ситуации с непризнанием реальности первого сигнала в [8]). Также показаны спектры энерговыделений в LSD согласно нашим расчетам (по рис. 8–10) и соответствующие средние энергии $\langle E \rangle$ (в скобках показано числовое значение в МэВ). Горизонтальными штриховыми линиями показан уровень порога для каждого детектора. Здесь уместно напомнить об известной условности понятия порога регистрации.

Во время второго сигнала в 7:35 количество событий в LSD было равно 2, что прекрасно согласуется с вычисленным нами значением для стандартного коллапса (антинейтрино 15 МэВ) — 1.92 (табл. 8).

Во время первого сигнала ни один детектор, кроме LSD, не был способен зарегистрировать сигнал от электронных нейтрино [12]. Тот факт, что KII и БПСТ все же что-то «увидели» (рис. 11) говорит о том, что небольшая примесь электронных антинейтрино низких энергий в первом сигнале была (на IMB

не было ни одного импульса в силу высокого, порядка 20 МэВ порога). Это значит, что один из пяти импульсов в LSD мы также можем отнести за счет регистрации IBD-реакции, именно тот, который (единственный) сопровождался характерной сигнатурой этого события, см. табл. 3. Мы приписываем нейтрино, породившему этот импульс, энергию 15 МэВ, исходя из спектра энерговыделений в КП и БПСТ, а также факту отсутствия сигнала в IMB (рис. 11).

Теперь рассмотрим основной ингредиент ротационной модели — электронные нейтрино высоких (40 МэВ) энергий. Мы видим, что комбинация числа импульсов по заряженным (2.6) и нейтральным (0.41) токам дает 3 события, что, с учетом всех имеющих неопределенностей, замечательно совпадает с числом $5 - 1 = 4$ импульсов от электронных нейтрино. Мюонные и тау-нейтрино 40 МэВ в момент первого сигнала в модели вращающегося коллапсара могут происходить из электронных нейтрино благодаря осцилляциям.

Итак, комбинация событий в момент первого сигнала в LSD может выглядеть как

$$5 = 1(15 \text{ МэВ } \bar{\nu}_e) + 1(40 \text{ МэВ } \nu_x) + 3(40 \text{ МэВ } \nu_e). \quad (6)$$

Естественно, это лишь один из возможных вариантов, хотя, по-видимому, самый вероятный: мы не можем увеличить долю и энергию в $\bar{\nu}_e$, иначе другие детекторы должны были бы зарегистрировать гораздо больше импульсов. Реакции же по нейтральным токам дают слишком малое количество событий вследствие малого сечения.

Однако в значениях измеренных энергий событий мы видим главную проблему: все энерговыделения в LSD (как в первом, так и во втором сигнале) лежат в узком диапазоне от 5 МэВ (порог) до примерно 9 МэВ. Рассчитаем вероятность, что все пять импульсов рассмотренной выше комбинации (6) попали в этот диапазон, используя табл. 8:

$$P(5) = 0.379 \cdot 0.69 \cdot (0.371)^3 \approx 0.013. \quad (7)$$

Обратившись к рис. 11, мы видим, что сигнал в LSD действительно выбивается из общего ряда. Во всех остальных детекторах распределение импульсов по энергиям широкое, как и должно быть (см. средние ожидаемые энергии импульсов в LSD на том же рисунке). Мы видим, что сигнал в LSD не согласуется ни с вычисленными спектрами энерговыделений (рис. 8–10), ни с энергиями импульсов в других детекторах. Все 5 импульсов первого сигнала в LSD имеют низкие энергии (см. также табл. 3), но для объяснения их количества требуются потоки нейтрино (ν_e и/или $\nu_{\mu,\tau}$) высоких энергий (напом-

ним, что сечение взаимодействия нейтрино с веществом растет с увеличением энергии примерно как $\sigma_\nu \sim E_\nu^2$).

Можно допустить ошибку в энергетической калибровке счетчиков LSD, в результате которой амплитуда импульса будет занижаться минимум вдвое. Это могло бы объяснить энергетический спектр импульсов в LSD, явно выбивающийся как из спектра других детекторов, так и из предсказаний наших расчетов. Однако такое объяснение входит в противоречие с согласием экспериментального и расчетного спектров энергопотерь мюонов (от 40 до 400 МэВ) в счетчике, а также с соответствием калибровки по пикам 2.2 МэВ (γ -кванты от np -захватов) и 9 МэВ (γ -кванты от nNi -захватов). К сожалению, уже нельзя проверить калибровку LSD в интересующем нас диапазоне (10–40) МэВ (например, это можно было бы сделать с помощью системы калибровки LINAC, использующейся в Супер-Камиоканде [58]), так как детектор LSD был разобран в 1998 г.

Близость амплитуд импульсов LSD к порогу регистрации ~ 7 МэВ может говорить о «фоновом» происхождении сигнала. Связь изменения фона эксперимента (числа распадов радионуклидов в окружающем установку грунте и материалах детектора) со вспышкой SN1987A обсуждается в работе [59].

Тем не менее остаются факты, которые подтверждают высокую значимость сигнала LSD:

- среди сигналов-кандидатов LSD на регистрацию ν -вспышки, выделенных за 14 лет работы, этот сигнал имеет наименьшую вероятность имитации фоном [60];

- вероятность случайного совпадения сигнала LSD со вспышкой SN1987A экстремально низкая, меньше $1.4 \cdot 10^{-6}$ [61, 62];

- сигнал LSD входит в центральную часть уникального и необъяснимого 6-часового события в интервале приблизительно от 1 до 7 часов UT 23.02.1987, образуемого совокупностью экспериментальных данных четырех нейтринных детекторов и двух детекторов гравитационных волн в Риме и Мэриленде, работавших во время вспышки SN1987A [59, 61].

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные нами величины в ряде аспектов носят ориентировочный характер. Тем не менее на основании детального моделирования взаимодействий нейтрино от гравитационного коллапса звездного ядра с веществом установки LSD и окружающего ее грунта мы можем сделать следующие заключения.

Во-первых, моделирование показало, что в рамках ротационного механизма взрыва сверхновой действительно можно получить количество зарегистрированных LSD импульсов как в момент первой вспышки 2:52 UT, так и в момент второй 7:35 UT. Однако энергетические характеристики обеих групп импульсов не соответствуют вычисленным ожидаемым спектрам энерговыделений и данным других детекторов.

Во-вторых, предположение, высказанное в работе [13], о том, что сигнал в LSD в 2:52 UT может быть вызван нейтронами, порождаемыми потоками нейтрино в окружающей установку грунте, не проходит количественную проверку. Как показали наши расчеты, спектры таких импульсов действительно чрезвычайно похожи на данные LSD. Однако их количество ничтожно мало для всех рассмотренных параметров нейтринного излучения.

Выше нами представлено несколько возможных объяснений этому. Объяснения, которое бы удовлетворяло всем данным, как экспериментальным, так и теоретическим, в настоящее время не существует. Тем не менее мы надеемся, что представленные здесь результаты послужат важным этапом в многолетних попытках выяснить природу уникального сигнала в детекторе LSD, совпадающего по времени со вспышкой сверхновой SN1987A.

Благодарности. Работа была выполнена в 2019 г. и практически закончена в начале 2020 г., до кончины наших соавторов А. С. Мальгина и О. Г. Рязжской. Их вклад в эту работу авторы считают определяющим и с благодарностью посвящают статью их памяти.

Авторы благодарят за полезные обсуждения и искренний интерес к этой работе В. С. Имшенника, а также Д. К. Надёжина, которого тоже уже нет с нами.

Авторы благодарны рецензенту, чьи замечания значительно способствовали улучшению текста статьи.

Финансирование. Работа А. Ю. поддержана Российским научным фондом (грант № 21-12-00061).

ЛИТЕРАТУРА

1. IAUC 4316: 1987A, N. Cen. 1986, February 24, 1987.
2. M. Aglietta et al., *Europhys. Lett.* **3**, 1315 (1987).
3. E. N. Alekseev et al., *Sov. Phys. JETP Lett.* **45**, 461 (1987).
4. R. M. Bionta et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1494 (1987).
5. K. Hirata et al., *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1490 (1987).
6. Я. Б. Зельдович, О. Х. Гусейнов, *ДАН СССР* **162**, 791 (1965).
7. W. D. Arnett, *Can. J. Phys.* **44**, 2553 (1966).
8. A. De Rujula, *Phys. Lett. B* **193**, 514 (1987).
9. V. S. Berezhinsky, C. Castagnoli, V. I. Dokuchaev, and P. Galeotti, *Nuovo Cim. C* **11**, 287 (1988).
10. V. S. Imshennik, *Space Sci. Rev.* **74**, 325 (1995).
11. A. Drago and G. Pagliara, *Eur. Phys. J. A* **52**, 41 (2016).
12. В. С. Имшенник, О. Г. Рязжская, *Письма в Астрон. ж.* **30**, 17 (2004).
13. S. Yen, TRIUMF Vancouver, Canada (talk 18-Apr 2017).
14. V. S. Imshennik and V. O. Molokanov, *Astron. Lett.* **35**, 799 (2009).
15. V. S. Imshennik and V. O. Molokanov, *Astron. Lett.* **36**, 721 (2010).
16. G. Badino et al., *Nuovo Cim. C* **7**, 573 (1984).
17. G. Battistoni et al., *Phys. Lett. B* **133**, 454 (1983).
18. A. Porta, PhD Thesis, Torino Univ. (2005), p. 159.
19. В. Л. Дадькин, Г. Т. Зацепин, В. Б. Корчагин и др., *Письма в ЖЭТФ* **45**, 464 (1987).
20. M. Aglietta et al., in *Vulcano 1988, Proceedings, Frontier Objects in Astrophysics and Particle Physics* (1989), Vol. 19, pp. 103–120.
21. IAUC 4323: 1987A February 24, 1987.
22. J. M. LoSecco, *Proc. of the Second Int. Symposium UP-87*, Baksan, USSR, 1987, Nauka, Moscow (1988), p. 100.
23. J. M. LoSecco, *Phys. Rev. D* **39**, 1013 (1989).
24. A. Malgin, *Nuovo Cim. C* **21**, 317 (1998).
25. Н. Ю. Агафонова, А. С. Мальгин, В. Фульджионе, *ЖЭТФ* **144**, 301 (2013).
26. V. N. Ivanchenko (for Geant4 Collab.), *Nucl. Instr. Meth. A* **502**, 666 (2003).
27. К. В. Мануковский и др., *ЯФ* **79**(3), 1 (2016).
28. К. В. Manukovskiy et al., *Proc. of the 16th Lomonosov Conf.* (2015), p. 72.

29. A. Burrows and T. A. Thompson, in *Stellar Collapse. Astrophysics and Space Science Library*, ed. by C. L. Fryer, Vol. 302, Springer, Dordrecht (2004).
30. P. Vogel, Phys. Rev. D **29**, 9 (1984).
31. A. Strumia and F. Vissani, Phys. Lett. B **564**, 42 (2003).
32. T. Yoshida, T. Suzuki, S. Chiba et al., Astrophys. J. **686**, 448 (2008).
33. H. Dapo and N. Paar, Phys. Rev. C **86**, 035804 (2012).
34. E. Kolbe, K. Langanke, and P. Vogel, Nucl. Phys. A **652**, 91 (1999).
35. T. Suzuki, J. Phys.: Conf. Ser. **321**, 012041 (2011).
36. M. Fukugita, Y. Kohayama, and K. Kubodera, Phys. Lett. B **212**, 2 (1988).
37. E. Kolbe, K. Langanke, and P. Vogel, Phys. Rev. D **66**, 013007 (2002).
38. T. Kuramoto, M. Fukugita, Y. Kohyama, and K. Kubodera, Nucl. Phys. A **512**, 711 (1990).
39. W. C. Haxton, Phys. Rev. D **36**, 8 (1987).
40. R. Lazauskas and C. Volpe, Nucl. Phys. A **792**, 219 (2007).
41. B. D. Anderson, A. Fazely, R. J. McCarthy et al., Phys. Rev. C **27**, 4 (1983).
42. I. Stetcu and C. W. Johnson, Phys. Rev. C **69**, 024311 (2004).
43. Y. Fujita, H. Akimune, I. Daito et al., Phys. Rev. C **59**, 1 (1999).
44. C. Luttge, P. Neumann-Cosel et al., Phys. Rev. C **53**, 127 (1996).
45. B. D. Anderson, N. Tamimi et al., Phys. Rev. C **43**, 1 (1991).
46. I. Petermann, G. Martinez-Pinedo, K. Langanke, and E. Caurier, Eur. Phys. J. A **34**, 319 (2007).
47. K. Langanke, G. Martinez-Pinedo, P. von Neumann-Cosel, and A. Richter, Phys. Rev. Lett. **93**, 202501 (2004).
48. K. Muto and H. Horie, Nucl. Phys. A **440**, 254 (1985).
49. J. Nabi, R. Shehzadi, and M. Fayaz, Astrophys. Space Sci. **361**, 95 (2016).
50. N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **35**, 014058 (2008).
51. J. Toivanen, E. Kolbe, K. Langanke, G. Martinez-Pinedo, and P. Vogel, Nucl. Phys. A **694**, 395 (2001).
52. A. Bandyopadhyay, P. Bhattacharjee, S. Chakraborty, K. Kar, and S. Saha, Phys. Rev. D **95**, 065022 (2017).
53. E. Caurier, K. Langanke, G. Martinez-Pinedo, and F. Nowacki, Nucl. Phys. A **653**, 439 (1999).
54. A. Juodagalvis, K. Langanke, G. Martinez-Pinedo et al., Nucl. Phys. A **747**, 87 (2005).
55. E. Kolbe and K. Langanke, Phys. Rev. C **63**, 025802 (2001).
56. O. G. Ryazhskaya and S. V. Semenov, Phys. Atom. Nucl. **81**, 262 (2018).
57. В. Л. Дадькин, Г. Т. Зацепин, О. Г. Рязжская, УФН **158**, 1 (1989).
58. J. Migenda, PhD Thesis, Univ. of Sheffield, arXiv: 2002.01649.
59. N. Agafonova, A. Malgin, and E. Fischbach, arXiv: 2107.00265 [nucl-ex].
60. О. Г. Рязжская, УФН **176**, 1039 (2006).
61. P. Galeotti and G. Pizzella, Eur. Phys. J. C **76**, 426 (2016).
62. M. Aglietta et al., Nuovo Cim. C **14**, 171 (1991).

СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАСТАБИЛЬНЫХ ФАЗ $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$

В. А. Дудников^а, *С. Н. Верещагин*^б, *Л. А. Соловьёв*^б, *С. Ю. Гаверилкин*^с,
А. Ю. Цветков^с, *М. В. Ситников*^а, *Ю. С. Орлов*^{а,д*}

^а *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^б *Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^с *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

^д *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 19 ноября 2021 г.,
после переработки 6 декабря 2021 г.
Принята к публикации 6 декабря 2021 г.

Методом твердофазного синтеза получены поликристаллические сложные оксиды кобальта $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ с различным содержанием кислорода ($\delta = 0.26, 0.44, 0.46$). Увеличение дефицита по кислороду приводит к возникновению в структуре перовскита фазы браунмиллерита, что значительным образом влияет на их свойства. При $\delta = 0.46$ содержание фазы браунмиллерита достигает 38 %. Проведен сравнительный анализ магнитных и транспортных свойств синтезированных образцов. Асимптотическая температура Кюри меняет знак с положительного значения для $\delta = 0.26$ на отрицательную для $\delta = 0.46$. Магнитосопротивление для образца с $\delta = 0.46$ отрицательно и при $T = 10$ К составляет более 40 %. Температурные зависимости удельного электросопротивления соответствуют полупроводниковому типу, и в области низких температур абсолютные значения для образцов различаются почти в 10 раз.

DOI: 10.31857/S004445102203004X

1. ВВЕДЕНИЕ

Начиная с работ [1, 2], сложные оксиды кобальта с общей формулой $\text{Ln}_{1-x}\text{M}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ (Ln — лантаноиды, М — щелочноземельные металлы) являются объектом активных исследований в течение последних десятилетий. Являясь системами с сильными электронными корреляциями, они представляют значительный интерес с точки зрения фундаментальной науки. Изменение концентрации щелочноземельного элемента и кислородных вакансий приводит к различным зарядовым, спиновым состояниям и различному локальному окружению ионов кобальта. Отличие этих соединений от других слож-

ных оксидов переходных металлов заключается в близости энергии двух конкурирующих взаимодействий: энергии кристаллического поля и энергии связи Хунда, что приводит к флуктуациям мультиплетности (данный термин был впервые использован в работе [3]) и необычным магнитным свойствам [4–6].

С другой стороны, потенциальное использование в качестве катодных материалов в твердооксидных топливных ячейках (SOFC) [7–9] мембран со смешанной ионно-электронной проводимостью для улавливания CO_2 при производстве энергии из ископаемого топлива [10, 11], катализаторов с высоким содержанием кислородных вакансий в реакции выделения кислорода [12, 13], термоэлектрических преобразователей [14] является стимулом для поиска новых и улучшения свойств известных материалов на основе сложных оксидов кобальта.

* E-mail: jso.krasn@mail.ru

Соотношение ионных радиусов катионов в однофазных соединениях $\text{Ln}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ влияет на распределение ионов Sr^{2+} и Ln^{3+} в кристаллической решетке. При этом в зависимости от редкоземельного элемента меняются свойства, структура и возможность регулирования и упорядочения кислородных вакансий [15, 16]. В работах [17, 18] показано, что для элементов $\text{Ln} = \text{La-Nd}$ при всех температурах стабильна структура с полностью разупорядоченным распределением катионов $\text{Sr}^{2+}/\text{Ln}^{3+}$ по кристаллографическим А-позициям. Если радиус редкоземельного элемента меньше, чем у Nd^{3+} , при низких температурах стабильной является структура с упорядоченным расположением катионов Sr^{2+} , Ln^{3+} и анионных вакансий. В этом случае разупорядоченные перовскиты существуют при высокой температуре и могут быть получены в виде метастабильных фаз закаливанием высокотемпературных состояний [19, 20]. Для метастабильных образцов характерна высокая мобильность кислорода [21, 22], что влияет на их магнитные, транспортные и термодинамические свойства [23, 24] и каталитическую активность [19, 25]. Эти свойства стабильных соединений и их структура достаточно хорошо изучены [26, 27], в том числе и упорядоченного по А-позициям $\text{Dy}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ [28, 29], в то время как исследование свойств метастабильных соединений обычно сводится к образцам с одним фиксированным индексом кислородной нестехиометрии [30]. Между тем, содержание кислорода в этих соединениях может меняться в достаточно широком диапазоне.

Целью настоящей работы является более обширное и комплексное исследование метастабильных твердых растворов редкоземельных оксидов кобальта. Объектом исследования являются метастабильные твердые растворы $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ с различным содержанием кислорода. Основная задача заключается в установлении взаимосвязи между кислородной нестехиометрией, структурой, магнитными и транспортными свойствами.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Разупорядоченные поликристаллические образцы $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ были синтезированы по стандартной керамической технологии из стехиометрической смеси высокочистых оксидов Co_3O_4 , Dy_2O_3 и карбоната стронция SrCO_3 . После тщательного смешивания и измельчения смесь отжигалась при температуре 1100 °С в течение 24 ч на воздухе, после чего перетиралась, прессовалась в таблетки, кото-

рые спекались при температуре 1200 °С в течение 8 ч и закалялись до комнатной температуры со скоростью β более 30 °С/с. Полученные таким образом образцы были разделены на три части. Одна часть оставалась без изменения (SDC-q), другая подвергалась прогреву в трубчатой кварцевой печи в потоке гелия марки А (парциальное давление кислорода около 10 Па) при температуре 650 °С в течение 12 ч (восстановленный, SDC-q-He), оставшаяся часть образцов прогрета в кислороде высокой чистоты (содержание O_2 99.95 %) при $P_{\text{O}_2} \approx 10^5$ Па и температуре 650 °С в течение 14 ч (окисленный, SDC-q-O) или на воздухе $P_{\text{O}_2} \approx 0.2 \cdot 10^5$ Па (окисленный, SDC-q-air); образцы охлаждались до комнатной температуры в потоке соответствующего газа со скоростью $\beta = 2$ °С/мин. Для исследования транспортных свойств из полученных образцов вырезались бруски $5 \times 13 \times 1$ мм³.

Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализы проводились с помощью порошкового дифрактометра PANalyticalX'PertPRO (Нидерланды, CoK_α), съемка проводилась в интервале углов $2\theta = 10-140^\circ$. Уточнение кристаллической структуры проводилось по полному профилю дифрактограммы с применением метода Ритвельда [31] и минимизации производной разности (DDM) [32].

Термогравиметрия (ТГ) и дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК) и определение нестехиометрии проводились на анализаторе TG-DSCNETZSCHSTA 449C, оснащенный масс-спектрометром AeolosQMS 403C, в потоке смеси 20 % O_2 -Ar. Содержание кислорода в образцах рассчитывалось по величине потери массы (Δm , %) по методике, представленной в [33]. Измерения проводились в потоке смеси 5 % H_2 -Ar при нагревании до температуры 1173 К со скоростью 10 градусов в минуту. Погрешность определения δ составляет ± 0.01 . Расчет нестехиометрии перовскита в полифазной системе проводился из расчета состава браунмиллерита $(\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2})_2\text{Co}_2\text{O}_5$.

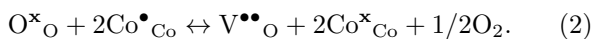
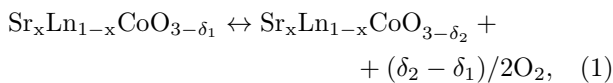
Измерения магнитных свойств и электросопротивления проводились в температурном диапазоне от 2 до 400 К на универсальной установке Physical Properties Measurement System (PPMS-9) Quantum Design (США), оснащенной специальными модулями для данных типов измерений, в центре коллективного пользования Физического института им. П. Н. Лебедева.

Таблица 1. Условия обработки, потеря массы при восстановлении Δm и показатель нестехиометрии δ перовскита $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{3-\delta}$ для образцов SDC, приготовленных различными способами. $n (Co^{n+})$ — зарядовое состояние ионов Co в перовските $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{3-\delta}$ с учетом фазового состава

Образец	Среда обработки	Условия обработки	Давление кислорода, Па	Δm , %	δ	$3 - \delta$	$n (Co^{n+})$
SDC-q	Воздух	Закалка от $T = 1473$ К	$0.2 \cdot 10^5$	-11.676	0.43	2.57	2.94
SDC-q-air [22]	Воздух	Закалка, выдержка при $T = 773$ К	$0.2 \cdot 10^5$	-12.641	0.28	2.72	3.24
SDC-q-He	Гелий	Закалка, выдержка при $T = 923$ К	10	-11.537	0.45	2.55	2.90
SDC-q-O	Кислород	Закалка, выдержка при $T = 923$ К	$1.0 \cdot 10^5$	-12.720	0.26	2.74	3.26

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Известно, что Sr-содержащие кобальтиты редкоземельных металлов $Sr_xLn_{1-x}CoO_{3-\delta}$ со структурой перовскита при нагреве/охлаждении обратимо теряют/поглощают кислород в соответствии с уравнениями (1), (2) [20, 22, 34]:



К аналогичному результату приводит изменение парциального давления кислорода при постоянной температуре. Поэтому стехиометрия кобальтита (т.е. величина δ) сильно зависит от его предыстории — времени пребывания образца в атмосфере с заданным парциальным давлением кислорода при определенной температуре. Ранее нами было показано, что медленное охлаждение $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{3-\delta}$ от температуры 1473 К на воздухе формирует образец, равновесный (стационарный) относительно давления $P_{O_2} \approx 0.2 \cdot 10^5$ Па со стехиометрией $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{2.72}$ (SDC-q-air) [22]. В случае дополнительных обработок (в кислороде, инертном газе, закалка) содержание кислорода в полученных образцах будет отличаться от стационарного образца (табл. 1), и, соответственно, их стабильность при нагревании также будет различной. По данным терми-

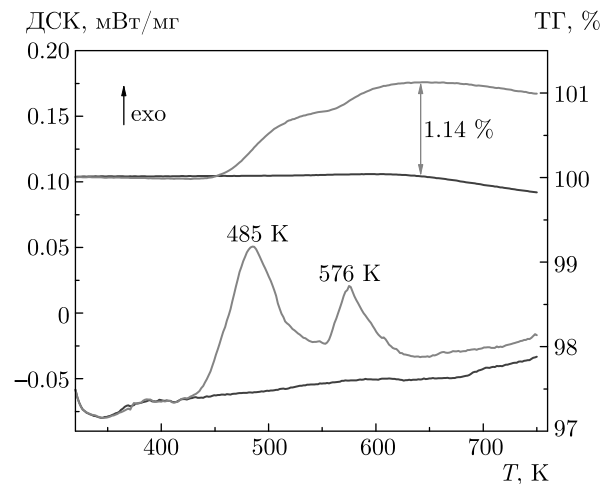


Рис. 1. ТГ- и ДСК-кривые окисления образцов SDC-q-O (синие кривые) и SDC-q (красные). Смесь 20% O_2 -Ar, $\beta = 10^\circ/\text{мин}$

ческого анализа SDC-q-air ($Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{2.72}$) стабилен до температур около 650 К при нагревании в потоке смеси с $P_{O_2} = 0.2 \cdot 10^5$ Па; при более высоких температурах наблюдался процесс выделения кислорода, сопровождающийся потерей массы (рис. 1, синяя кривая); аналогично вел себя образец SDC-q-O $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{2.73}$.

Поведение образцов SDC-q и SDC-q-He отличалось от поведения образцов, подвергнутых обра-

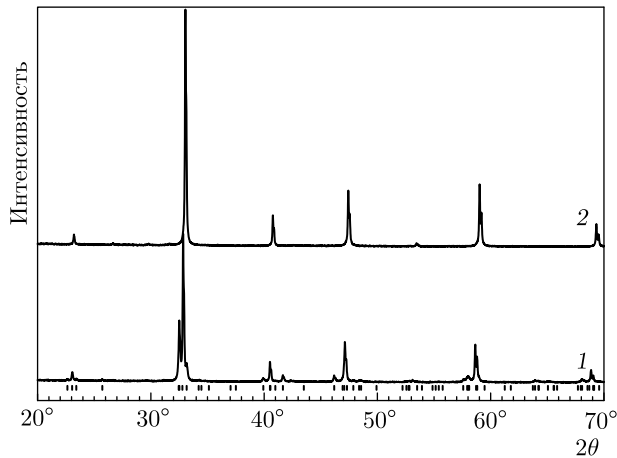


Рис. 2. Порошковая рентгеновская дифракция образцов SDC-q-He (1) и SDC-q-O (2). Положение пиков фазы $(\text{Sr,Dy})_2\text{Co}_2\text{O}_5$ отмечены тиками

ботке в окислительных условиях. При нагревании в смеси 20% O_2 -Ar ($P_{\text{O}_2} \approx 0.2 \cdot 10^5$ Па) уже с температуры 425 К наблюдалось заметное поглощение O_2 , которое протекало в две четко выраженные стадии при температурах 425–550 К и 550–650 К (рис. 1, красная кривая). Сложный характер окисления SDC-q и SDC-q-He указывает на существенную неоднородность стабильности катионов кобальта в структуре, что, в свою очередь, может быть связано с фазовой неоднородностью образцов.

Рентгеноструктурный анализ показал (рис. 2), что образцы SDC-q-air и SDC-q-O представляют собой нестехиометрический кубический перовскит (P) с разупорядоченным распределением кислородных вакансий, в то время как в закаленном SDC-q и обработанном в гелии SDC-q-He наряду с кубическим перовскитом присутствует фаза браунмиллерита $(\text{Sr,Dy})_2\text{Co}_2\text{O}_5$ (B) с упорядоченным расположением вакансий в кислородной подрешетке (рис. 3), причем в SDC-q-He ее содержание существенно выше; обнаружены также следовые количества CoO. Количественный фазовый состав образцов и кристаллографические параметры фаз (P) и (B) представлены в табл. 2.

Стабилизация содержания кислорода в образцах SDC-q-He и SDC-q (дополнительный отжиг на воздухе при $T \leq 1123$ К (850 °C)) приводил к исчезновению фазы браунмиллерита и образованию кубического перовскита $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$, стехиометрия которого зависела от температуры, но структура оставалась неизменной после циклов нагрев-охлаждение. Таким образом, все образцы SDC относительно стабильны на воздухе до температур 400–425 К.

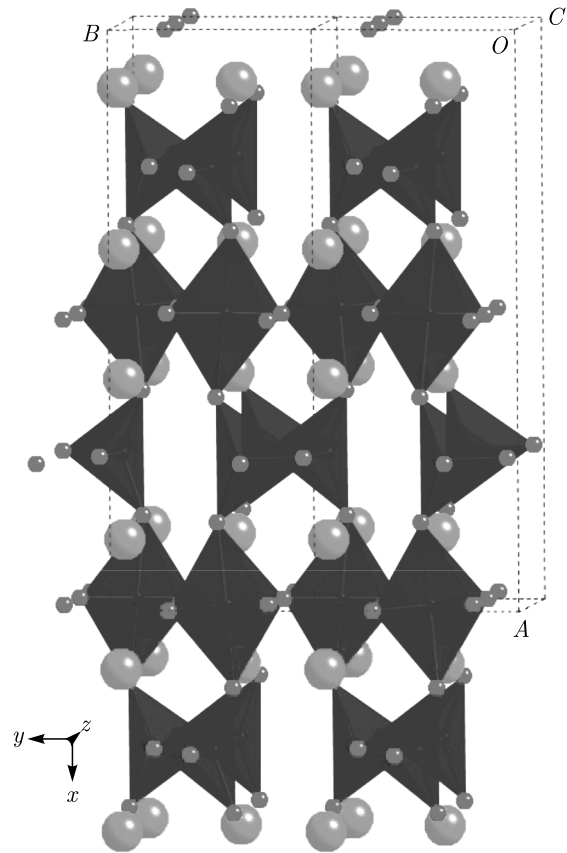


Рис. 3. Схематическое изображение структуры фазы браунмиллерита с упорядоченным расположением кислородных вакансий. Октаэдры и пирамиды соответствуют катионам Co, красные сферы соответствуют положению анионов O^{2-} , зеленые — позициям катионов Sr^{2+} и Dy^{3+}

SDC-q-air и SDC-q-O, подвергавшиеся обработке в окислительной среде, содержат практически чистый кубический перовскит, а SDC-q-He и SDC-q являются полифазными метастабильными смесями перовскита (P) и браунмиллерита (B).

Ранее было показано, что система $\text{SrCoO}_{3-\delta}$, не содержащая катионов редкоземельных элементов, при $T > 1193$ К (920 °C) существует в виде кубического нестехиометрического перовскита. Закалка от $T = 1473$ К в восстановительной атмосфере сохраняла кубическую структуру со стехиометрией $\text{SrCoO}_{2.29}$ [35]. Закалка от $T = 1473$ К (1200 °C) на воздухе в жидкий азот приводила к формированию метастабильного орторомбического браунмиллерита $o\text{-Sr}_2\text{Co}_2\text{O}_5$ [36], который при нагреве на воздухе выше температур 926 К (653 °C) переходил в стабильную гексагональную перовскитоподобную фазу. В нашем случае добавка катиона Dy^{3+} приводила к стабилизации кубического разупорядоченного перовскита.

Таблица 2. Кристаллографические параметры и содержание фаз в образцах SDC

Образец	Перовскит $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$		Браунмиллерит $(\text{Sr,Dy})_2\text{Co}_2\text{O}_5$			CoO	
	вес. %	a , Å	вес. %	a, b, c , Å		вес. %	
SDC-q-He	61	3.8539(1)	38	15.7156(6)	5.5146(6)	5.4017(4)	1.0
SDC-q-O	~ 100	3.8311(1)					
SDC-q-air [22]	100	3.82955(6)					
SDC-q	83	3.8558(1)	15.5	15.716(5)	5.511(3)	5.402(1)	1.5

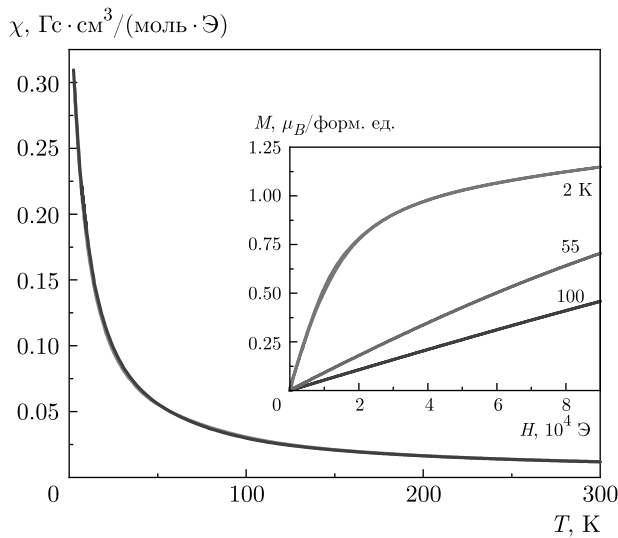


Рис. 4. Температурные зависимости статической магнитной восприимчивости $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.58}$ (SDC-q) в режимах ZFC (красная кривая) и FC (синяя) в поле $5 \cdot 10^3$ Э. На вставке показаны изотермы намагниченности при различных температурах

порядоченного перовскита $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ при закалке на воздухе и к снижению стабильности фазы $\text{o}-(\text{Dy}_{0.2}\text{Sr}_{0.8})_2\text{Co}_2\text{O}_5$ (B), который начинал превращаться уже выше температуры 450 K, причем вместо гексагональной модификации при окислении формировался кубический разупорядоченный перовскит $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$.

На рис. 4 представлены температурные зависимости статической магнитной восприимчивости $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.58}$ (SDC-q), закаленного от температуры синтеза. Зависимости $\chi(T)$, полученные в режимах ZFC (охлаждение в нулевом магнитном поле) и FC (охлаждение в магнитном поле) в поле $5 \cdot 10^3$ Э, совпадают во всем исследуемом температурном диапазоне. С ростом температуры магнитная восприимчивость монотонно убывает, аномалии

в поведении отсутствуют. Отсутствие петель гистерезиса на изотермах намагниченности (рис. 4, вставка) свидетельствует об отсутствии ферромагнитного упорядочения.

На рис. 5 представлены температурные зависимости магнитной восприимчивости и полевые зависимости для $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.56}$ (SDC-q-He) и $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.74}$ (SDC-q-O) в поле $5 \cdot 10^3$ Э. Несмотря на слабое различие в показателе кислородной нестехиометрии ($\delta = 0.42$ для SDC-q и $\delta = 0.44$ для SDC-q-He), магнитные свойства восстановленного образца SDC-q-He существенным образом отличаются от свойств образца SDC-q, который не подвергался дополнительной обработке.

На вставках к рис. 4 и рис. 5 показаны зависимости $M(H)$ при различных температурах в полях до $9 \cdot 10^4$ Э. При $T = 2$ K для всех образцов насыщения не наблюдается.

На рис. 6a зависимости $\chi(T)$ представлены в температурном диапазоне от 25 до 200 K и измерены в поле $5 \cdot 10^3$ Э. Для SDC-q-He в режиме ZFC характерна ярко выраженная аномалия в виде горба с максимумом при температуре 75 K (рис. 6a). Вблизи этой температуры на полевых зависимостях магнитного момента наблюдается петля гистерезиса (рис. 5a, вставка). Для удобства показана только часть петли гистерезиса в первой четверти плоскости $M-H$.

Для образца SDC-q-O ярко выраженный горб отсутствует, однако формируется плечо и наблюдается расхождение в режимах ZFC и FC.

С уменьшением поля максимумы на зависимостях $M(T)$ смещаются в область более высоких температур (рис. 7). Внимательный анализ температурных зависимостей магнитной восприимчивости показал, что для SDC-q-He температура перехода в парамагнитное состояние ($T_C = 195$ K) не совпадает с температурой расхождения T_{div} зависимостей $M(T)$ в режимах FC и ZFC, в то время как для

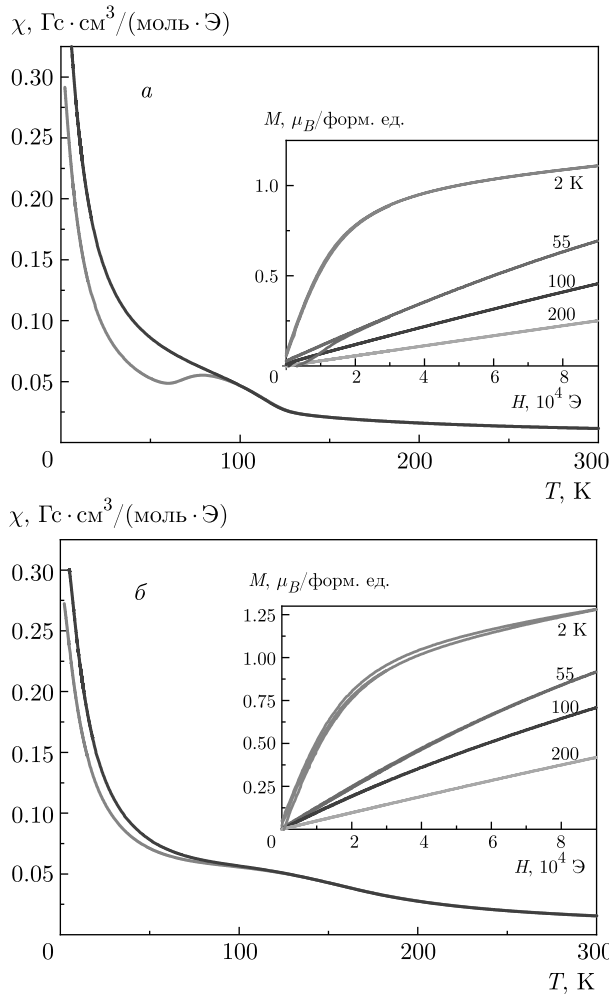


Рис. 5. Температурные зависимости статической магнитной восприимчивости $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.56}$ (SDC-q-He) (а) и $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.74}$ (SDC-q-O) (б) в режимах ZFC (красные кривые) и FC (синие) в поле $5 \cdot 10^3 \text{ Э}$. На вставках показаны изотермы намагниченности при различных температурах

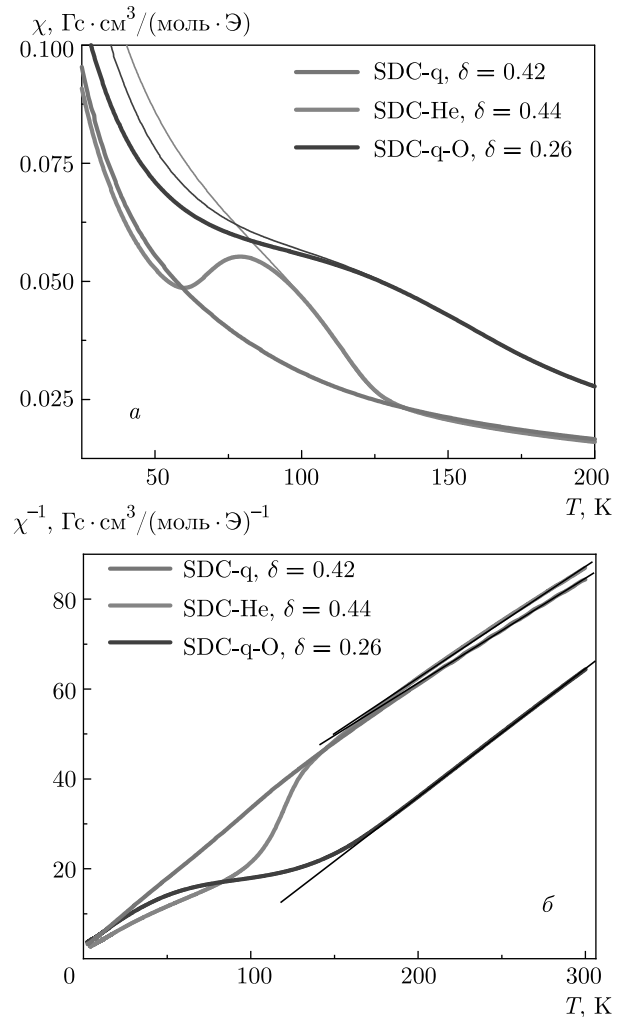


Рис. 6. Температурные зависимости статической магнитной восприимчивости образцов $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ в режимах ZFC (толстые линии) и FC (тонкие линии) в поле $5 \cdot 10^3 \text{ Э}$ в диапазоне от 25 до 200 К (а) и обратной магнитной восприимчивости в диапазоне от 2 до 300 К (б). Прямыми черными линиями на рис. б показаны аппроксимации по закону Кюри–Вейсса

SDC-q-O совпадает, $T_C = T_{div} = 165 \text{ К}$. В качестве температуры фазового перехода ферромагнетик–парамагнетик взята температура отклонения температурной зависимости обратной магнитной восприимчивости от прямой линии (рис. 6б), соответствующей закону Кюри–Вейсса $\chi = C / (T - T_C)$, где $C = \mu_{eff}^2 N_A / 3k_B$ (N_A – число Авогадро, k_B – постоянная Больцмана) и T_C – соответственно постоянная Кюри и температура Кюри.

Хорошая аппроксимация прямой линией температурных зависимостей обратной магнитной восприимчивости (рис. 6б) позволяет определить асимптотические температуры Кюри, постоянные Кюри и оценить эффективные магнитные моменты образцов на формульную единицу. Температуры

T_C , T_{div} , асимптотические температуры Кюри T_{as} , константы Кюри и эффективные магнитные моменты для образцов SDC-q-He и SDC-q-O представлены в табл. 3.

Для определения природы магнитного состояния образца SDC-q-He (спиновое стекло или ферромагнетик) дополнительно были проведены измерения динамической восприимчивости при разных частотах ω , аналогично проведенным в работах [37,38]. На рис. 8а и 9а,б показаны температурные зависимости действительной части динамической восприимчивости $\chi'(T)$ на частотах 13, 113 и 1013 Гц, которые

Таблица 3. Температуры T_C , T_{div} , T_{as} , константы Кюри и эффективные магнитные моменты для образцов SDC-q-He и SDC-q-O

	δ	C , см ³ ·К/моль	μ_{eff} , μ_B	T_C , К	T_{max} , К ($H = 100$ Э)	T_{div} , К	T_{as} , К
SDC-q-He	0.44	4.0	5.66	195	110	125	-45
SDC-q-O	0.26	3.6	5.37	165	—	165	70

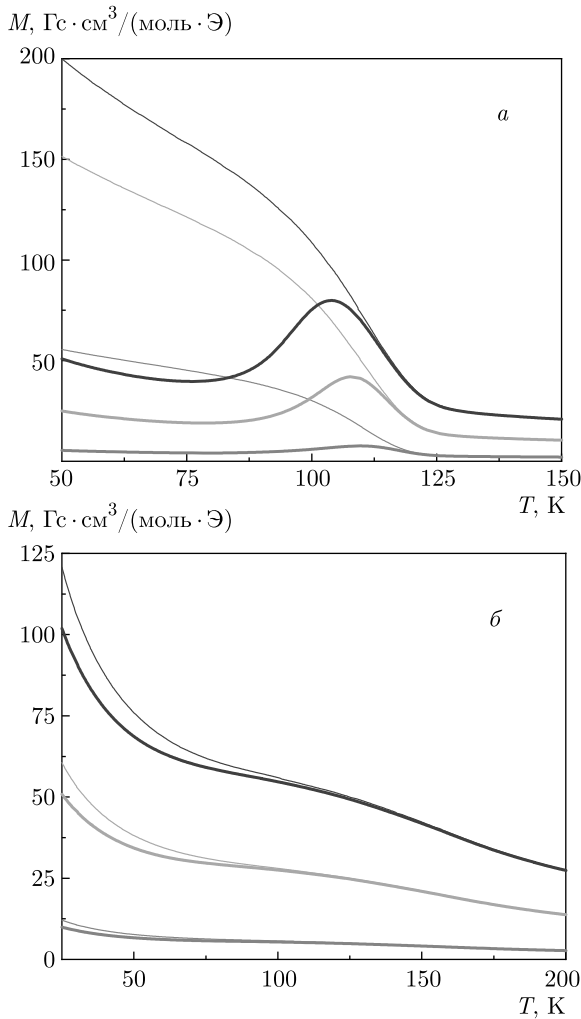


Рис. 7. Температурные зависимости намагниченности образцов $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{2.56}$ (SDC-q-He) (а) и $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{2.74}$ (SDC-q-O) (б) в режимах ZFC (толстые линии) и FC (тонкие линии) в полях сверху вниз: 100, 500 и 1000 Э

при понижении температуры демонстрируют выраженный максимум, за которым следует падение и последующее монотонное возрастание при $T \rightarrow 0$, связанное со значительным вкладом в магнетизм от парамагнитных ионов Dy^{3+} ($\mu_{eff}(Dy^{3+}) = 10.6\mu_B$).

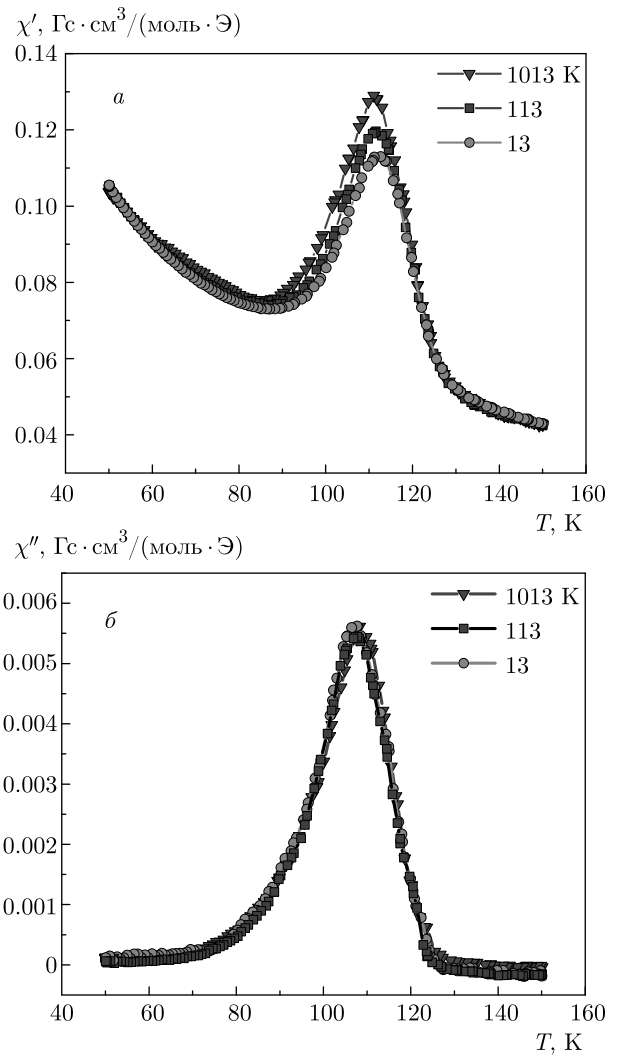


Рис. 8. Температурные зависимости действительной $\chi'(T)$ (а) и мнимой $\chi''(T)$ (б) частей динамической магнитной восприимчивости $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{2.56}$ (SDC-q-He) в переменном поле $H_{ac} = 2$ Э при различных частотах в отсутствие фиксированного поля, $H_{dc} = 0$

Отсутствие зависимости положения максимумов $\chi'(T)$ от частоты (рис. 8, 9) и несовпадение температур максимумов на зависимостях $\chi(T)$ и $\chi'(T)$ свидетельствует в пользу того, что магнитные свой-

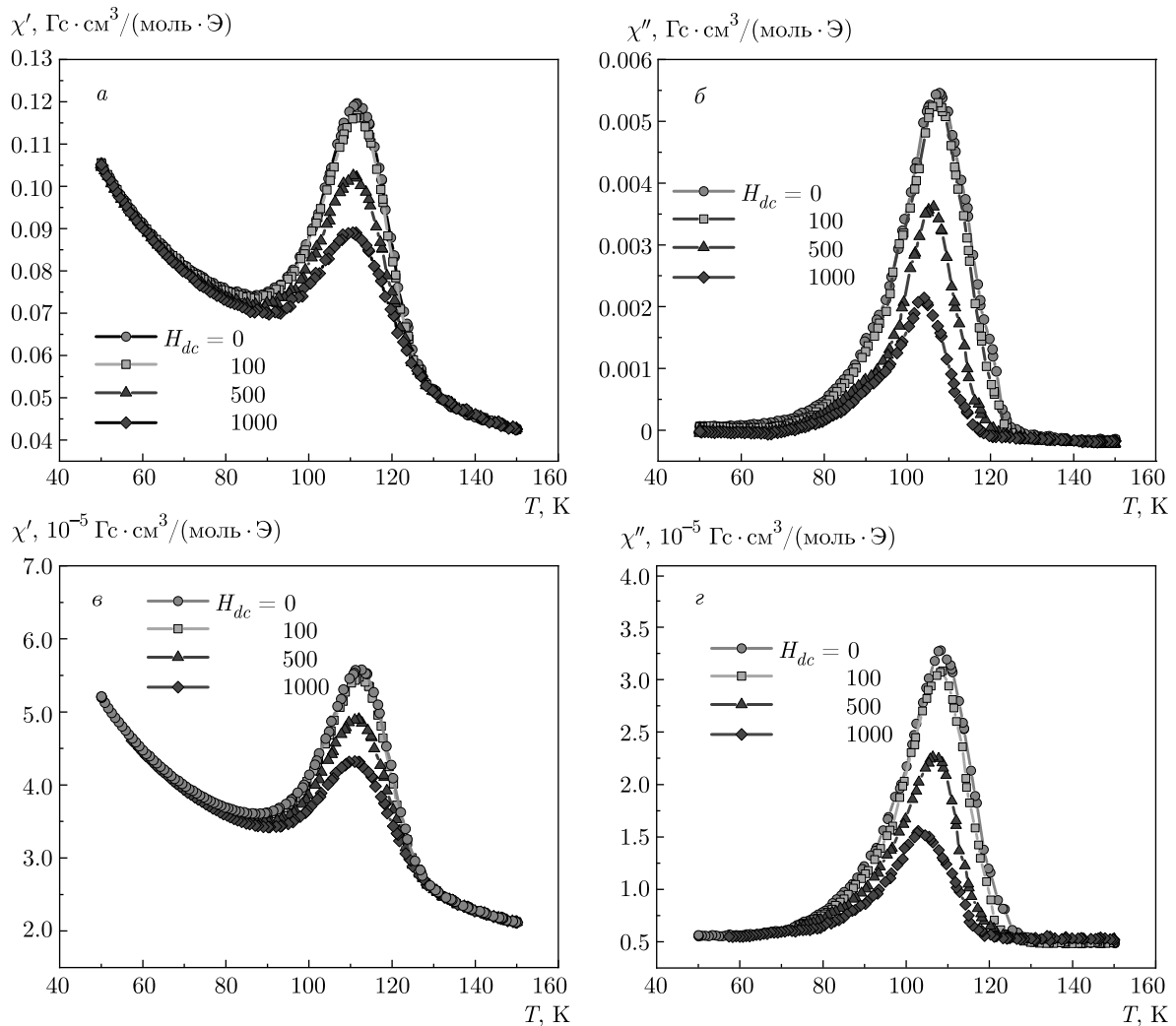


Рис. 9. Температурные зависимости действительной $\chi'(T)$ (а,в) и мнимой $\chi''(T)$ (б,г) частей динамической магнитной восприимчивости $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.56}$ (SDC-q-He) в переменном поле $H_{ac} = 2$ Э при частотах 113 и 1013 Гц и различных значениях фиксированного поля H_{dc}

ства SDC-q-He обусловлены формированием ферромагнитного состояния и доменной структуры внутри рассматриваемого образца. Стоит отметить, что в отличие от соединения $\text{Eu}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ [37], сдвиг максимумов на зависимостях $\chi'(T)$ не наблюдается (рис. 9а,в).

Косвенным признаком ферромагнитного упорядочения также является симметричность пиков на температурных зависимостях мнимой части динамической восприимчивости $\chi''(T)$ (рис. 8б). Температуры максимумов кривых $\chi''(T)$ (рис. 9б,г) для восстановленного SDC-q-He совпадают не с температурами расхождения кривых, полученных в режимах ZFC и FC, а с максимумами на зависимостях $M(T)$ (рис. 7а).

Измерение динамической магнитной восприимчивости для окисленного SDC-q-O при тех же условиях эксперимента, что и для SDC-q-He ($H_{ac} = 2$ Э, $\omega/2\pi = 13, 113, 1013$ Гц, $H_{dc} = 0, 100, 500, 1000$ Э) не позволило определить характер магнитного упорядочения в области аномального поведения $M(T)$ (рис. 7б) из-за малости полученного сигнала и большого уровня шумов.

Полевые зависимости магнитосопротивления образца, отожженного в кислороде $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.74}$ (SDC-q-O), представлены на рис. 10. В области гелиевых температур магнитосопротивление демонстрирует полевой гистерезис, который исчезает вблизи температуры 55 К, с повышением температуры магнитосопротивление уменьшается. Аналогичные за-

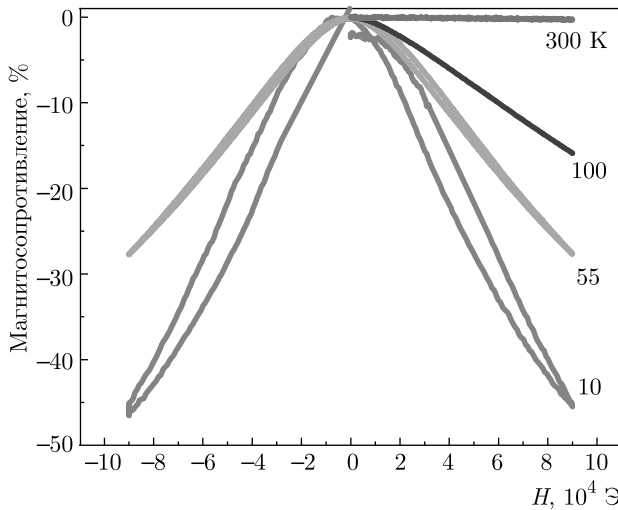


Рис. 10. Полевые зависимости магнитосопротивления окисленного образца $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{2.74}$ (SDC-q-O) при различных температурах

зависимости магнитосопротивления наблюдались для соединения $\text{La}_{0.45}\text{Ba}_{0.55}\text{CoO}_{2.8}$ [39]. Магнитосопротивление восстановленного образца SDC-q-He и закаленного SDC-q мало и фиксируется на уровне измерительных шумов, не превышая в максимуме 4%. Так же как и в [39], особенности в поведении магнитосопротивления в области максимумов на температурных зависимостях намагниченности для восстановленного SDC-q-He и выступов для окисленного SDC-q-O отсутствуют.

Измерения электрического сопротивления проводились в области температур от 50 до 400 К (рис. 11а). Для всех образцов наблюдается качественное соответствие температурных зависимостей удельного электросопротивления полупроводниковому типу ($d\rho/dT < 0$). Значение удельного электросопротивления вблизи $T = 50$ К для окисленного образца SDC-q-O почти на 10 порядков ниже сопротивления восстановленного SDC-q-He. Анализ зависимостей $\rho(T)$ (рис. 11б) показал, что в области низких температур поведение $\rho(T)$ подчиняется закону трехмерной прыжковой проводимости Мотта

$$\rho(T) = \rho_\infty \exp(T_0/T)^{1/n},$$

ρ_∞ — значение ρ при $T \rightarrow \infty$, $T_0 = \gamma_p \alpha^3 / N_F$, α — радиус локализации, N_F — плотность состояний на уровне Ферми, γ_p — численный коэффициент, $n = 4$ — показатель степени, соответствующий трехмерной прыжковой проводимости Мотта, для всех исследуемых образцов [40]. Отличительными особенностями образцов являются температуры

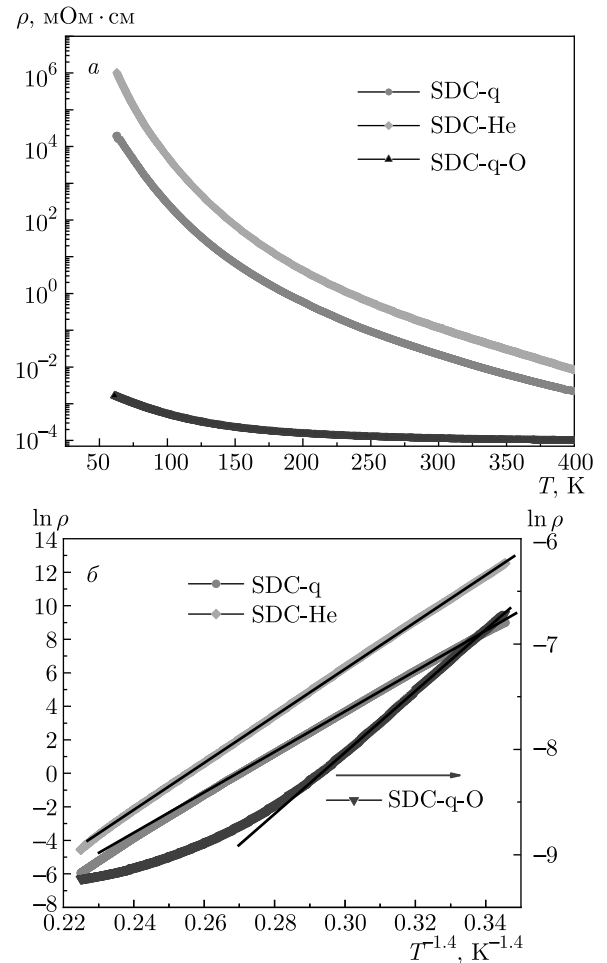


Рис. 11. Температурные зависимости удельного электросопротивления образцов $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$ (а) и обработка зависимостей $\rho(T)$ в координатах, соответствующих трехмерной прыжковой проводимости Мотта (б)

переходов T_a в состояния, описываемые стандартным термоактивационным законом

$$\rho(T) = \rho_\infty \exp(E_a/k_B T),$$

E_a — энергия активации прыжковой проводимости, k_B — постоянная Больцмана. Для образца SDC-q-O смена проводимости наблюдается уже при $T_a = 140$ К, в то время как для SDC-q-He прыжковая проводимость сохраняется вплоть до $T = 360$ К. Данное отличие связано с вкладом в проводимость образцов SDC-q-O ионов кислорода, который обусловлен их высокой подвижностью, характерной для метастабильных разупорядоченных образцов [22].

В заключение обсудим причину, обуславливающую столь разительное отличие магнитных свойств закаленных, восстановленных и окисленных образцов $\text{Sr}_{0.8}\text{Dy}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$. Прежде всего, отметим уста-

новленный факт сильной взаимосвязи кристаллической структуры замещенных твердых растворов редкоземельных оксидов кобальта и содержанием в них кислорода. Как видно из рентгеноструктурных данных и магнитных измерений, изменение кислородной нестехиометрии δ критическим образом влияет на содержание в образце различных фаз. В нашем случае изменение δ на 0.7% приводит к существенному изменению содержания фазы браунмиллерита. Этот факт необходимо учитывать при исследовании различных свойств твердых растворов редкоземельных оксидов кобальта и более щепетильно и аккуратно подходить к вопросу определения их кристаллической структуры, формирующейся в образцах в процессе различных оказываемых на них воздействий (закалки, окисления, восстановления и т. д.)

Из сравнения рис. 7а и 7б можно сделать вывод о том, что и в фазе браунмиллерита при $T_C = 113$ К, и в фазе кубического перовскита при $T_C = 170$ К имеет место переход в магнитоупорядоченное (по всей видимости, ферромагнитное) состояние. Поскольку в обоих случаях (рис. 7) мы наблюдаем рост намагниченности, полученной в режиме ZFC, ниже T_C с уменьшением температуры этот переход происходит в подсистеме ионов кобальта, при этом ионы диспрозия обуславливают парамагнитный вклад в намагниченность во всем исследуемом температурном диапазоне. Магнитный переход в фазе браунмиллерита происходит при более низкой температуре и более ярко выражен.

Из сравнения рис. 4 и 7 а можно сделать вывод о том, что в образце SDC-q фаза браунмиллерита содержится в виде отдельных несвязанных между собой кристаллических включений, что обуславливает в целом парамагнитное поведение SDC-q во всем исследуемом температурном диапазоне. В то же время в случае образца SDC-q-He, где содержание браунмиллерита достигает 40%, эта фаза формирует более крупные поликристаллические включения. Наличие таких анизотропных слоистых поликристаллических областей приводит к более заметному отличию ZFC- и FC-измерений намагниченности, чем в случае SDC-q-O и обуславливает смещение максимума ZFC-намагниченности в область низких температур с ростом напряженности магнитного поля. Действительно, связанная с анизотропией коэрцитивная сила увеличивается при понижении температуры, поэтому с ростом напряженности внешнего магнитного поля, стремящегося выстроить магнитные моменты вдоль направления поля, требуются все более низкие температуры для сопротивления

внешнему полю. Температура максимума определяется конкуренцией двух вкладов: энергии магнитных моментов в поле и энергии анизотропии. Критическая температура T_C , которую можно определить по максимуму производной dM/dT , не зависит от внешнего поля и определяется микроскопическими взаимодействиями внутри системы.

Для редкоземельных оксидов кобальта, легированных щелочноземельными металлами, очень часто встает вопрос о формировании в них состояния спинового стекла. Характерными признаками наличия спин-стекольного состояния являются расхождение ZFC- и FC-измерений намагниченности ниже характерной температуры T_{div} (необратимость измерений) и смещение максимума динамической магнитной восприимчивости в сторону высоких температур при увеличении частоты внешнего магнитного поля. В нашем случае для фазы браунмиллерита температура максимума χ' не зависит от частоты (рис. 8а) и напряженности внешнего постоянно магнитного поля (рис. 8б,в) и практически совпадает с критической температурой T_C . Температура максимума χ'' уменьшается с ростом напряженности внешнего стационарного магнитного поля (рис. 9б,в) вслед за уменьшением температуры максимума ZFC-измерений намагниченности. Различие ZFC- и FC-измерений можно объяснить наличием анизотропии и связанной с ней коэрцитивной силы. Таким образом, наблюдаемый при T_C магнитный переход в SDC-q-He является, по всей видимости, переходом в ферромагнитное состояние в подсистеме ионов кобальта.

4. ВЫВОДЫ

Проведенный сравнительный анализ свойств полученных методом твердофазного синтеза замещенных оксидов кобальта $Sr_{0.8}Dy_{0.2}CoO_{3-\delta}$ с различным содержанием кислорода ($\delta = 0.26, 0.44, 0.46$), показал, что увеличение дефицита по кислороду приводит к возникновению в структуре перовскита фазы браунмиллерита. При $\delta = 0.46$ содержание фазы браунмиллерита достигает 38%. При $\delta = 0.26$ образец имеет структуру разупорядоченного по А-позициям перовскита и разупорядоченными кислородными вакансиями. Асимптотическая температура Кюри меняет знак с положительного значения для $\delta = 0.26$ на отрицательную для $\delta = 0.46$. Магнитосопротивление для образца с $\delta = 0.46$ отрицательно и при $T = 10$ К составляет более 40%. Температурные зависимости

удельного электросопротивления соответствуют полупроводниковому типу и в области низких температур абсолютные значения для образцов различаются почти в 10 раз.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-03-00017), часть работ по термическому и РФА-анализу выполнена в рамках государственного задания Института химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук 0287-2021-0013.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. H. Jonker and J. H. Van Santen, *Physica* **19**, 120 (1953).
2. J. B. Goodenough, *J. Phys. Chem. Sol.* **6**, 287 (1958).
3. С. В. Вонсовский, М. С. Свирский, *ЖЭТФ* **47**, 1354 (1964).
4. A. K. Kundu and B. Raveau, arXiv:1005.5426 (2010).
5. D. N. H. Nam, K. Jonason, P. Nordblad, N. V. Khiem, and N. X. Phuc, *Phys. Rev. B* **59**, 4189 (1999).
6. S. Y. Istomin, O. A. Drozhzhin, G. Svensson, and E. V. Antipov, *Sol. St. Sci.* **6**, 539 (2004).
7. C. R. Dyck, Z. B. H. Yu, and V. D. Krstic, *Sol. St. Ionics* **171**, 17 (2004).
8. Q. Zhang, Y. Guo, J. Ding, and M. He, *J. Sol. St. Electrochem.* **24**, 1487 (2020).
9. J. W. Choi, J. H. Kang, H. J. Kim, and K. S. Yoo, *J. Korean Ceramic Society* **43**, 758 (2006).
10. Y. W. Zhang, F. L. Zeng, C. C. Yu, C. Z. Wu, W. Z. Ding, and X. G. Lu, *Rare Metals* **35**, 723 (2016).
11. A. V. Kovalevsky, A. V. Kharton, V. N. Tikhonovich, E. N. Naumovich, A. A. Tonoyan, O. P. Reut, and L. S. Boginsky, *Mater. Sci. Engin. B* **52**, 105 (1998).
12. Y. Lu, A. Ma, Y. Yu, R. Tan, C. Liu, P. Zhang, D. Liu, and J. Gui, *ACS Sustainable Chemistry Engineering* **7**, 2906 (2018).
13. V. V. Kharton, A. A. Yaremchenko, A. V. Kovalevsky, A. P. Viskup, E. N. Naumovich, and P. F. Kerko, *J. Membrane Sci.* **163**, 307 (1999).
14. Y. H. Lin, J. Lan, and C. Nan, *Oxide Thermoelectric Materials*, Wiley-VCH (2019).
15. M. James, T. Tedesco, D. J. Cassidy, and R. L. Withers, *Mater. Research Bulletin* **40**, 990 (2005).
16. I. O. Troyanchuk, D. V. Karpinsky, M. V. Bushinsky, V. Sikolenko, V. Efimov, A. Cervellino, and B. Raveau, *J. Appl. Phys.* **112**, 013916 (2012).
17. M. James et al., *Physica B: Condensed Matter* **385**, 199 (2006).
18. M. James, D. Cassidy, D. J. Goossens, and R. L. Withers, *J. Sol. St. Chem.* **177**, 1886 (2004).
19. S. N. Vereshchagin, L. A. Solovyov, E. V. Rabchevskii, V. A. Dudnikov, S. G. Ovchinnikov, and A. G. Anshits, *Chem. Commun.* **50**, 6112 (2014).
20. V. A. Dudnikov, Yu. S. Orlov, S. Yu. Gavrilkin, M. V. Gorev, S. N. Vereshchagin, L. A. Solovyov, N. S. Perov, and S. G. Ovchinnikov, *J. Phys. Chem. C* **120**, 13443 (2016).
21. S. N. Vereshchagin, V. A. Dudnikov, N. N. Shishkina, and L. A. Solovyov, *Thermochimica Acta* **655**, 34 (2017).
22. S. Vereshchagin, V. Dudnikov, Yu. Orlov, and L. Solovyov, *J. Alloys Comp.* **860**, 158257 (2021).
23. S. Fukushima, T. Sato, D. Akahoshi, and H. Kuwahara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 064706 (2009).
24. V. A. Dudnikov, Yu. S. Orlov, N. V. Kazak, A. S. Fedorov, L. A. Solov'yov, S. N. Vereshchagin, A. T. Burkov, S. V. Novikov, S. Y. Gavrilkin, and S. G. Ovchinnikov, *Ceramics International* **44**, 10299 (2018).
25. S. N. Vereshchagin, L. A. Solov'yov, E. V. Rabchevskii, V. A. Dudnikov, and S. G. Ovchinnikov, A. G. Anshits, *Kinetics and Catalysis* **56**, 640 (2015).
26. B. Raveau and M. Seikh, *Cobalt Oxides: from Crystal Chemistry to Physics*, John Wiley & Sons (2012).
27. N. B. Ivanova, S. G. Ovchinnikov, M. M. Korshunov, I. M. Eremin, and N. V. Kazak, *Phys. Usp.* **52**, 789 (2009).
28. A. Hassen, A. I. Ali, B. J. Kim, Y. S. Wu, S. H. Park, and B. G. Kim, *J. Appl. Phys.* **102**, 123905 (2007).
29. V. A. Dudnikov, Yu. S. Orlov, M. V. Bushinsky, L. A. Solovyov, S. N. Vereshchagin, S. Yu. Gavrilkin, A. Yu. Tsvetkov, M. V. Gorev, S. V. Novikov, O. S. Mantyskaya, and S. G. Ovchinnikov, *J. Alloys Comp.* **830**, 154629 (2020).
30. A. V. Maklakova, A. S. Baten'kova, M. A. Vlasova, N. E. Volkova, L. Y. Gavrilova, and V. A. Cherepanov, *Sol. St. Sci.* **110**, 106453 (2020).
31. H. M. Rietveld, *J. Appl. Crystall.* **2**, 65 (1969).

32. L. A. Solovyov, J. Appl. Crystall. **37**, 743 (2004).
33. K. Conder, E. Pomjakushina, A. Soldatov, and E. Mitberg, Mater. Research Bulletin **40**, 257 (2005).
34. V. Cherepanov, T. Aksenova, E. Kiselev, and L. Gavrilova, Sol. St. Sci. **10**, 438 (2008).
35. Y. Takeda, R. Kanno, T. Takada, O. Yamamoto, M. Takano, and Y. Bando, Z. Anorg. Allg. Chem. **540–541**, 259 (1986).
36. C. de la Calle, A. Aguadero, J. A. Alonso, and M. T. Fernandez-Diaz, Sol. St. Sci. **10**, 1924 (2008).
37. F. Li and J. Fang, J. Magn. Magn. Mater. **324**, 2664 (2012).
38. J. Wu and C. Leighton, Phys. Rev. B **67**, 174408 (2003).
39. I. O. Troyanchuk, A. N. Chobot, A. V. Nikitin, O. S. Mantytskaya, L. S. Lobanovskii, and V. M. Dobryanskii, Phys. Sol. St. **57**, 2427 (2015).
40. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin (1984).

О ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ РЭЛЕЯ В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК

*Б. Я. Балагуров**

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 4 декабря 2021 г.,
после переработки 4 декабря 2021 г.
Принята к публикации 7 декабря 2021 г.

Рассмотрена проводимость двумерной модели Рэля в критической области — окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик. Выведено аналитическое выражение, описывающее эффективную проводимость σ_e модели во всей предпороговой (вплоть до соприкосновения круговых включений) критической области. Проведено сравнение полученных для σ_e разложений с соответствующими результатами гипотезы подобия.

DOI: 10.31857/S0044451022030051

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование свойств вещества при фазовом переходе представляет общезначимый интерес и является актуальной задачей теории. В твердых телах достаточно подробно изучены сегнетоэлектрические, магнитные, структурные и т. д. фазовые превращения [1]. В то же время в бинарных композициях имеет место специфический фазовый переход типа металл–диэлектрик, при котором происходит резкое изменение их электрофизических свойств, в частности, проводимости. Во всех этих явлениях вблизи точки фазового перехода имеются особенности в поведении соответствующих физических величин. При этом зависимость различных свойств вещества от параметров близости к критической точке (порогу протекания) имеет аномальное, неаналитического типа, поведение. Теоретическое описание подобных аномальных зависимостей наталкивается, вообще говоря, на серьезные трудности. Хотя во многих случаях (сегнетоэлектричество, магнетизм, сверхпроводимость) применима общая теория фазовых переходов второго рода Ландау [2], она, однако, непригодна в критической области, в которой проявляются упомянутые выше аномалии. Точное решение двумерной модели Изинга [2] продемонстрировало как аномальное поведение ее маг-

нитных характеристик в критической области, так и отсутствие применимости метода Ландау. Отметим, что полное решение получила также задача о проводимости двумерного композита со структурой шахматной доски [3].

В общем случае из-за отсутствия строгих результатов для описания фазового перехода типа металл–диэлектрик в композитах со случайным распределением компонент в [4, 5] была предложена гипотеза подобия, в которой особенности физических величин аппроксимируются степенными функциями. При этом игнорируется возможное присутствие логарифмических зависимостей от параметров близости к точке фазового перехода. Основным количественным результатом гипотезы подобия является соотношение между критическими индексами (показателями степеней).

Фазовый переход металл–диэлектрик может происходить и в композитах другого класса — бинарных системах с регулярной структурой. Периодичность в расположении включений позволяет развивать последовательный подход к вычислению проводимости таких систем. Так, например, для двумерной модели Рэля [6] удается свести эту задачу к решению бесконечной системы алгебраических уравнений [7–9]. Использование конечной подсистемы этих уравнений достаточного размера позволяет найти эффективную проводимость σ_e модели численными методами практически во всем предпороговом диапазоне изменения концентрации (вплоть до соприкосновения включений). Такой подход, од-

* E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

нако, не позволяет выяснить истинный вид аномальных зависимостей величины σ_e в окрестности точки перехода.

В настоящей работе проводимость двумерной модели Рэля в области фазового перехода металл–диэлектрик рассмотрена аналитическим методом. Для решения этой задачи использовано так называемое бинарное приближение [10, 11], точность которого тем выше, чем ближе модель к точке фазового перехода. Полученное таким способом аналитическое выражение для эффективной проводимости σ_e двумерной модели Рэля оказывается справедливым во всей предпороговой критической области (окрестности точки перехода), в которой проявляется аномальное поведение величины σ_e . Сравнение с соответствующими результатами гипотезы подобия показывает, что некоторые общие положения этой гипотезы, сформулированные для случайно-неоднородных сред, применимы и к композитам с периодической структурой.

2. ЭФФЕКТИВНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

Двумерная модель Рэля представляет собой изотропную матрицу проводимости σ_1 с системой включений круговой формы радиуса R и проводимости σ_2 . Центры кругов расположены в узлах квадратной решетки с периодом $2a$. Эффективная проводимость σ_e такой модели изотропна и является функцией трех аргументов: $\sigma_e = \sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2)$, где $p = (4a^2 - \pi R^2)/(2a)^2$ — безразмерная концентрация (доля занимаемой площади) первой компоненты — матрицы. Для дальнейшего удобно ввести безразмерную эффективную проводимость $f(p, h)$ согласно

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1 f(p, h), \quad h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \quad (1)$$

При $\sigma_2 = 0$ по мере увеличения радиуса включений эффективная проводимость монотонно убывает, обращаясь в нуль при соприкосновении кругов (при $R = a$). В этом случае при критической концентрации (пороге протекания)

$$p_c = 1 - \frac{\pi}{4} \quad (2)$$

происходит фазовый переход металл–диэлектрик, так что $f(p_c, 0) = 0$. Если же $\sigma_2 \neq 0$, но малá ($h \ll 1$), то $f(p_c, h)$ отлична от нуля, однако ее аномальное поведение в окрестности точки перехода сохраняется.

Общее выражение для безразмерной эффективной проводимости двумерной модели Рэля в допороговой области концентраций ($p \geq p_c$) получено в работе [10]:

$$f(p, h) = \frac{1}{\pi} \left\{ \xi_0 + 2h \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \frac{\text{th } n\xi_0}{h + \text{th } n\xi_0} e^{-n\xi_0} \right\}. \quad (3)$$

Здесь

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{a^2 - R^2}}{a}, \quad (4)$$

так что

$$\xi_0^2 = \frac{4 - \pi}{\pi} \tau, \quad \tau = \frac{p - p_c}{p_c}. \quad (5)$$

Выражение (3) выведено в рамках бинарного приближения [10], при котором проблема вычисления эффективной проводимости сводится к задаче о протекании тока через пару соседних кругов. Как отмечено в [10, 11], погрешность бинарного приближения обращается в нуль при стремлении к точке фазового перехода. Поэтому выражение (3) применимо в непосредственной окрестности точки перехода — предпороговой ($p \geq p_c, \tau \geq 0$) критической области ($\xi_0 \ll 1, h \ll 1$).

В работе [10] из выражения (3) найдено разложение величины $f(p, h)$ по параметру $h/\xi_0 \ll 1$. Рассмотрим теперь случай, когда отношение h/ξ_0 произвольно. Для того чтобы провести суммирование в формуле (3) при этих значениях h и ξ_0 , введем величину N такую, что

$$\left\{ 1, \frac{h}{\xi_0} \right\} \ll N \ll \frac{1}{\xi_0}, \quad (6)$$

и разделим сумму в выражении (3) на две части:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (\dots) = S_1 + S_2. \quad (7)$$

Здесь

$$S_1 = \sum_{n=1}^N (\dots), \quad (8)$$

$$S_2 = \sum_{n=N+1}^{\infty} (\dots). \quad (9)$$

В формулах (7)–(9) под (...) понимается выражение, стоящее в (3) под знаком суммы. При $h \ll 1$ и $\xi_0 \ll 1$ с учетом условий (6) имеем

$$S_1 \simeq \sum_{n=1}^N \frac{1}{n + \gamma}, \quad \gamma = \frac{h}{\xi_0}, \quad (10)$$

$$S_2 \simeq \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{e^{-n\xi_0}}{n}. \quad (11)$$

Для того чтобы вычислить сумму в формуле (10), введем функцию

$$F(x) = \sum_{n=1}^N \frac{e^{-(n+\gamma)x}}{n+\gamma}, \quad (12)$$

$$F(0) = S_1, \quad F(\infty) = 0. \quad (13)$$

Из (12) находим производную функции $F(x)$

$$F'(x) = -e^{-\gamma x} \sum_{n=1}^N e^{-nx} = -e^{-\gamma x} \frac{1-e^{-Nx}}{1-e^{-x}} e^{-x}. \quad (14)$$

Отсюда с учетом (13) находим

$$S_1 = \int_0^{\infty} e^{-\gamma x} \frac{1-e^{-Nx}}{1-e^{-x}} e^{-x} dx. \quad (15)$$

Положив $e^{-x} dx = d(1 - e^{-x})$, проведем в (15) интегрирование по частям:

$$S_1 = \gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma x} \ln(1 - e^{-x}) dx - (N + \gamma) \times \\ \times \int_0^{\infty} e^{-(N+\gamma)x} \ln(1 - e^{-x}) dx. \quad (16)$$

Второй интеграл в (16), положив $(N + \gamma)x = t$, преобразуем следующим образом:

$$(N + \gamma) \int_0^{\infty} e^{-(N+\gamma)x} \ln(1 - e^{-x}) dx = \\ = \int_0^{\infty} e^{-t} \ln(1 - \exp\{-t/(N + \gamma)\}) dt. \quad (17)$$

Отсюда, в силу того, что $N \gg \{1, \gamma\}$, получим

$$\int_0^{\infty} e^{-t} \ln(1 - \exp\{-t/(N + \gamma)\}) dt \simeq \\ \simeq \int_0^{\infty} e^{-t} \ln \frac{t}{N} dt = -\ln N - \mathbb{C}, \quad (18)$$

где

$$\mathbb{C} = -\int_0^{\infty} e^{-t} \ln t dt = 0.577\dots \quad (19)$$

— постоянная Эйлера. Таким образом,

$$S_1 = \gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma x} \ln(1 - e^{-x}) dx + \ln N + \mathbb{C}. \quad (20)$$

Перепишем S_2 в виде

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\xi_0}}{n} - \sum_{n=1}^N \frac{e^{-n\xi_0}}{n}. \quad (21)$$

Далее имеем

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n\xi_0}}{n} = \ln(1 - e^{-\xi_0}) \simeq \ln \frac{1}{\xi_0}, \quad (22)$$

$$\sum_{n=1}^N \frac{e^{-n\xi_0}}{n} \simeq \sum_{n=1}^N \frac{1}{n} = \ln N + \mathbb{C} + \dots \quad (23)$$

Здесь учтено, что $\xi_0 \ll 1$ и $1 \ll N \ll 1/\xi_0$.

В результате получаем окончательно:

$$f(p, h) = \frac{1}{\pi} \left\{ \xi_0 + 2h \left[\ln \frac{1}{\xi_0} - g(\gamma) \right] \right\}, \quad (24) \\ \gamma = \frac{h}{\xi_0},$$

$$g(\gamma) = -\gamma \int_0^{\infty} e^{-\gamma x} \ln(1 - e^{-x}) dx. \quad (25)$$

Формулы (24), (25) описывают безразмерную эффективную проводимость исследуемой двумерной модели Рэля во всей предпороговой ($p \geq p_c$) критической ($\xi_0 \ll 1, h \ll 1$) области.

Положив в (25) $\gamma e^{-\gamma x} dx = d(1 - e^{-\gamma x})$ и проведя интегрирование по частям, получим

$$g(\gamma) = \int_0^{\infty} \frac{1 - e^{-\gamma x}}{e^x - 1} dx. \quad (26)$$

Отсюда разложением по степеням γ найдем

$$\gamma \ll 1 : g(\gamma) = \frac{\pi^2}{6} \gamma - \zeta(3) \gamma^2 + \frac{\pi^4}{90} \gamma^3 + \dots, \quad (27)$$

где

$$\zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = 1.202\dots \quad (28)$$

В противоположном случае больших значений γ сделаем в (25) замену $x = t/\gamma$ и приведем полученное выражение к следующему виду:

$$g(\gamma) = - \int_0^\infty e^{-t} \left(\ln t - \ln \gamma - \frac{t}{2\gamma} \right) dt - \int_0^\infty e^{-t} \ln \frac{\text{sh } \Omega(t)}{\Omega(t)} dt, \quad (29)$$

так что

$$g(\gamma) = - \ln \frac{1}{\gamma} + \mathbb{C} + \frac{1}{2\gamma} - J, \quad (30)$$

$$J = \int_0^\infty e^{-t} \ln \frac{\text{sh } \Omega(t)}{\Omega(t)} dt.$$

В (29), (30) введено обозначение

$$\Omega(t) = \frac{t}{2\gamma}. \quad (31)$$

В выражении для J из (30) проведем интегрирование по частям:

$$J = \int_0^\infty e^{-t} \left\{ \frac{1}{2\gamma} \text{cth } \Omega(t) - \frac{1}{t} \right\} dt.$$

Поскольку

$$\text{cth } x = \frac{1}{x} - \frac{x}{3} + \frac{x^3}{45} + \dots, \quad x \ll 1,$$

то

$$J = \int_0^\infty e^{-t} \left\{ -\frac{t}{12\gamma^2} + \frac{t^3}{720\gamma^4} + \dots \right\} dt, \quad (32)$$

так что с учетом определения (31) получаем

$$\gamma \gg 1 : g(\gamma) = - \ln \frac{1}{\gamma} + \mathbb{C} + \frac{1}{2\gamma} - \frac{1}{12} \frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{120} \frac{1}{\gamma^4} + \dots \quad (33)$$

Последующие члены разложения (33) представляют собой четные степени величины $1/\gamma$. Отметим также, что $g(1) = 1$.

3. СРАВНЕНИЕ С ГИПОТЕЗОЙ ПОДОБИЯ

Согласно результатам предыдущего раздела для функции $f(p, h)$, в двух предельных случаях имеем следующие разложения (при $\tau = (p - p_c)/p_c \geq 0$):

$$f(p, h) = \xi_0 \left\{ \frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi} \frac{h}{\xi_0} \ln \frac{1}{\xi_0} - \frac{\pi}{3} \left(\frac{h}{\xi_0} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \zeta(3) \left(\frac{h}{\xi_0} \right)^3 + \dots \right\}, \quad h \ll \xi_0 \ll 1, \quad (34)$$

$$f(p, h) = h \left\{ \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} \right) + \frac{1}{6\pi} \left(\frac{\xi_0}{h} \right)^2 - \frac{1}{60\pi} \left(\frac{\xi_0}{h} \right)^4 + \dots \right\}, \quad \xi_0 \ll h \ll 1. \quad (35)$$

Разложение (34) практически совпадает с найденным в работе [10]. Из разложения (35) при $p = p_c$ ($\xi_0 = 0$) следует выражение для $f(p_c, h)$, полученное в [11]. При этом величины

$$\frac{f(p_c, h)}{h} = \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} \right) \quad (36)$$

и

$$\frac{\partial f(p_c, h)}{\partial h} = \frac{2}{\pi} \left(\ln \frac{1}{h} - \mathbb{C} - 1 \right) \quad (37)$$

являются линейными функциями аргумента $\ln(1/h)$, отличаясь друг от друга на единицу. Заметим также, что из разложения (35) следует

$$h \left. \frac{\partial f(p, h)}{\partial p} \right|_{p=p_c} = \frac{2}{3\pi^2} \quad (h \ll 1). \quad (38)$$

Здесь учтено, что $\xi_0^2 = (4/\pi)(p - p_c)$. Равенство (38) может использоваться для проверки правильности вычислений при компьютерном исследовании проводимости модели при $p = p_c$ ($\tau = 0$).

В рамках гипотезы подобия [4, 5] безразмерная эффективная проводимость $f(p, h)$ в окрестности точки фазового перехода металл-диэлектрик является некоторой функцией аргументов τ и h , для которой имеют место следующие разложения [4] (см. также [9]):

$$f(p, h) = \tau^t \left\{ A_0 + A_1 \frac{h}{\tau^{t/s}} + A_2 \left(\frac{h}{\tau^{t/s}} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (39)$$

$$\tau > 0, \quad \Delta \ll \tau \ll 1,$$

$$f(p, h) = h^s \left\{ a_0 + a_1 \frac{\tau}{h^{s/t}} + a_2 \left(\frac{\tau}{h^{s/t}} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (40)$$

$$|\tau| \ll \Delta \ll 1,$$

$$f(p, h) = \frac{h}{(-\tau)^q} \times \left\{ B_1 + B_2 \frac{h}{(-\tau)^{t/s}} + B_3 \left(\frac{h}{(-\tau)^{t/s}} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (41)$$

$$\tau < 0, \quad \Delta \ll |\tau| \ll 1.$$

Здесь

$$\Delta = h^{s/t}, \quad (42)$$

t, s и q — критические индексы, связанные соотношением

$$q = t \frac{1-s}{s}, \quad (43)$$

а $A_0, A_1, A_2, \dots, a_0, a_1, a_2, \dots, B_1, B_2, B_3, \dots$ — численные коэффициенты. Для двумерного композита со случайным распределением включений

$$s = 1/2, \quad t = q \simeq 1.3. \quad (44)$$

Подчеркнем, что в разложениях (39)–(41) не учитывается возможность присутствия логарифмических зависимостей от аргументов τ и h .

Сравнение формул (34), (35) с (39), (40) показывает, что для описания проводимости двумерной модели Рэлея в духе гипотезы подобия следует опустить логарифмические зависимости и положить

$$t = 1/2, \quad s = 1, \quad \Delta = h^2. \quad (45)$$

Кроме того, можно ожидать, согласно (43), что критический индекс $q = 0$. Несмотря на столь существенные различия в значениях критических индексов, структуры разложений (34), (35) и (39), (40) практически одинаковы. Действительно, множитель перед фигурной скобкой в (34) $\xi_0 \sim \sim \sqrt{\tau} \sim \tau^t$, а разложение идет по степеням величины $h/\xi_0 \sim h/\sqrt{\tau} \sim h/\tau^{t/s}$. Аналогичным образом в (35) общий множитель $h = h^s$, а параметром разложения является величина $(\xi_0/h)^2 \sim \tau/h^2 = \tau/h^{s/t}$, так что разложение идет по целым степеням τ .

Проведенное сравнение показывает, что, с одной стороны, найденные в настоящей работе разложения для безразмерной эффективной проводимости $f(p, h)$ значительно отличаются от соответствующих результатов гипотезы подобия. Это касается как конкретных значений критических индексов, так и наличия логарифмических зависимостей от параметров близости к точке фазового перехода. С другой стороны, при игнорировании (как и в [4]) логарифмических зависимостей разложения (34), (35) и (39), (40), несмотря на численные различия в показателях степеней, фактически совпадают. Оказывается, таким образом, что основные положения гипотезы подобия, сформулированные для случайно-неоднородных сред, в задаче о проводимости применимы, по-видимому, и к композитам с регулярной структурой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, часть 1*, Наука, Москва (1995).
3. Ю. П. Емец, *Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой*, Наукова думка, Киев (1986).
4. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, *Phys. Stat. Sol. (b)* **76**, 475 (1976).
5. J. P. Straley, *J. Phys. C* **9**, 783 (1976).
6. Lord Rayleigh, *Phil. Mag.* **34**(211), 481 (1892).
7. W. T. Perrins, D. V. McKenzie, and B. C. McPhedran, *Proc. Roy. Soc. London A* **369**, 207 (1979).
8. Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин, *ЖЭТФ* **117**, 978 (2000).
9. Б. Я. Балагуров, *Электрофизические свойства композитов. Макроскопическая теория*, URSS, Москва (2015).
10. Б. Я. Балагуров, *ЖЭТФ* **157**, 669 (2020).
11. Б. Я. Балагуров, *ЖЭТФ* **159**, 553 (2021).

ФОРМИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ ТЕРМИЧЕСКИМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

А. Г. Грошев*, А. К. Аржников**

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук
426067, Ижевск, Россия

Поступила в редакцию 12 ноября 2021 г.,
после переработки 12 ноября 2021 г.
Принята к публикации 26 ноября 2021 г.

Исследуется структура энергетической зависимости нормальной и аномальной компонент собственной энергии одночастичной функции Грина в сверхпроводящем состоянии, рассчитанной с учетом рассеяния носителей заряда на термических флуктуациях электрон-дырочных пар. Исследование проводится в рамках самосогласованной теории континуального интегрирования на основе квазидвумерной однозонной модели с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах. В приближении средней t -матрицы получены асимптотические выражения для компонент собственной энергии, которые по структуре совпадают с аналогичными выражениями феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями. Анализ результатов показывает, что энергетические зависимости обеих компонент собственной энергии имеют характерные пики, которые при достаточно низких температурах гасят друг друга в полной собственной энергии. Это поведение сохраняется в области аномально низких температур и исчезает только в квантовом пределе $T \rightarrow 0$, где определяющую роль играют квантовые флуктуации. С ростом температуры взаимное сокращение сменяется на взаимное усиление и затем на взаимную компенсацию в области температур близких к сверхпроводящему переходу.

DOI: 10.31857/S0044451022030063

1. ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в области методов машинного обучения открывает новые возможности для определения теоретически важных физических величин, скрытых в экспериментальных данных. В частности, такой подход использовался для изучения структуры энергетической зависимости собственной энергии электрона, извлекаемой из спектров фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) [1]. Интерес к изучению такой структуры вызван возможностью продвинуться в решении давней проблемы о природе высокотемпературной сверхпроводимости.

В результате смешивания электронов и дырок в сверхпроводящем состоянии собственная энергия состоит из нормального Σ_{nor} и аномального Σ_{anom}

вкладов [2–4]. Аномальная часть Σ_{anom} определяет сверхпроводящие свойства, в то время как в Σ_{nor} содержатся эффекты рассеяния и корреляции электронов, приводящие к перенормировке массы и времени жизни. Поскольку эти вклады представляют собой физически различные части эффектов взаимодействия, для понимания механизма сверхпроводимости важно их раздельное рассмотрение. Однако одночастичные методы, такие как сканирующая туннельная микроскопия (STM), метод интерференции квазичастиц [5] и ARPES [6], предоставляют нам информацию исключительно о поведении полной собственной энергии Σ_{tot} [7–9], которая состоит из определенной комбинации этих двух вкладов [1, 10]. Метод машинного обучения на основе машины Больцмана, предложенный в работе [1], позволил выделить эти вклады из экспериментальных данных. Проанализированные в таком подходе спектры ARPES при антинодальном значении импульса $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{a.n.} = (\pi, 0)$ для оптимально допированного Bi2212 с $T_c = 90$ К при $T = 11$ К [11] и недодопированного Bi2201 с $T_c = 29$ К при $T = 12$ К [12] обнару-

* E-mail: groshev_a.g@mail.ru

** E-mail: arzhnikof@bk.ru

живают сингулярные структуры в энергетических зависимостях Σ_{nor} и Σ_{anom} при значениях энергии близких к значению сверхпроводящей щели. Однако в результате взаимного сокращения эти особенности отсутствуют в полной собственной энергии Σ_{tot} .

В настоящее время рассматриваются два основных сценария при объяснении формирования особенностей на энергетической зависимости обеих компонент собственной энергии в ВТСП-соединениях. В первом сценарии наблюдаемые аномалии объясняются на основе моттовской физики в результате гибридизации квазичастиц со скрытыми фермионными возбуждениями, возникающими в результате сильных электронных корреляций [13–15]. Простые феноменологические уравнения в таком подходе описывают переходы электрона в скрытое фермионное состояние и обратно. Они хорошо воспроизводят низкочастотную часть обеих компонент собственной энергии, рассчитанных с помощью теории динамического среднего поля (DMFT) и ее кластерного расширения (CDMFT) для двумерной модели Хаббарда как с притягивающим, так и с отталкивающим взаимодействием. Подгонка к численным данным DMFT решений этих уравнений позволяет определить параметры, характеризующие скрытый фермион в зависимости от температуры, электронной плотности и силы межэлектронного взаимодействия, и предположить возможный механизм его происхождения. Успешное описание с помощью этой простой феноменологической модели поддерживает идею о «скрытых» и «явных» фермионах в качестве бистабильных возбуждений свободного электрона в допированных диэлектриках Мотта. Кроме того, простые выражения для компонент собственной энергии предлагают полезный инструмент для анализа спектроскопических экспериментальных данных. Во втором сценарии особенности в энергетической зависимости обеих компонент собственной энергии определяются термическими флуктуациями в рамках фермион-бозонной модели [10, 16], в которой вместо гибридизации со скрытыми фермионными возбуждениями спаривающее взаимодействие происходит посредством бозонных возбуждений (типа мягкой бозонной моды). Поскольку сингулярные структуры наблюдаются при значениях температур, которые значительно ниже T_c , обнаруженные особенности могут быть вызваны также квантовыми флуктуациями и, таким образом, существенно ограничить круг возможных механизмов спаривания. В обоих случаях авторы опираются на одно и то же экспериментально наблюдаемое поведение собственной энергии, в то время как физика возникающих

особенностей на энергетической зависимости аномальной и нормальной частей собственной энергии в них различна.

В настоящей работе особенности в энергетической зависимости компонент собственной энергии и их взаимное сокращение рассматриваются в рамках альтернативного подхода, в котором наблюдаемые аномалии возникают в результате резонансного рассеяния носителей заряда термическими флуктуациями электрон-дырочных пар [17]. Решение рассматриваемой задачи проводится в рамках самосогласованной теории континуального интегрирования на основе квазидвумерной однозонной модели $d_{x^2-y^2}$ -спаривания с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах. В приближении средней t -матрицы (АТА) уравнения теории континуального интегрирования позволяют получить приближенные аналитические выражения для компонент собственной энергии, которые совпадают с соответствующими выражениями феноменологической модели гибридизации квазичастиц со скрытыми фермионными возбуждениями. Фактически, представление собственной энергии в модели гибридизации квазичастиц со скрытыми фермионными возбуждениями является феноменологической заменой двухчастичного взаимодействия в модели Хаббарда одночастичным, но имеющим дополнительные фермионные степени свободы. В используемом нами методе вычисление статистической суммы взаимодействующих электрон-дырочных пар с помощью преобразования Хаббарда–Страфоновича сводится к одночастичной задаче с электрон-дырочной парой, взаимодействующей со вспомогательным случайным полем, не зависящим от времени (в статическом приближении). Как отмечалось в [18–20], при решении этой задачи важен одновременный учет амплитудных $|\Delta|$ и фазовых ϕ флуктуаций параметра порядка (ПП) $\Delta = |\Delta| \exp(i\phi)$. Такая взаимосвязь рассматривалась в работах [21, 22] в рамках вариационного приближения и в [20, 23] на основе самосогласованных уравнений теории континуального интегрирования в приближении когерентного потенциала (CPA). Используемые в [20] приближения, в отличие от [21, 22], учитывают перенормировку одночастичных состояний, возникающую в результате рассеяния носителей заряда флуктуациями электрон-дырочных пар. Такая перенормировка описывается в [20] собственно-энергетической частью одночастичной функции Грина, самосогласованное вычисление которой представляется необходимым при объяснении ее энергетической зависимости.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД

Рассматривается однозонный гамильтониан t - V -модели с притяжением между электронами, находящимися на ближайших узлах квадратной решетки:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,s} t_{ij} \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{js} - \sum_j \mu \hat{n}_j - V \sum_{j,\delta} \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j+\delta\downarrow}, \quad (1)$$

где $t_{ij} = -t$ — матричные элементы электронных перескоков на ближайшие узлы; \hat{c}_{js}^\dagger (\hat{c}_{js}) — операторы рождения (уничтожения) электрона на узле j с проекцией спина s ; $n_{js} = \hat{c}_{js}^\dagger \cdot \hat{c}_{js}$ — оператор числа электронов на узле j с проекцией спина s , n_j — оператор полного числа электронов на узле j ; μ — химический потенциал; V — параметр межэлектронного притяжения. В данной работе мы не конкретизируем природу взаимодействия между электронами. Предполагается, что такое спаривающее взаимодействие может быть обусловлено либо антиферромагнитными спиновыми флуктуациями [24], либо состояниями резонирующих валентных связей [25], либо иными механизмами (например, поляронным), которые в простейшем приближении описываются эффективным притяжением электронов, находящихся на соседних узлах [26–29]. Сверхпроводящие свойства рассматриваемой модели определяются итерационным решением системы самосогласованных уравнений с минимальным значением термодинамического потенциала (см. [20]). Для получения этой системы необходимо сделать ряд приближений. Отбрасывая флуктуации, разрушающие сверхпроводимость в системах с размерностью $D \leq 2$, мы учитываем квазидвумерный характер рассматриваемых соединений, поскольку согласно теореме Мермина–Вагнера–Хоэнберга [30–32] в строго двумерной вырожденной системе дальний порядок отсутствует при любой отличной от нуля температуре и сверхпроводящие состояния могут проявляться лишь в фазовых переходах типа Березинского–Костерлица–Таулесса [33]. Самосогласованный учет перенормировки одночастичных состояний и эффективной взаимосвязи между амплитудными и фазовыми флуктуациями проводится в рамках метода, основанного на уравнениях теории континуального интегрирования [20]. Аналогичный подход использовался ранее при исследовании влияния температуры [34] и атомного беспорядка [35] на магнитное фазовое расслоение и параметры спиральных магнитных структур в рамках квазидвумерной однозонной t - t' -модели Хаббарда в СРА-приближении.

Задача вычисления статистической суммы взаимодействующих электронных пар сводится к вычислению статистической суммы независимых электронных пар, находящихся в пространстве не зависящих от времени (в статическом приближении) вспомогательных флуктуирующих полей. Роль таких полей играют модуль $\Delta_{j,\delta}$ и фаза $\phi_{j,\delta}$ флуктуирующего комплексного ПП $\Delta_{j,\delta} \exp(i\phi_{j,\delta})$ в узельном представлении. В используемом статическом приближении не учитываются квантовые флуктуации сверхпроводящего ПП, вследствие чего метод функционального интегрирования при $T = 0$ сводится к приближению Хартри–Фока (ХФ). Обоснованием статического приближения служит оценка вклада квантовых флуктуаций в подавление температуры сверхпроводящего перехода [36], которая позволяет считать, что квантовые флуктуации становятся важны только при достаточно низких температурах.

В данной работе мы ограничиваемся синглетной сверхпроводящей фазой с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией, которая реализуется в ВТСП, рассматриваемых в работе [1]. Сверхпроводящая щель при $d_{x^2-y^2}$ -спаривании имеет зависимость от волнового вектора $\Delta(k) \propto \cos(k_x) - \cos(k_y)$ [37], где $k_{x(y)}$ — значения волнового вектора вдоль основных векторов обратной решетки. Такая зависимость определяется взаимодействием между электронами только в пределах первой координационной сферы. В этом случае фаза усредненного ПП

$$\overline{\Delta}_{j,\delta} \exp(i\alpha_{j,\delta}) = \overline{\Delta} \exp(i\alpha_\delta)$$

зависит от ближайших соседей по закону $\alpha_{\pm\delta_x} = \pm\pi/2$, $\alpha_{\pm\delta_y} = \mp\pi/2$, где δ_x и δ_y являются проекциями вектора ближайших соседей δ на координатные оси. В результате приближения «седловой точки», используемого для упрощения задачи вычисления интегралов по амплитудному полю Δ , наиболее вероятные амплитудные $\Delta(\phi)$ и фазовые ϕ флуктуации оказываются связанными. Это справедливо, когда амплитудные флуктуации становятся быстрее флуктуаций фазы настолько, что амплитудное поле успевает подстроиться под распределение фазы равновесным образом. Как было показано в [20], такое приближение неплохо работает в широком диапазоне температур вплоть до T_c . Уравнение для нахождения «седловой точки», определяемое из условия минимума термодинамического потенциала, при $T = 0$ совпадает с уравнением самосогласования для сверхпроводящего ПП теории среднего поля (ХФ, БКШ). При конечных температурах это уравнение не содержит решения $\Delta = 0$ (см. [20]). По-

этому переход в нормальное состояние при T_c происходит в результате потери фазовой когерентности флуктуирующего комплексного ПП, т. е. при обращении в нуль усредненного ПП $\langle \Delta(\phi) \exp(i\phi) \rangle = 0$.

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕЙ t -МАТРИЦЫ И МОДЕЛЬ СКРЫТЫХ ФЕРМИОНОВ

Учет флуктуаций в модели (1) приводит к проблеме недиагонального беспорядка в неупорядоченных системах. Эта проблема может быть решена в двухузельном АТА-приближении. При решении задачи удобно использовать представление узельных матриц Намбу:

$$\hat{c}_{j\delta}(\tau) = \begin{bmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{j+\delta\downarrow}^\dagger(\tau) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau) = \begin{bmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger(\tau) & \hat{c}_{j+\delta\downarrow}(\tau) \end{bmatrix}.$$

В этом представлении мацубаровская функция Грина определяется стандартными выражениями

$$G_{j\delta}(\tau - \tau') = - \left\langle T_\tau \hat{c}_{j\delta}(\tau) \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau') \right\rangle =$$

$$= \begin{bmatrix} G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau') & G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau') \\ G_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau') & G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau') \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где $G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau')$ и $G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau')$ — нормальные, а $G_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau')$ и $G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau')$ — аномальные мацубаровские функции Грина. Для учета термических флуктуаций ПП вводится флуктуирующий потенциал

$$\Delta\hat{U}(\Delta, \phi, \tau) = \sum_{j,\delta} \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau) \Delta\mathcal{U}_{j\delta} \hat{c}_{j\delta}(\tau),$$

$$\Delta\mathcal{U}_{j\delta} = \begin{bmatrix} 0 & \Delta\hat{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \\ \Delta\hat{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} & 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$\Delta\hat{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} = V \exp(i\alpha_\delta) [\bar{\Delta} - \Delta(\phi) \exp(i\phi)],$$

$$\Delta\hat{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} = V \exp(-i\alpha_\delta) [\bar{\Delta} - \Delta(\phi) \exp(-i\phi)],$$

где $\bar{\Delta}$ — значение амплитуды среднего ПП. Флуктуирующий потенциал определяет матрицу рассеяния в узельном представлении уравнения Дайсона:

$$G_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) + G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) \Delta\mathcal{U}_{j\delta} G_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) + G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) T_{j\delta}(i\omega_n) G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n), \quad (5)$$

где $G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n)$ — фурье-образ мацубаровской функции Грина с усредненным ПП; $T_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ матрицы рассеяния электронной пары; $\omega_n = (2n - 1)\pi T$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) — мацубаровские

частоты для ферми-частиц. Эффективная (средняя) мацубаровская функция Грина

$$F_{j\delta}(i\omega_n) = \langle G_{j\delta}(i\omega_n) \rangle$$

определяется собственной энергией в узельном представлении уравнения Дайсона:

$$F_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) + G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) \Sigma_{j\delta}(i\omega_n) F_{j\delta}(i\omega_n), \quad (6)$$

где $F_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ эффективной мацубаровской функции Грина; $\Sigma_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ собственной энергии. Тогда из матричных уравнений (5) и (6) собственная энергия $\Sigma_{j\delta}(i\omega_n)$ выражается через среднюю T -матрицу:

$$\Sigma_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= [1 + \langle T_{j\delta}(i\omega_n) \rangle G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n)]^{-1} \langle T_{j\delta}(i\omega_n) \rangle, \quad (7)$$

где

$$T_{j\delta}(i\omega_n) = [1 - \Delta\mathcal{U}_{j\delta} G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n)]^{-1} \Delta\mathcal{U}_{j\delta}. \quad (8)$$

Переход в квазиимпульсное представление осуществляется в результате преобразования Фурье узельных матриц Намбу (2). В этом представлении гамильтониан рассматриваемой системы с усредненным ПП $\hat{\mathcal{H}}_{AV}$ имеет следующий вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_{AV}(\bar{\Delta}, \alpha) = \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger \mathcal{H}_{AV}(k) \hat{c}_k,$$

$$\mathcal{H}_{AV}(k) = \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\uparrow}(k) & \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow}(k) \\ \mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\uparrow}(k) & \mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\downarrow}(k) \end{bmatrix},$$

$$\mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\uparrow}(k) = \varepsilon_k, \quad \mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\downarrow}(k) = -\varepsilon_k \quad (9)$$

$$\mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow}(k) = -2V\bar{\Delta}V_k,$$

$$\mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\uparrow}(k) = \left(\mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow}(k) \right)^*,$$

$$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu,$$

$$V_k = i(\cos k_x - \cos k_y),$$

где $\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k$ — матрицы Намбу (2) в квазиимпульсном представлении; ε_k — закон дисперсии энергии электронов на квадратной решетке с перескоками в пределах первой и второй координационных сфер; V_k — закон дисперсии сверхпроводящего ПП. Таким образом, эффективная среда определяется гамильтонианом

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{eff}(i\omega_n) &= \hat{\mathcal{H}}_{AV} + \hat{\Sigma}(i\omega_n), \\ \hat{\Sigma}(i\omega_n) &= \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger \Sigma(k, i\omega_n) \hat{c}_k, \\ \Sigma(k, E) &= \begin{bmatrix} \Sigma_{nor}^\uparrow(k, E) & \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(k, E) \\ \Sigma_{anom}^{\downarrow\uparrow}(k, E) & \Sigma_{nor}^\downarrow(k, E) \end{bmatrix}, \quad (10) \\ \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= 4\Sigma^{\uparrow(\downarrow)}(E), \\ \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) &= \Sigma^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) + \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) = \\ &= 2V_k^{(*)} [\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E) - V\bar{\Delta}],\end{aligned}$$

где $\Sigma(k, E)$ — собственная энергия (7) в квазиимпульсном представлении. При определении собственной энергии в (10) мы, так же как в [1, 10], включили в определение аномальной части собственной энергии недиагональные матричные элементы гамильтониана системы с усредненным ПП (9). Рассматриваемая нами $d_{x^2-y^2}$ -симметрия ПП определяется зависимостью недиагональных матричных элементов от квазиимпульса. Поэтому коэффициент $\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E)$ в аномальной части собственной энергии (10), так же как и нормальные части $\Sigma^\uparrow(E)$ и $\Sigma^\downarrow(E)$, в общем случае, являются комплексными функциями. Эффективная мацубаровская функция Грина (6) в квазиимпульсном представлении определяется гамильтонианом эффективной среды $\hat{\mathcal{H}}_{eff}(E)$ (10):

$$\begin{aligned}F(k, E) &= \frac{1}{E - \mathcal{H}_{eff}(k)} = \\ &= \begin{bmatrix} F^\uparrow(k, E) & F^{\uparrow\downarrow}(k, E) \\ F^{\downarrow\uparrow}(k, E) & F^\downarrow(k, E) \end{bmatrix}, \\ F^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= \frac{1}{E \mp \varepsilon_k - \Sigma_{tot}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)}, \\ F^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) &= \frac{\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E)}{[E - E_+(k)][E - E_-(k)]}, \quad (11) \\ E_\pm(k) &= [\Sigma_{nor}^\uparrow(k, E) + \Sigma_{nor}^\downarrow(k, E)]/2 \pm \\ &\pm [(\varepsilon_k + [\Sigma_{nor}^\uparrow(k, E) - \Sigma_{nor}^\downarrow(k, E)]/2)^2 + \\ &\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(k, E)\Sigma_{anom}^{\downarrow\uparrow}(k, E)]^{1/2}, \\ \Sigma_{tot}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) + W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E), \\ W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= \frac{\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(k, E)\Sigma_{anom}^{\downarrow\uparrow}(k, E)}{E \pm \varepsilon_k - \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)}.\end{aligned}$$

Собственная энергия в уравнении Дайсона (6) определяется матричными элементами мацубаровских функций Грина в узельном представлении, явные выражения которых можно получить из симметричных свойств рассматриваемой системы при преобразовании Фурье (см. [20]).

Поскольку $\langle \Delta \mathcal{U}_{j\delta} \rangle = 0$, разложение $\langle T_{j\delta}(E) \rangle$ по флуктуирующему потенциалу в (8) начинается с квадратичного слагаемого

$$\langle T_{j\delta}(E) \rangle = \langle \Delta \mathcal{U}_{j\delta} G_{j\delta}^{AV}(E) \Delta \mathcal{U}_{j\delta} \rangle + \dots \quad (12)$$

Если ограничиться приближением, квадратичным по флуктуирующему потенциалу, то собственнo-энергетическая часть в узельном представлении (7) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}\Sigma_{j\delta} &= \begin{bmatrix} \Sigma_{j,j}^\uparrow & \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} & \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow \end{bmatrix}, \\ \Sigma_{j,j}^\uparrow &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} (G^{AV})_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow} \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\uparrow\downarrow} \rangle, \\ \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} (G^{AV})_{j,j}^{\uparrow\uparrow} \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\downarrow\uparrow} \rangle, \\ \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} (G^{AV})_{j+\delta,j}^{\uparrow\downarrow} \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \rangle, \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} (G^{AV})_{j,j+\delta}^{\downarrow\uparrow} \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} \rangle.\end{aligned} \quad (13)$$

Учитывая свойство

$$\exp(i\alpha_\delta)(G^{AV})_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} = \exp(-i\alpha_\delta)(G^{AV})_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}$$

недиагональных матричных элементов, справедливое для $d_{x^2-y^2}$ -симметрии, можно избавиться в (13) от фазовых множителей $\exp(\pm i\alpha_\delta)$. В результате получим

$$\begin{aligned}\Sigma_{j,j}^\uparrow &= V_1^2 (G^{AV})_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}, \\ \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow &= V_1^2 (G^{AV})_{j,j}^{\uparrow\uparrow}, \\ \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} &= (-V_1^2 + V_2^2)(G^{AV})_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}, \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} &= (-V_1^2 + V_2^2)(G^{AV})_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow},\end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned}V_1^2 &= V^2 [\langle \Delta(\phi)^2 \rangle - \bar{\Delta}^2], \\ V_2^2 &= 2V^2 [\langle \Delta(\phi)^2 \cos^2(\phi) \rangle - \bar{\Delta}^2].\end{aligned}$$

Подставляя в (14) явные выражения для функции Грина с усредненным ПП и собственной энергии в узельном представлении, получим в квазиимпульсном представлении выражения для компонент собственной энергии, которые имеют структуру выражений феноменологической модели со скрытыми фермионными возбуждениями [13, 15]:

$$\begin{aligned}\Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= V_1^2 \frac{E \mp \varepsilon_k}{E^2 - \varepsilon_k^2 - |D^{\uparrow\downarrow}(k)|^2}, \\ \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) &= D^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) + \\ &+ (-V_1^2 + V_2^2) \frac{D^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k)}{E^2 - \varepsilon_k^2 - |D^{\uparrow\downarrow}(k)|^2},\end{aligned} \quad (15)$$

где

$$D^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) = \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) = -2V\overline{\Delta}V_k^{(*)}.$$

Подставляя (15) в выражение для $W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$, получим

$$W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) = \frac{E_k^2 - \varepsilon_k^2}{E \pm \varepsilon_k} \left[1 + \frac{-V_1^2 + V_2^2}{(E - E_k)(E + E_k)} \right] \times \left[1 + \frac{V_2^2}{(E - E_k)(E + E_k) - V_1^2} \right]. \quad (16)$$

Все компоненты собственной энергии имеют полюсы на границах энергетической щели при

$$E = \pm E_k, \quad E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |D^{\uparrow\downarrow}(k)|^2}.$$

Кроме того, $W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ имеет полюс, а $\Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ обращается в нуль при $E = \pm E_k$ (при выбранных параметрах $\varepsilon_k = 0$ в антинодальной точке). В условиях, когда можно пренебречь слагаемым V_2 по сравнению с V_1 , вычеты в полюсах $E = \pm E_k$ нормального $\Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ и аномального $W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ вкладов в $\Sigma_{tot}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ (11) различаются только знаками и взаимно сокращаются. В этом случае сокращение особенностей на энергетической зависимости компонент собственной энергии в рассматриваемой нами модели происходит по той же причине, что и в феноменологической модели со скрытыми фермионными возбуждениями. Однако следует отметить, что в отличие от [15], где параметры модели со скрытыми фермионными возбуждениями определяются путем простой подгонки, в нашем случае температурные зависимости всех параметров обусловлены термическими флуктуациями и должны вычисляться в ходе самосогласованных расчетов.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Расчеты проводились при типичных для купратов значениях параметра межэлектронного притяжения $V = t$ и параметра перескока в пределах второй координационной сферы $t' = -0.2t$ [38] для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания. При этих параметрах выбранное значение концентрации носителей заряда $n \simeq 0.828$ соответствует наибольшему значению температуры сверхпроводящего перехода. В качестве единицы измерения энергии в дальнейшем выбран интеграл перескока между ближайшими соседями t . Результаты расчета типичных энергетических зависимостей вещественных и мнимых частей аномальной и нормальной собственных энергий при антинодальном значении импульса $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{a.n.} = (\pi, 0)$ и различных

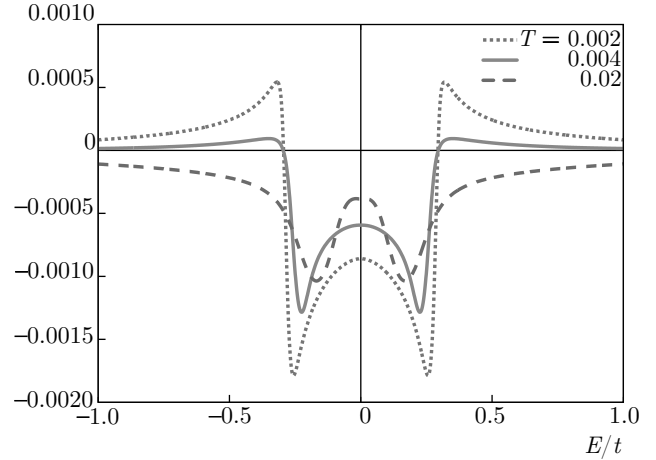


Рис. 1. Энергетические зависимости вещественной части аномальной собственной энергии $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

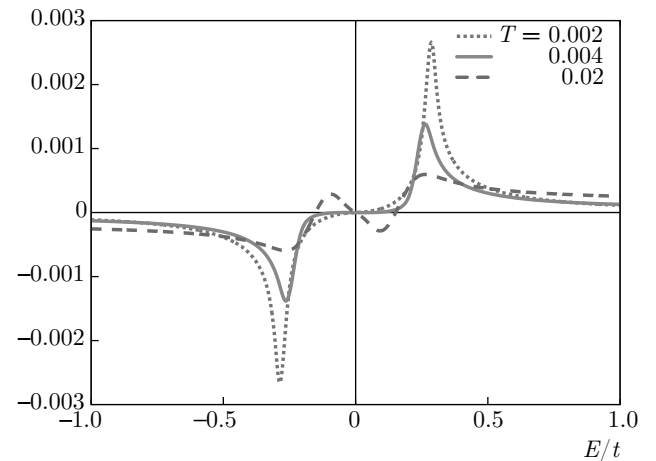


Рис. 2. Энергетические зависимости мнимой части аномальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

температурах приведены соответственно на рис. 1, 2 и рис. 3, 4. Поскольку $\overline{\Delta}$, входящее в определение $\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$, сильно зависит от температуры и не зависит от энергии, вещественная часть аномальной собственной энергии на рисунках представлена в виде разности

$$\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})].$$

На рисунках видно, что при низких температурах ($T = 0.002$ и $T = 0.004$ на рис. 2 и рис. 4) $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ и $\text{Im} \Sigma_{nor}^{\uparrow\downarrow}(E)$ на границах энергетической щели при $E \simeq \pm E_k$ имеют особенности, соответствующие пикам на их энергетической зависимости

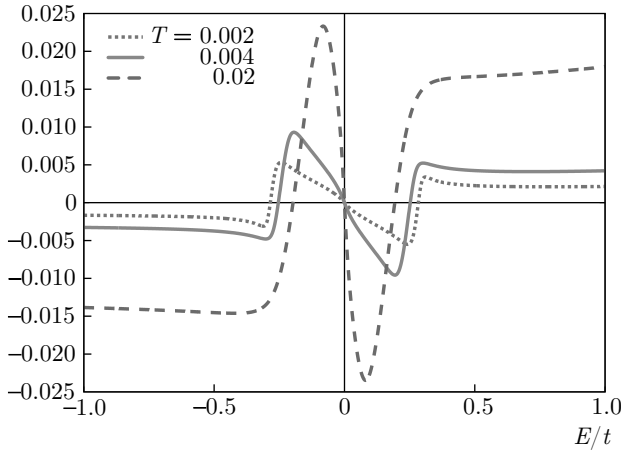


Рис. 3. Энергетические зависимости вещественной части нормальной собственной энергии $\text{Re} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

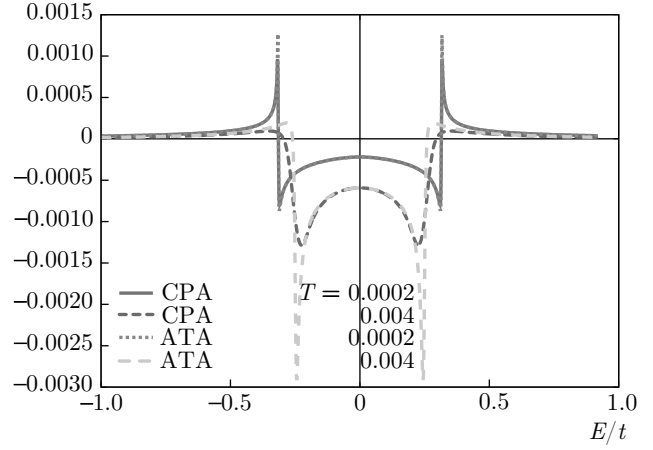


Рис. 5. Энергетические зависимости вещественной части аномальной собственной энергии $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$, вычисленные в CPA- и ATA-приближениях при различных температурах

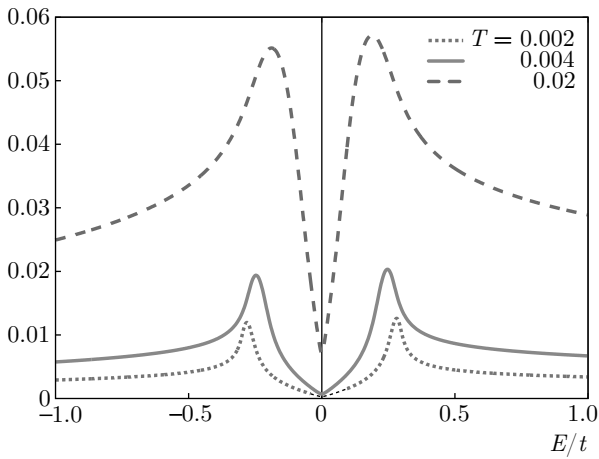


Рис. 4. Энергетические зависимости мнимой части нормальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

сти. Им соответствуют нули в энергетической зависимости

$$\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})], \text{Re} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$$

($T = 0.002$ и $T = 0.004$ на рис. 1 и рис. 3). Пики на энергетической зависимости этих функций имеются при значениях энергии $|E| \gtrsim E_k$ и $|E| \lesssim E_k$. В области $|E| \gtrsim E_k$ вещественные части меняют знак ($T = 0.002$ и $T = 0.004$ на рис. 1 и рис. 3). При более высоких температурах ($T = 0.02$ на рис. 1 и рис. 2) ситуация для $\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ меняется на обратную. Теперь нули исчезают в энергетической зависимости $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$, а появляются в $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$. В результате значениям $E \simeq \pm E_k$ соответствуют пики в $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$ и

нули в $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$. Для мнимой части аномальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ в этой области температур также наблюдается смена знака. Смена знака в энергетической зависимости компонент собственной энергии была получена в [10] для модели квантовых флуктуаций. Поскольку такое же поведение наблюдается и для рассматриваемой нами модели термических флуктуаций, можно утверждать, что оно не связано с квантовым характером флуктуаций. Интересно, что при низких температурах эти величины, выделенные в [1] из данных ARPES для оптимально допированного Bi2212 [11] и недодопированного Bi2201 [12], также меняют знак в этой области энергий. Мнимая часть нормальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ во всей области изменения энергии E остается одного знака. В нашей работе основные расчеты проводятся в рамках CPA-приближения. Однако, как показано в разд. 3, аналитические выражения для компонент собственной энергии, аналогичные по структуре выражениям феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями, получены нами непосредственно из уравнений ATA-приближения. Поэтому полезно сравнить результаты вычислений в CPA- и ATA-приближениях. Для этого на рис. 5 представлены энергетические зависимости вещественной части аномальной собственной энергии, вычисленные в CPA- и ATA-приближениях при различных температурах. Видно, что результаты в CPA- и ATA-приближениях неплохо согласуются друг с другом, однако начинают совпадать только при достаточно низких температурах.

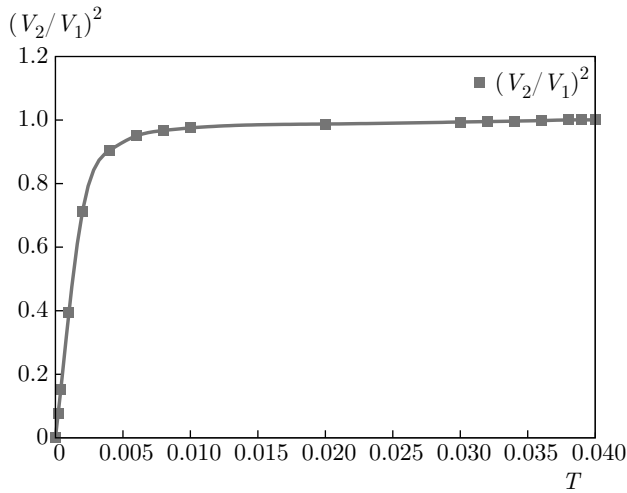


Рис. 6. Температурная зависимость квадрата отношения констант V_2 и V_1

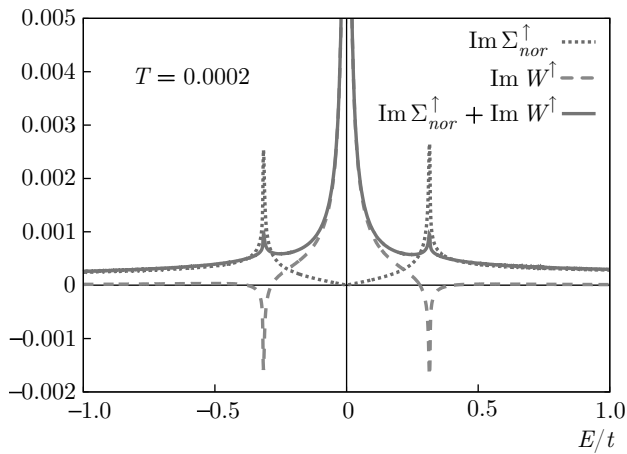


Рис. 7. Энергетические зависимости мнимых частей нормальной $\text{Im } \Sigma_{nor}^\uparrow$, спаривающей $\text{Im } W^\uparrow$ и общей $\text{Im } \Sigma_{tot}^\uparrow$ собственных энергий при $T = 0.0002$ для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

Как было показано в разд. 3, взаимное сокращение особенностей нормальной $\Sigma_{nor}^\uparrow(E)$ и спаривающей $W^\uparrow(E)$ компонент собственной энергии в энергетической зависимости полной собственной энергии $\Sigma_{tot}^\uparrow(E)$ в рассматриваемой нами модели происходит по той же причине, что и в феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями, когда можно пренебречь слагаемым V_2 по сравнению с V_1 . Наши расчеты показывают (см. рис. 6), что это возможно в области достаточно низких температур. Такое сокращение при температуре $T = 0.0002t$ продемонстрировано на рис. 7. В этом случае $\text{Im } \Sigma_{nor}^\uparrow(E)$ имеет особенности при значениях энергии, соответствующим

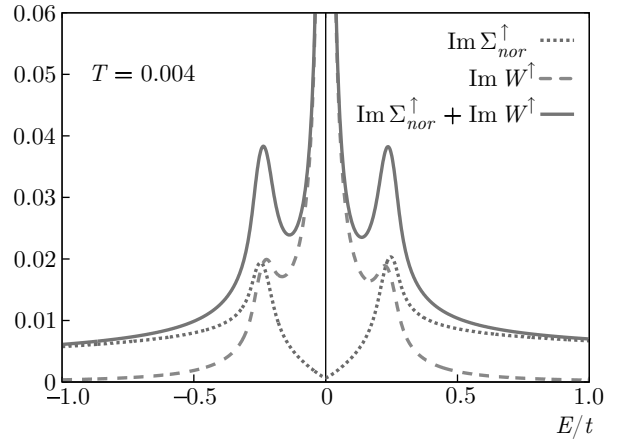


Рис. 8. Энергетические зависимости мнимых частей нормальной $\text{Im } \Sigma_{nor}^\uparrow$, спаривающей $\text{Im } W^\uparrow$ и общей $\text{Im } \Sigma_{tot}^\uparrow$ собственных энергий при $T = 0.004$ для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

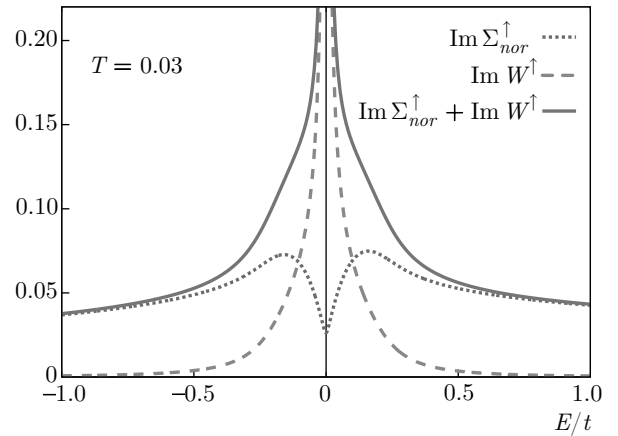


Рис. 9. Энергетические зависимости мнимой части нормальной $\text{Im } \Sigma_{nor}^\uparrow$, спаривающей $\text{Im } W^\uparrow$ и общей $\text{Im } \Sigma_{tot}^\uparrow$ собственных энергий при $T = 0.03$ для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

щих границам энергетической щели при $E \approx \pm E_k$, а $\text{Im } W^\uparrow(E)$ кроме этих особенностей имеет особенность при $E = 0$. Значения $\text{Im } \Sigma_{nor}^\uparrow(E)$ и $\text{Im } W^\uparrow(E)$ в особенностях $E \approx \pm E_k$ имеют разные знаки, что и приводит к их взаимному сокращению в полной $\text{Im } \Sigma_{tot}^\uparrow(E)$ собственной энергии. С ростом температуры особенности на границах энергетической щели становятся менее выражены, а значения $\text{Im } \Sigma_{nor}^\uparrow(E)$ и $\text{Im } W^\uparrow(E)$ становятся одного знака. Это происходит при температурах примерно $0.004t$, когда слагаемое V_2 становится сравнимым с V_1 (см. рис. 6). В результате этого особенности в $\text{Im } \Sigma_{tot}^\uparrow(E)$ при $E \approx \pm E_k$ в этой области температур даже усиливаются. Это продемонстрировано на рис. 8. При приближении к сверхпроводящему переходу особен-

ности на энергетической зависимости $\text{Im } W^\dagger(E)$ на границах щели при $E \simeq \pm E_k$ исчезают, а оставшиеся в $\text{Im } \Sigma_{nor}^\dagger(E)$ полностью компенсируются в полной собственной энергии $\text{Im } \Sigma_{tot}^\dagger(E)$ расходимостью $\text{Im } W^\dagger(E)$, которая определяется полюсом при $E = 0$. Это продемонстрировано на рис. 9. Необходимо отметить, что согласно [13] взаимное сокращение особенностей на границах энергетической щели $E \simeq \pm E_k$ является своеобразным тестом на их фермионное происхождение. Однако в работе [13] в рамках DMFT на решетке Бете для модели Хаббарда с притягивающим взаимодействием такое сокращение наблюдается при температурах близких к T_c , а при низких температурах оно отсутствует, поскольку согласно [13] в этой области справедливо описание в рамках фермион-бозонной модели. В отличие от [13] в рассматриваемой нами модели сокращение особенностей происходит при достаточно низких температурах (вплоть до квантового предела $T \rightarrow 0$), а при температурах близких к T_c происходит их компенсация. Как отмечалось во введении, сингулярные структуры и их сокращение в оптимально допированном Bi2212 с $T_c = 90$ К [11] и недодопированном Bi2201 с $T_c = 29$ К [12] обнаруживаются соответственно при $T = 11$ К и $T = 12$ К, т. е. при температурах гораздо ниже температур сверхпроводящего перехода.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для квазидвумерной однозонной модели с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах, исследована структура энергетической зависимости нормальной и аномальной компонент собственной энергии одночастичной функции Грина, возникающая в результате рассеяния носителей заряда на термических флуктуациях электрон-дырочных пар. Резонансный характер этого рассеяния является причиной возникновения особенностей на энергетической зависимости компонент собственной энергии. Показано, что в рамках рассматриваемой нами модели в квадратичном приближении по флуктуирующему потенциалу в АТА компоненты собственной энергии имеют структуру аналитических выражений феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями. Однако параметры в полученных нами выражениях определяются в самосогласованных расчетах и зависят от температуры, электронной плотности и силы межэлектронного взаимодействия. Проведенный

анализ показывает, что на энергетических зависимостях обеих компонент собственной энергии на границах энергетической щели имеются характерные пики. Однако в отличие от результатов других работ, взаимное сокращение этих пиков в полной собственной энергии в нашем случае происходит при достаточно низких температурах (вплоть до квантового предела $T \rightarrow 0$, где определяющую роль играют квантовые флуктуации). С ростом температуры это взаимное сокращение сменяется на взаимное усиление, а в области температур близких к сверхпроводящему переходу происходит взаимная компенсация особенностей. Кроме того, смена знака в обеих компонентах собственной энергии за пределами энергетической щели не связана с квантовым характером флуктуаций, поскольку также наблюдается для рассматриваемой нами модели термических флуктуаций. В данном случае это происходит в области достаточно низких температур для вещественной части аномальной собственной энергии и при достаточно высоких температурах для мнимой части аномальной собственной энергии. Эти величины, извлеченные из экспериментальных данных ARPES, при низких температурах действительно меняют знак в этой области энергий.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема № 121030100005-1).

ЛИТЕРАТУРА

1. Youhei Yamaji, Teppei Yoshida, Atsushi Fujimori, and Masatoshi Imada arXiv:1903.08060v4 0 [cond-mat.str-el] 2020.
2. G. M. Eliashberg, Sov. Phys. **11**(3), 696 (1960).
3. A. B. Migdal, Sov. Phys. **34**(7), 996 (1958).
4. Yoichiro Nambu, Phys. Rev. **117**(3), 648 (1960).
5. J. E. Hoffman, K. McElroy, D.-H. Lee, K. M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, Science **297**, 1148 (2002); DOI: 10.1126/science.1072640.
6. Andrea Damascelli, Zahid Hussain, and Zhi-Xun Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
7. W. L. McMillan and J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. **14**(4), 108 (1965).
8. J. M. Howell, W. L. McMillan, and W. L. Feldmann, Phys. Rev. B **3**(12), 4065 (1971).

9. M. R. Norman, H. Ding, H. Fretwell, M. Randeria, and J. C. Campuzano, *Phys. Rev. B* **60**(10), 7585 (1999).
10. Andrey V. Chubukov and Jörg Schmalian, *Phys. Rev. B* **101**(12), 180510(R) (2020).
11. T. Kondo, Y. Hamaya, A. D. Palczewski, T. Takeuchi, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, J. Schmalian, and A. Kaminski, *Nature Phys.* **7**, 21 (2011).
12. T. Kondo, R. Khasanov, T. Takeuchi, J. Schmalian, and A. Kaminski, *Nature (London)* **457**, 296 (2009).
13. Shiro Sakai, Marcello Civelli, Yusuke Nomura, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. B* **92**, 180503(R) (2015).
14. Shiro Sakai, Marcello Civelli, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 057003 (2016).
15. Shiro Sakai, Marcello Civelli, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. B* **94**, 115130 (2016).
16. A. Abanov, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **117–118**, 129 (2001).
17. Yu. A. Izyumov, *Adv. Phys.* **14**(56), 569 (1965).
18. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature* **374**, 434 (1995).
19. D. Bormann and H. Beck, *J. Stat. Phys.* **76**, 361 (1994).
20. А. Г. Грошев, А. К. Аржников, *ЖЭТФ* **157**, 295 (2020).
21. P. Curty and H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 796 (2000).
22. P. Curty and H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257002 (2003).
23. A. G. Groshev and A. K. Arzhnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 215604 (2021).
24. Н. Б. Иванова, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, И. М. Ерёмин, Н. В. Казак, *УФН* **179**, 837 (2009).
25. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
26. D. J. Scalapino, E. Loh, and J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **34**(11), 8190(R) (1986).
27. J. R. Schrieffer, X. G. Wen, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **39**(16), 11663 (1989).
28. Ю. А. Изюмов, *УФН* **169**, 225 (1999).
29. D. J. Scalapino, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1383 (2012).
30. N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1136 (1966); P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967); S. Coleman, *Commun. Math. Phys.* **31**, 264 (1973).
31. G. Su, A. Schadschneider, and J. Zittartz, *Phys. Lett. A* **230**,99 (1997).
32. G. Su and M. Suzuki, *Phys. Rev. B* **58**, 117 (1998).
33. В. Л. Березинский, *ЖЭТФ* **59**, 907 (1970); J. Kosterlitz and D. Thouless, *J. Phys. C* **6** 1181 (1973).
34. A. G. Groshev and A. K. Arzhnikov, *Europhys. Lett.* **102**, 57005 (2013).
35. A. G. Groshev and A. K. Arzhnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 185801 (2018).
36. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3253 (1995).
37. T. K. Lee and S. Feng, *Phys. Rev. B* **41**, 11110 (1990).
38. М. А. Тимиргазин, V. F. Gilmutdinov, and A. K. Arzhnikov, *Physica C* **557**, 7 (2019).

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ РЕЛАКСАЦИИ МОДУЛЯ СДВИГА ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ НА ОСНОВЕ КАЛОРИМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

А. С. Макаров^а, Г. В. Афонин^{а*}, Ц. Ч. Цзиао^{б**}, Н. П. Кобелев^с, В. А. Хоник^а

^а Воронежский государственный педагогический университет
394043, Воронеж, Россия

^б Northwestern Polytechnical University
710072, Xi'an, China

^с Институт физики твердого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 16 ноября 2021 г.,
после переработки 30 ноября 2021 г.
Принята к публикации 30 ноября 2021 г.

Основанный на межузельной теории Гранато метод, позволяющий рассчитать температурную зависимость модуля сдвига G на основе экспериментальных данных калориметрии, успешно проверен на ряде объемных металлических стекол. Впервые представлены результаты прогнозирования в широком диапазоне температур, включающем кристаллизацию как исходных, так и релаксированных металлических стекол. Погрешность расчета температурных зависимостей модуля сдвига металлических стекол при кристаллизации не превышает 10 %.

DOI: 10.31857/S0044451022030075

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время все более аргументированной становится идея о том, что нерелаксированный (высокочастотный) модуль сдвига представляет собой важнейший физический параметр, определяющий на наноскопическом масштабе элементарные процессы релаксации и деформации в некристаллических материалах, включая металлические стекла (МС). Эта идея восходит к работам Немилова 60-х годов прошлого века, который предположил, что энергия активации вязкого течения в оксидных стеклах пропорциональна макроскопическому модулю сдвига [1]. Подобные идеи позже были сформулированы Дайре [2, 3], Джонсоном и Самвером с соавторами [4, 5] и другими исследователями (см. обзоры [3, 6]). К настоящему времени установлено большое количество корреляций макроскопического модуля

сдвига с различными физическими свойствами МС, как показано в подробном обзоре Ванга [6].

Информация о модуле сдвига имеет большое значение для понимания природы различных процессов, происходящих в некристаллических конденсированных средах. Многие важные вопросы, связанные со сдвиговой упругостью МС, все еще остаются неясными, несмотря на исследования в течение длительного времени. В значительной степени эти вопросы связаны с пониманием природы физических процессов, обеспечивающих взаимосвязь макроскопического модуля сдвига и физических свойств МС. Для решения обозначенной проблемы необходимы детальные данные об особенностях кинетики релаксации модуля сдвига в МС. В свою очередь, прецизионное измерение температурных зависимостей нерелаксированного модуля сдвига является сложной технической задачей, и число таких исследований невелико. Среди наиболее удобных методов, позволяющих проводить эти исследования, стоит отметить метод электромагнитно-акустического преобразования (ЭМАП) [7, 8], с помощью которого были выполнены измерения температурных зависимостей модуля сдвига в ряде раз-

* E-mail: afoninvg@gmail.com

** J. C. Qiao.

личных МС [8–13]. Однако у этого метода есть определенные ограничения. Например, измерения модуля сдвига МС в состоянии переохлажденной жидкости весьма сложны вследствие высокого уровня затухания вблизи и выше температуры стеклования, а также быстрого роста модуля сдвига при кристаллизации. Задача настоящей работы — показать, что температурная зависимость нерелаксированного модуля сдвига как исходных, так и релаксированных МС может быть рассчитана в широком диапазоне температур (включая кристаллизацию аморфной матрицы) на основе термограмм, регистрируемых методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Расчет может быть осуществлен в рамках физических представлений о фундаментальной взаимосвязи сдвиговой упругости и тепловых свойств МС.

2. ИДЕОЛОГИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Нерелаксированный модуль сдвига является ключевым параметром межзельной теории (МТ) Гранато [14, 15], в рамках которой удалось описать явления релаксации и кристаллизации в аморфных сплавах [12]. В основе МТ лежит гипотеза о том, что плавление простых кристаллических металлов связано с быстрой генерацией межзельных дефектов в наиболее устойчивой гантельной конфигурации (специально поставленные эксперименты подтвердили эту гипотезу [16]). Эти дефекты остаются идентифицируемыми структурными единицами в жидком состоянии [17] и замораживаются при быстрой закалке расплава, реализуемой при изготовлении стекла. При этом явления релаксации и кристаллизации в аморфном состоянии можно интерпретировать как результат изменения концентрации этих дефектов при термообработке. В аморфном состоянии эти дефекты не могут быть идентифицированы по их геометрическим признакам, характерным для кристаллов (два атома стремятся занять один и тот же минимум потенциальной энергии), но, тем не менее, они сохраняют те же свойства, которые типичны для межзельных гантелей в кристаллах [12].

Внешнее сдвиговое напряжение вызывает струноподобное движение около двух десятков атомов вокруг ядер дефектов, что приводит к неупругому эффекту, вследствие чего сильно уменьшается модуль сдвига. Поэтому модуль сдвига G становится экспоненциально зависимым от концентрации c вброшенных дефектов межзельного типа, т. е.

$$G = \mu e^{-\alpha\beta c},$$

где μ — модуль сдвига материнского кристалла, безразмерный параметр $\alpha \approx 1$ связан с полем деформации дефекта, а безразмерная сдвиговая восприимчивость β , определяемая ангармонизмом межатомного взаимодействия, равна 15–20. При этом энтальпия образования дефектов межзельного типа также контролируется модулем сдвига,

$$H = \alpha\Omega G,$$

где α — та же определенная выше величина, а Ω — объем, приходящийся на атом. Эти два простых уравнения составляют основу МТ и ведут к интересным и важным выводам. Во-первых, концентрацию межзельных дефектов можно контролировать путем прецизионных измерений модуля сдвига. Во-вторых, любая релаксация модуля сдвига вследствие изменения концентрации дефектов приводит к изменению энтальпии их образования. Следовательно, любые изменения энтальпии, происходящие при термообработке аморфного сплава, также контролируются модулем сдвига. Это, в свою очередь, означает, что выделение и поглощение тепла при термоактивируемой структурной релаксации неразрывно связаны с макроскопическим модулем сдвига [12].

Основанный на МТ подход является эффективным инструментом для понимания и прогнозирования различных релаксационных явлений в МС и однозначно показывает связь между МС и их кристаллическими аналогами [12, 18]. В частности, он дает 1) количественное объяснение изменений плотности, происходящих при структурной релаксации и кристаллизации МС [19]; 2) физическую интерпретацию того факта, что полное тепловыделение при структурной релаксации и кристаллизации приблизительно равно теплопоглощению при плавлении [20]; 3) хорошее описание высоты бозонного пика избыточной теплоемкости стекла [12].

В недавней работе [21] было показано, что изменение модуля сдвига при структурной релаксации МС может быть рассчитано в рамках МТ с использованием данных дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) в соответствии с уравнением

$$G(T) = \frac{G^{rt}}{\mu^{rt}} \mu(T) - \frac{\rho\beta}{\dot{T}} \int_{T_r}^{T_{cr}} W(T) dT, \quad (1)$$

где G^{rt} и μ^{rt} — модули сдвига соответственно стекла и кристалла при комнатной температуре, $\mu(T)$ — температурная зависимость модуля сдвига кристаллического состояния, \dot{T} — скорость нагрева, ρ —

Таблица. Параметры исследуемых МС: плотность ρ , модули сдвига при комнатной температуре в исходном состоянии G_{init}^{rt} , после релаксации G_{rel}^{rt} и после полной кристаллизации μ^{rt} , сдвиговая восприимчивость β

Химический состав стекла, ат. %	ρ , г/см ³	G_{init}^{rt} , ГПа	G_{rel}^{rt} , ГПа	μ^{rt} , ГПа	β
Zr _{47.5} Cu _{47.5} Al ₅	7.130 [6]	32.40 [6]	—	45.80	17.9 [28]
Zr ₄₆ Cu ₄₅ Al ₇ Ti ₂	7.020 [6]	33.61 [6]	—	48.00	21.1 [28]
Zr ₆₅ Cu ₁₅ Ni ₁₀ Al ₁₀	6.271 [6]	30.30 [6]	—	50.69	19.3 [28]
Zr ₄₇ Cu ₄₅ Al ₇ Fe ₁	7.000 [6]	33.75 [6]	—	42.10	19.4 [28]
Pd ₄₀ Ni ₄₀ P ₂₀	9.405 [22]	38.60 [6]	41.00	57.30	20.5 [28]
Pd _{43.2} Cu ₂₈ Ni _{8.8} P ₂₀	9.380 [23]	34.50 [24]	35.90	40.40	13.2 [28]
Cu ₄₉ Hf ₄₂ Al ₉	10.90 [25]	43.60 [25]	44.80	53.97	21.4 [29]
Zr ₄₆ (Cu _{0.8} Ag _{0.2}) ₄₆ Al ₈	7.177 [26]	33.80 [27]	35.30	44.80	18.3 [28]

плотность, $W(T)$ — тепловой поток (измеренный методом ДСК), T_r — комнатная температура и T_{cr} — температура полной кристаллизации. Представляет интерес проверить работоспособность метода для прогнозирования температурной зависимости модуля сдвига при кристаллизации МС.

3. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследования были выбраны 8 объемных МС (см. таблицу), полученных методом реактивной закалки расплава (МС на основе Pd) и методом вакуумного всасывания (МС на основе Cu и Zr). Измерения методом ДСК были выполнены с помощью прибора Hitachi DSC 7020 в атмосфере азота особой чистоты (99.999%). Максимальная погрешность определения теплового потока не превышала 3.5%. Определение температурных зависимостей высокочастотного модуля сдвига проводилось методом ЭМАП (см., например, работы [7–10]) на образцах $5 \times 5 \times 2$ мм³, колеблющихся поперечно на резонансных частотах $f = 500\text{--}700$ кГц. Значения модулей сдвига при комнатной температуре, G_{init}^{rt} , взяты из работ [6, 24, 25, 27] и перечислены в таблице. Относительная ошибка определения изменений модуля сдвига составляла около 5 ррм при температурах ниже калориметрической температуры стеклования и около 100 ррм выше температуры стеклования. Измерения G проводились в вакууме около 0.01 Па. Скорости нагрева и охлаждения при измерениях модуля сдвига и теплового потока составляли 3 К/мин.

Объемные МС Zr₆₅Cu₁₅Al₁₀Ni₁₀, Zr_{47.5}Cu_{47.5}Al₅, Zr₄₆Cu₄₅Al₇Ti₂ и Zr₄₇Cu₄₅Al₇Fe₁ исследовались в исходном состоянии. Другие четыре МС, Cu₄₉Hf₄₂Al₉, Zr₄₆(Cu_{0.8}Ag_{0.2})₄₆Al₈, Pd₄₀Ni₄₀P₂₀

и Pd_{43.2}Cu₂₈Ni_{8.8}P₂₀, изучались в релаксированном состоянии, подготовленном путем нагрева образца со скоростью 3 К/мин выше температуры стеклования и последующего охлаждения с той же скоростью до комнатной температуры. Все образцы МС нагревались на 70–100 К выше температуры начала кристаллизации T_x (до температур 780–870 К), что во всех случаях приводило к полной кристаллизации. Второе измерение для всех стекол проводилось на том же самом образце с целью измерения температурной зависимости модуля сдвига $\mu(T)$ образца в кристаллическом состоянии.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведен пример результатов ДСК для исходного стекла Zr₆₅Cu₁₅Al₁₀Ni₁₀. На рис. 1б показаны результаты измерений теплового потока, выполненных на одном и том же образце массивного МС Zr₆₅Cu₁₅Al₁₀Ni₁₀ в исходном состоянии до 873 К (полная кристаллизация), обозначенном как run 1, и в полностью кристаллизованном образце, обозначенном как run 2. Соответствующий протокол термообработки этого стекла представлен на рис. 1а. Видно, что при первом нагреве (run 1) наблюдаются 1) тепловыделение при структурной релаксации ниже температуры стеклования $T_g \approx 626$ К (показана стрелкой), 2) поглощение тепла в состоянии переохлажденной жидкости выше T_g и 3) большой пик тепловыделения при кристаллизации, который начинается при $T_x \approx 704$ К (показано стрелкой). Второй нагрев (run 2) демонстрирует термограмму ДСК полностью кристаллизованного образца, полученного в результате нагревания до 870 К. Видно, что температурная зависимость теплового потока

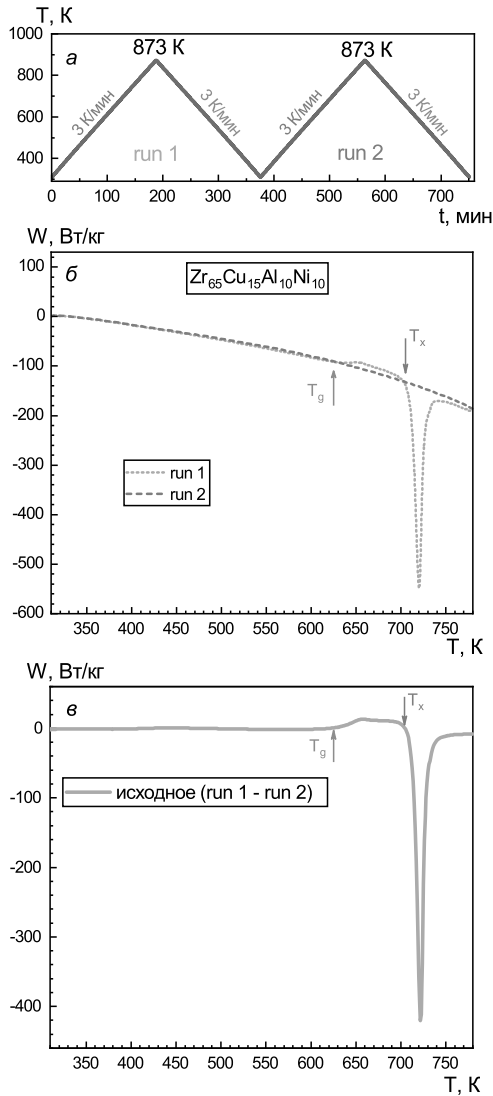


Рис. 1. (В цвете онлайн) Протокол термообработки объемного МС $Zr_{65}Cu_{15}Al_{10}Ni_{10}$ (а), экспериментальные данные ДСК (б) для МС в исходном состоянии (run 1) и после полной кристаллизации (run 2), а также термограмма ДСК (в) исходного образца без вклада кристалла (run 1–run 2)

для кристалла представляет собой монотонно убывающую функцию без каких-либо аномалий.

На рис. 2 приведен пример результатов ДСК для релаксированного стекла $Cu_{49}Hf_{42}Al_9$. На рис. 2б показаны кривые ДСК для стекла в исходном состоянии (run 1) при нагревании до 796 К (в область переохлажденной жидкости), в релаксированном (run 2) состоянии (полученном путем медленного охлаждения образца до комнатной температуры) при нагревании до 873 К (полная кристаллизация) и в полностью кристаллизованном состоянии (run 3). Соответствующий протокол термообработки представ-

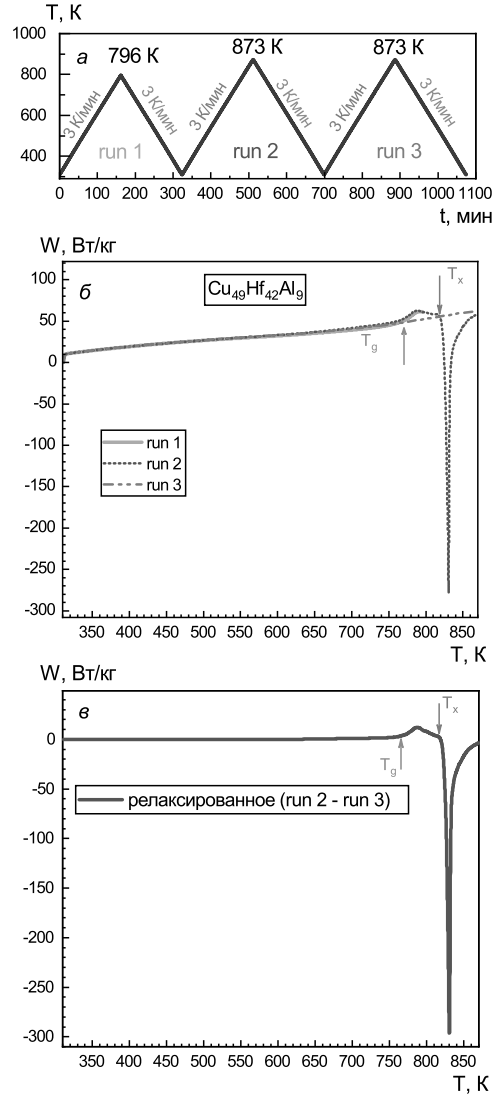


Рис. 2. (В цвете онлайн) Протокол термообработки (а) объемного МС $Cu_{49}Hf_{42}Al_9$, термограммы ДСК (б) в исходном (run 1), релаксированном (run 2) состояниях и после полной кристаллизации (run 3), а также термограмма ДСК (в) релаксированного образца без вклада кристалла (run 2–run 3)

лен на рис. 2а. Run 1 демонстрирует тепловыделение при структурной релаксации ниже $T_g \approx 765$ К (показано стрелкой) и поглощение тепла в состоянии переохлажденной жидкости выше T_g . При втором нагреве (run 2) экзоэффект ниже T_g , характерный для структурной релаксации, уже не наблюдается, в то время как эндоэффект при T_g остается почти неизменным. Далее наблюдается большой пик тепловыделения при кристаллизации, начинающейся вблизи $T_x \approx 815$ К (показано стрелкой). Термограмма ДСК образца в кристаллическом состоянии

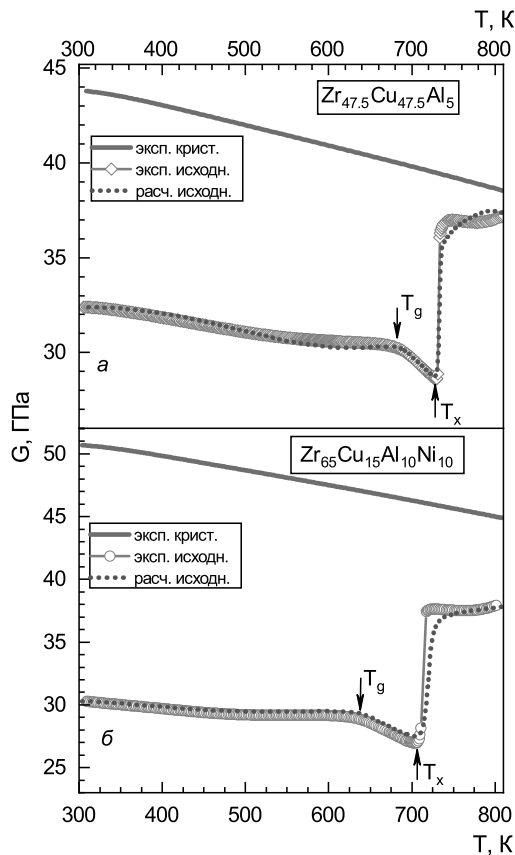


Рис. 3. (В цвете онлайн) Температурные зависимости модулей сдвига G_{init} (экспериментальные и вычисленные с помощью уравнения (1)) и μ (зеленые линии) МС $Zr_{47.5}Cu_{47.5}Al_5$ (а) и $Zr_{65}Cu_{15}Al_{10}Ni_{10}$ (б) в исходном состоянии и после кристаллизации

(рис 3) не имеет каких-либо особенностей. ДСК-измерения для других исследуемых МС показывают аналогичные закономерности и здесь не приводятся.

Тепловые потоки, поглощаемые или выделяемые исходным и релаксированным МС без вклада кристаллического состояния, рассчитывались соответственно как

$$W_{init}(T) = W_{run1}(T) - W_{run2}(T),$$

$$W_{rel}(T) = W_{run2}(T) - W_{run3}(T).$$

Эти величины также представлены на рис. 1в и 2в и использовались для расчета температурных зависимостей модуля сдвига при кристаллизации с использованием уравнения (1).

Красные символы на рис. 3–6 показывают температурные зависимости модуля сдвига МС в исходном (рис. 3, 4) и релаксированном (рис. 5, 6) состояниях. Сплошные зеленые линии на обоих рисунках

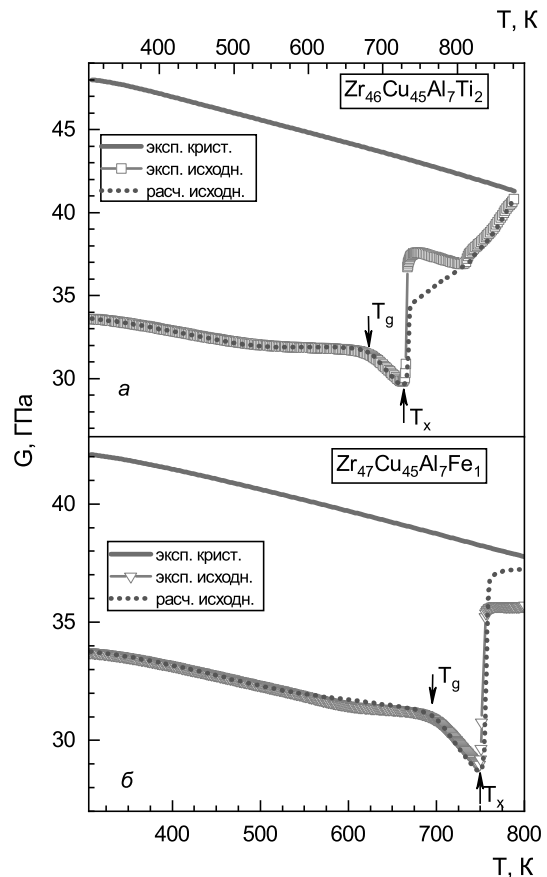


Рис. 4. То же, что на рис. 3, но для МС $Zr_{46}Cu_{45}Al_7Ti_2$ (а) и $Zr_{47}Cu_{45}Al_7Fe_1$ (б)

соответствуют температурным зависимостям модуля сдвига μ полностью кристаллизованных образцов. Все измерения $G(T)$ и $\mu(T)$ проводились с той же термической обработкой, что и при calorimetric испытаниях (см. рис. 1, 2). На рис. 3–6 показаны типичные для объемных МС температурные зависимости нерелаксированного модуля сдвига (см. например, работы [8, 18, 21, 30]): 1) почти линейное уменьшение, G , обусловленное ангармонизмом межатомного взаимодействия, при $T < T_g$ с ростом G при структурной релаксации и увеличением наклона $|dG/dT|$ примерно в 5 раз при $T > T_g$ в исходном образце (эксп. исходн.); 2) почти линейное убывание G ниже calorimetric температуры стеклования T_g с ростом наклона $|dG/dT|$ в релаксированном образце при $T > T_g$ (эксп. релакс.); 3) быстрое увеличение G на 20–60% выше температуры начала кристаллизации T_x (значения различаются для стекол разного химического состава) и 4) линейное снижение μ с температурой в полностью кристаллизованном образце (эксп. крист.).

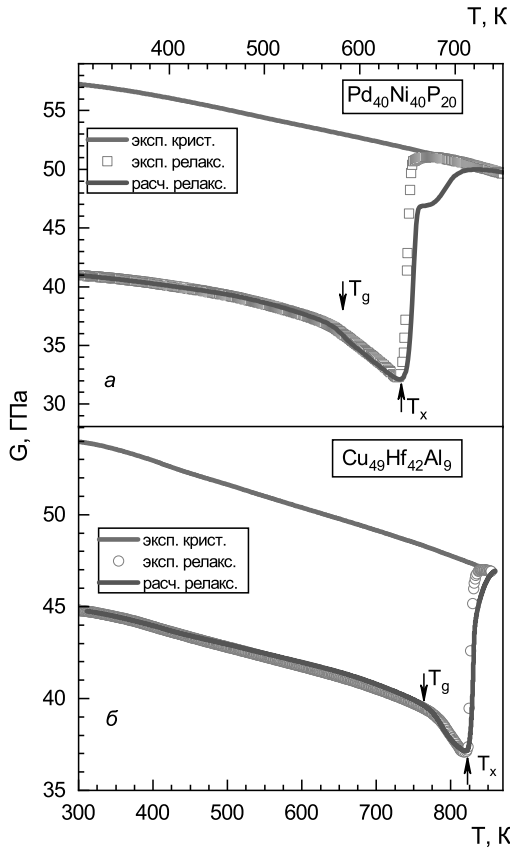


Рис. 5. (В цвете онлайн) Температурные зависимости модулей сдвига G_{rel} (экспериментальные и вычисленные с помощью уравнения (1)) и μ (зеленые линии) МС $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ (а) и $Cu_{49}Hf_{42}Al_9$ (б) в релаксированном состоянии и после кристаллизации

Рисунки 3–6 также демонстрируют вычисленные с помощью уравнения (1) на основе калориметрических данных температурные зависимости модуля сдвига для указанных МС. Параметры, взятые для расчета, перечислены в таблице. Результаты прогнозирования показаны синими пунктирными линиями для исходного (расч. исходн. на рис. 3, 4) и синими сплошными линиями для релаксированного (расч. релакс. на рис. 5, 6) состояний. Видно, что расчет правильно воспроизводит все особенности экспериментальных данных $G(T)$, упомянутые выше. Максимальные отклонения расчета от экспериментальных данных составляют 7–10% для различных исследуемых стекол. Эти отклонения наблюдаются при температурах $T > T_x$ (при резком скачке модуля сдвига, вызванном кристаллизацией) и могут быть объяснены: 1) изменением объема, происходящим при кристаллизации стекла [8, 31]; 2) потенциальным наличием температурной зависимости сдвиговой восприимчивости β при кри-

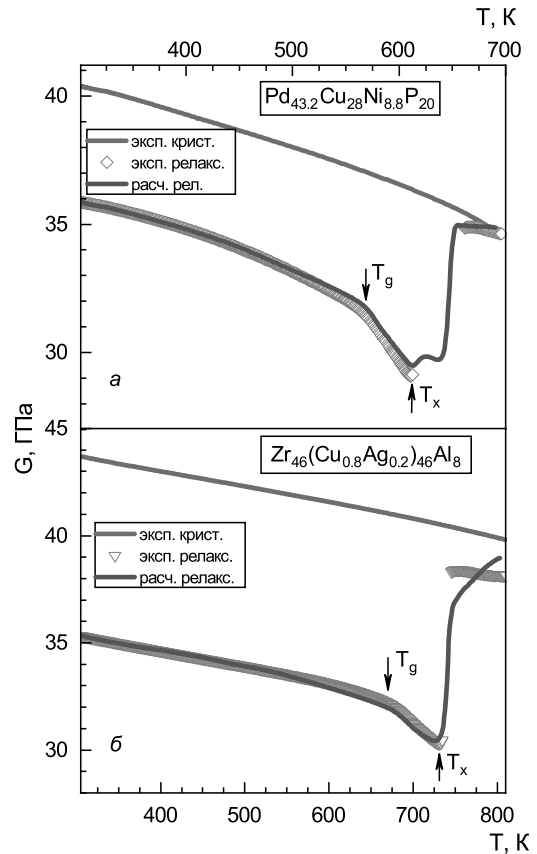


Рис. 6. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 5, но для МС $Pd_{43.2}Cu_{28}Ni_{8.8}P_{20}$ (а) и $Zr_{46}(Cu_{0.8}Ag_{0.2})_{46}Al_8$ (б)

сталлизации; 3) искажением результатов измерений температуры, связанным с большим тепловыделением при кристаллизации, а также 4) возможным ускорением кристаллизации при воздействии ультразвука [32]. Ниже температуры начала кристаллизации T_x соответствие между расчетными и экспериментальными кривыми значительно лучше, и отклонение не превышает 1%. Таким образом, уравнение (1) дает хорошее описание экспериментальной кинетики модуля сдвига при кристаллизации МС в исходном и релаксированном состояниях на основе калориметрических данных.

Уравнение (1) можно записать в дифференциальной форме:

$$\rho\beta dU = \frac{G_{rt}}{\mu_{rt}} d\mu - dG, \quad (2)$$

так как при относительно небольшом вкладе изменений объема (менее 10%) в энтальпию H стекла [31] тепловой поток можно принять равным $W \approx dU/dt$, где U — внутренняя энергия.

В результате интегрирования уравнения (2) по замкнутой траектории $T_r \rightarrow T_{cr} \rightarrow T_r$ (где T_{cr} — температура полной кристаллизации) получим выражение для избыточной внутренней энергии стекла по отношению к кристаллическому состоянию:

$$\Delta U = \frac{1}{\rho\beta}(\mu - G). \quad (3)$$

Это выражение показывает, что избыточная внутренняя энергия ΔU определяется разницей модулей сдвига стекла и кристалла и становится равной нулю при $G = \mu$. Это, в свою очередь, означает, что ΔU МС в основном определяется упругой энергией дефектов, аналогичных по своим свойствам межзвеньевым гантелям в кристаллах и замороженных в структуру стекла при его изготовлении. При кристаллизации МС эта энергия ΔU выделяется в виде тепла, что подтверждает основные выводы, полученные ранее [30].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что высокочастотный модуль сдвига металлических переохлажденных жидкостей на основе Zr, Cu и Pd при кристаллизации может быть предсказан с точностью 7–10 % по формуле (1). Для этого необходимо определить тепловой поток $W(T)$ с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии, модуль сдвига μ^{rt} материнского кристалла при комнатной температуре, его температурную зависимость $\mu(T)$, а также величину модуля сдвига при комнатной температуре для исходного G_{init}^{rt} или релаксированного G_{rel}^{rt} стекла.

Уравнение (1) предполагает, что нагрев приводит к релаксации системы замороженных при изготовлении стекла дефектов, аналогичных межзвеньевым гантелям в кристаллах, что в конечном счете ведет к полной кристаллизации. Упругая энергия этой системы дефектов определяет избыточную внутреннюю энергию стекла по отношению к материнскому кристаллу. Свойства стекла и материнского кристалла, таким образом, взаимосвязаны.

Статья посвящена Ю. П. Митрофанову, который внес существенный вклад в эту работу, но рано ушел из жизни.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-62-46003).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Немилов, ЖФХ **42**, 1391 (1968) [Russ. J. Phys. Chem. **42**, 726 (1968)].
2. J. C. Dyre, N. B. Olsen, and T. Christensen, Phys. Rev. B **53**, 2171 (1996).
3. J. C. Dyre, Rev. Mod. Phys. **78**, 953 (2006).
4. W. L. Johnson and K. Samwer, Phys. Rev. Lett. **95**, 195501 (2005).
5. J. S. Harmon, M. D. Demetriou, W. L. Johnson, and K. Samwer, Phys. Rev. Lett. **99**, 135502 (2007).
6. W. H. Wang, Prog. Mater. Sci. **57**, 487 (2012).
7. А. Н. Васильев, Ю. П. Гайдуков, УФН **141**, 431 (1983).
8. Y. P. Mitrofanov, D. P. Wang, A. S. Makarov et al., Sci. Rep. **6**, 23026 (2016).
9. Г. В. Афонин, Ю. П. Митрофанов, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, ЖЭТФ **158**, 664 (2020).
10. А. С. Макаров, Е. В. Гончарова, Ц. Ч. Цзиао и др., ЖЭТФ **160**, 213 (2021).
11. А. С. Макаров, Е. В. Гончарова, Г. В. Афонин и др., Письма в ЖЭТФ **111**, 691 (2020).
12. V. Khonik and N. Kobelev, Metals **9**, 605 (2019).
13. A. Makarov, G. Afonin, Y. Mitrofanov et al., Metals **10**, 417 (2020).
14. A. V. Granato, Phys. Rev. Lett. **68**, 974 (1992).
15. A. V. Granato, Eur. J. Phys. B **87**, 18 (2014).
16. E. V. Safonova, Yu. P. Mitrofanov, R. A. Konchakov et al., J. Phys.: Condens. Matter **28**, 215401 (2016).
17. K. Nordlund, Y. Ashkenazy, R. S. Averback, and A. V. Granato, Europhys. Lett. **71**, 625 (2005).
18. V. A. Khonik, Chin. Phys. B **26**, 016401 (2017).
19. E. V. Goncharova, R. A. Konchakov, A. S. Makarov et al., J. Non-Cryst. Sol. **471**, 396 (2017).
20. G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, N. P. Kobelev et al., Scr. Mater. **166**, 6 (2019).
21. A. S. Makarov, Yu. P. Mitrofanov, G. V. Afonin et al., Scr. Mater. **168**, 10(2019).
22. E. F. Lambson, W. A. Lambson, J. E. Macdonald et al., Phys. Rev. B **33**, 2380 (1986).
23. I. R. Lu, G. P. Görlner, and R. Willnecker, Appl. Phys. Lett. **80**, 4534 (2002).

- 24.** L. Y. Watanabe, S. N. Roberts, N. Baca et al., *Mater. Sci Eng. C* **33**, 4021 (2013).
- 25.** Z.-D. Zhu, E. Ma, and J. Xu, *Intermet.* **46**, 164 (2014).
- 26.** G. V. Afonin, S. V. Khonik, R. A. Konchakov et al., *Intermet.* **19**, 1298 (2011).
- 27.** Q. K. Jiang, X. D. Wang, X. P. Nie et al., *Act. Mater.* **56**, 1785 (2008).
- 28.** G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, A. S. Makarov et al., *J. Non-Cryst. Sol.* **475**, 48 (2017).
- 29.** A. S. Makarov, G. V. Afonin, R. A. Konchakov et al., *J. Non-Cryst. Sol.* **558**, 120672 (2021).
- 30.** G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, A. S. Makarov et al., *Acta Mater.* **115**, 204 (2016).
- 31.** N. P. Kobelev and V. A. Khonik, *J. Non-Cryst. Sol.* **427**, 184 (2015).
- 32.** T. Ichitsubo, E. Matsubara, T. Yamamoto et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 245501 (2005).

СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ГОЛОВНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ И ИХ ВЗАИМОСВЯЗЬ С МАГНИТОСФЕРНЫМИ РЕЗОНАНСАМИ

С. П. Савин^{a*}, *В. В. Ляхов*^b, *В. М. Нецадим*^b, *Л. М. Зеленый*^a,
З. Немечек^{c**}, *Я. Шафранкова*^{c***}, *Ч. Ванг*^{d****}, *С. И. Климов*^a, *С. А. Скальский*^a,
М. О. Рязанцева^a, *Л. С. Рахманова*^a, *Я. Блецки*^{e†}, *Л. А. Лежен*^a

^a *Институт космических исследований Российской академии наук
117997, Москва, Россия*

^b *DTO Institute of Ionosphere, 050020 Almaty, Kazakhstan*

^c *Charles University, 1636, Prague, Czech Republic*

^d *National Space Science Center, NAS, Beijing, China*

^e *Space Research Center, 57622, Warsaw, Poland*

Поступила в редакцию 26 августа 2021 г.,
после переработки 9 ноября 2021 г.
Принята к публикации 16 ноября 2021 г.

От ударной волны до внешней магнитосферы регистрируются резонансные моды с частотами 0.02–10 мГц, причем природа резонансов на частотах 0.02–0.25 мГц до сих пор не объяснена. Нами предложена модель ударной волны в виде круглой пластины, свободой по внешнему контуру, которая предсказывает резонансные моды на частотах 0.02–0.3 мГц и ниже. Мы демонстрируем регистрацию этих модельных резонансных мод по данным пяти спутников, причем предсказанный моделью резонанс около 0.1 мГц наблюдается в магнитослое непрерывно 17 часов как за параллельной, так и за перпендикулярной ударными волнами. Резонансные моды ударной волны вызывают трехволновые нелинейные каскады, осуществляющие широкополосную когерентную связь с резонансами как у магнитопаузы, так и внутри нее. Именно когерентный характер процессов в протяженной области с разными собственными линейными резонансными модами обуславливает, по нашему мнению, достаточно новый — нелинейно-каскадный — подход к эффективному преобразованию энергии набегающего потока при взаимодействии с препятствием. Это представляется существенным для всей нелинейной физики. Мы приводим также аргументы, указывающие на возможность за счет энергии солнечного ветра автогенерации резонансных мод в замкнутом контуре ударная волна/магнитопауза с обратной связью в виде узких импульсов вектора Пойнтинга.

DOI: 10.31857/S0044451022030087

1. ВВЕДЕНИЕ

Мы предлагаем модель генерации собственных резонансных мод ударной волны (УВ) в виде круглой пластины, свободой по внешнему контуру [1–3], и обобщаем цикл работ по изучению нелинейных

взаимодействий резонансов у внешних границ магнитосферы [4–6].

Ранее было показано, что на возмущенной солнечным ветром (СВ) УВ генерируются плазменные струи с динамическим давлением в магнитослое за УВ выше, чем в невозмущенном СВ [4]. Их можно рассматривать как нелинейные магнитогидродинамические волны в потоке СВ, термализованного на УВ. Они сталкиваются с магнитопаузой (МП), деформируют ее вблизи подсолнечной точки или даже пробивают ее на периферии. Деформированная магнитопауза, в свою очередь, возбуждает в магнитосфере альвеновские волны, которые вдоль магнит-

* E-mail: ssavin@iki.rssi.ru

** Z. Nemecek

*** J. Safrankova

**** C. Wang

† J. Blecki

ных силовых линий доходят до ионосферы и регистрируются в виде геомагнитных пульсаций [5].

Появление струй промодулировано резонансными модами УВ и МП, деформирующими УВ. Природу и регистрацию собственных мод УВ мы и изучаем в этой статье. Обратная связь МП с УВ осуществляется слабыми короткими импульсами вектора Пойнтинга. Наиболее вероятно, это нелинейные быстрые магнитозвуковые волны, вызывающие трехволновое взаимодействие с набегающим потоком плазмы с бикогерентностью до 90 % [5]. Эти импульсы, в свою очередь, промодулированы резонансными модами, генерирующимися у МП за счет ее мембранной неустойчивости на частоте 0.25–10 МГц [6]. Но многочисленные данные показывают, что регистрируются резонансные моды на более низких частотах вплоть до 0.02 МГц. Предполагая, что это происходит за счет генерации собственных мод УВ, мы предлагаем следующую простую модель.

2. МОДЕЛЬ

Головная УВ в подсолнечной области моделируется круглой магнитогидродинамической пластиной, свободной по внешнему контуру. Пластиной называется плоский однородный слой, если его толщина много меньше радиуса. Исследование колебательных свойств механических пластин имеет давнюю историю в физике сплошных сред. Так, частотное уравнение круглой механической пластины, свободной по внешнему контуру, приведено в отечественных справочниках [1, 2] и в спонсированной Национальным управлением по авиации и космосу США монографии [3]. Это уравнение имеет вид

$$\frac{\beta^2 R^2 J_n(\beta R) + (1 - \nu)[\beta R J'_n(\beta R) - n^2 J_n(\beta R)]}{\beta^2 R^2 I_n(\beta R) - (1 - \nu)[\beta R I'_n(\beta R) - n^2 I_n(\beta R)]} = \frac{\beta^3 R^3 J'_n(\beta R) + (1 - \nu)n^2[\beta R J'_n(\beta R) - J_n(\beta R)]}{\beta^3 R^3 I'_n(\beta R) - (1 - \nu)n^2[\beta R I'_n(\beta R) - I_n(\beta R)]}. \quad (1)$$

Здесь J_n и I_n — обычная и модифицированная функции Бесселя первого рода. $\beta = (\rho h \omega^2 / D)^{1/2}$, R — радиус пластины, ρ — плотность пластины, h — толщина пластины, ω — частота колебаний, цилиндрическая жесткость

$$D = \frac{E h^3}{12(1 - \nu^2)}, \quad (2)$$

E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона. Модуль Юнга E связан с модулем объемной упругости K следующим образом: $E = 3K(1 - 2\nu)$.

Сложная структура УВ не позволяет прямо применить технику уравнения Власова. Поэтому для исследования собственных колебаний фронта УВ в качестве начального приближения используем известные результаты по изучению колебаний механических пластин. Подобная процедура осуществлена нами ранее при исследовании собственных колебаний магнитопаузы, где был использован аналог механической мембраны [6]. Верификацией использованного метода в этом случае явилось практическое совпадение собственных модельных частот МП с рядом «магических частот», давно наблюдаемых и в спутниковых, и в наземных данных. Подтверждением универсальности частотного уравнения (1) является, например, его успешное применение в аэродинамике [3].

На данном этапе мы предполагаем, что наша модель может описывать часть существенных свойств УВ, и определим, какая это часть, из сравнения с экспериментом. Поскольку пластина закреплена в центре, а края ее свободно движутся, находясь под действием изгибающих моментов центральной области, мы полагаем, что именно свойства центральной области определяют основные черты колебаний пластины и резонансы. А центральная область магнитопаузы хорошо приближается плоской пластиной.

В нашей задаче необходимо перейти от механистического описания к магнитогидродинамическому применительно к головной ударной волне, образованной перед магнитосферой при ее обтекании плазмой солнечного ветра. По определению, коэффициент Пуассона равен отношению относительного сжатия образца к его относительному удлинению:

$$\nu = - \frac{\Delta d / d}{\Delta l / l}.$$

Для случая магнитогидродинамики выделенный объем плазмы при растяжении не сопровождается его сжатием, т. е. $\Delta d = 0$, поэтому $\nu = 0$. Известно, что модуль объемной упругости K для идеального газа равен $K_T = P$ для изотермического процесса (здесь P — давление). Плотность среды на фронте ударной волны $\rho = N(m_i + m_e)$, а давление

$$P = \frac{\epsilon_0 E_e^2}{2} + \frac{B^2}{2\mu_0} + \frac{N(m_i v_i^2 + m_e v_e^2)}{2} = \frac{\epsilon_0 E_e^2}{2} + \frac{B^2}{2\mu_0} + N(\Theta_i + \Theta_e). \quad (3)$$

Рассматриваемый процесс собственных колебаний фронта ударной волны можно считать изотермическим. Полученная система уравнений (1)–(3) решена

Таблица. ($f = \omega/2\pi$)

	f , мГц
$R = 3 R_E$	1) 0.00242, $h = 0.01 R_E$
	2) 0.0262
$R = 5 R_E$	1) 0.0242, $h = 0.1 R_E$
	2) 0.262
$R = 10 R_E$	1) 0.000869, $h = 0.01 R_E$
	2) 0.00944
$R = 20 R_E$	1) 0.00869, $h = 0.1 R_E$
	2) 0.0944
$R = 3 R_E$	1) 0.000216, $h = 0.01 R_E$
	2) 0.00235
$R = 5 R_E$	1) 0.00216, $h = 0.1 R_E$
	2) 0.0235
$R = 10 R_E$	1) 0.000544, $h = 0.01 R_E$
	2) 0.00592
$R = 20 R_E$	1) 0.00544, $h = 0.1 R_E$
	2) 0.0592

численно в пакете MAPLE при следующих параметрах, соответствующих головной ударной волне:

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}, & \mu_0 &= 1.26 \cdot 10^{-6} \text{ Г/м}, \\ E_e &= 0.005 \text{ В/м}, & B &= 2.5 \cdot 10^{-8} \text{ Тл}, \\ \Theta_i &= 1.6 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}, & \Theta_e &= 1.6 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}, \\ m_i &= 1836 \cdot 10^{-31} \text{ кг}, & m_e &= 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}, \\ N &= 16 \cdot 10^6 \text{ м}^{-3}, & \nu &= 0, \end{aligned}$$

R_E — радиус Земли, равный $6.374 \cdot 10^6$ м.

Ниже, в таблице приведены результаты решения частотного уравнения (1) в среде пакета MAPLE для функций Бесселя нулевого порядка и радиусов фронта головной ударной волны $R = 3, 5, 10$ и $20R_E$. Толщины $h = 0.1$ и $0.01R_E$ выбраны из статистического исследования толщин УВ [7]. (Межпланетные УВ имеют схожие параметры с околоземной.) Следует отметить, что под радиусом в случае УВ мы понимаем расстояние вдоль УВ от ее центра (подсолнечной точки) до границы резонансной области (зависящей от положения спутника в магнитослое), что позволяет качественно применять нашу модель и для изогнутой УВ аналогично МП [6]. Отметим линейную зависимость частот резонансов от толщины h в таблице при фиксированном R , а также падение частот резонансов с увеличением R . Из таблицы

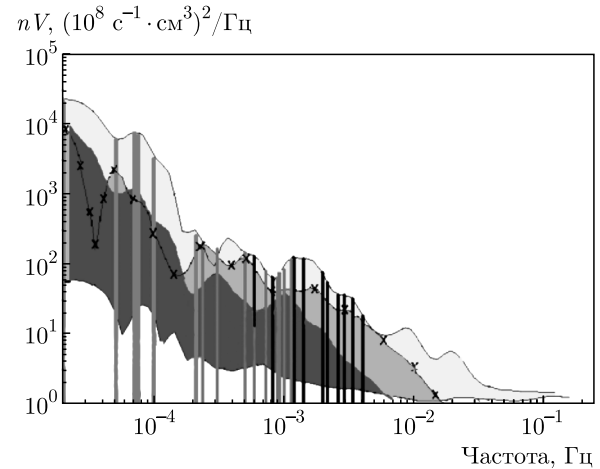


Рис. 1. Вэйвлетные спектры мощности потока плазмы nV по данным разных спутников: WIND, 20.03.2012, 13-18 UT (нижняя область без заливки); SPEKTR-R, 13-21 UT (крестики, голубая заливка); CLUSTER-4, 20.03.2012, 13-18 UT (желтая заливка); GEOTAIL, 05-24 UT (фиолетовая заливка). Красные линии — гармоники из таблицы, фиолетовые — МП с $R = 25R_E$, черные — МП с $R = 10R_E$

следует, что для функций Бесселя нулевого порядка имеются две собственные частоты. Мнимая часть решений равна нулю, что физически означает практическое отсутствие затухания или раскачки колебаний.

Мы можем сопоставлять с экспериментом только частоты свыше 0.01 мГц, поскольку спутники не находятся в физически однородных областях достаточно время, чтобы измерять более низкие частоты.

Для верификации модели мы сделали оценку характерной частоты для $R = 3R_E$ (поскольку здесь с достаточной точностью применима модель именно плоской пластины), разделив характерную скорость на диаметр пластины (максимальное расстояние на пластине, проходимое резонансной волной). Характерную скорость вдоль пластины мы оценили как среднюю проекцию скорости СВ на УВ. Результат по частоте составляет 0.25 мГц, что неплохо согласуется с максимальной частотой в таблице.

3. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

На рис. 1 мы представляем данные измерений потока плазмы nV (произведение плотности ионов на скорость), т.е. доминирующий импульс в солнечном ветре/магнитослое (СВ/МСЛ) на спутниках SPEKTR-R, GEOTAIL, CLUSTER-4 и WIND (XGSE от +14 до -17 R_E) [6]. Кроме спутника WIND, на-

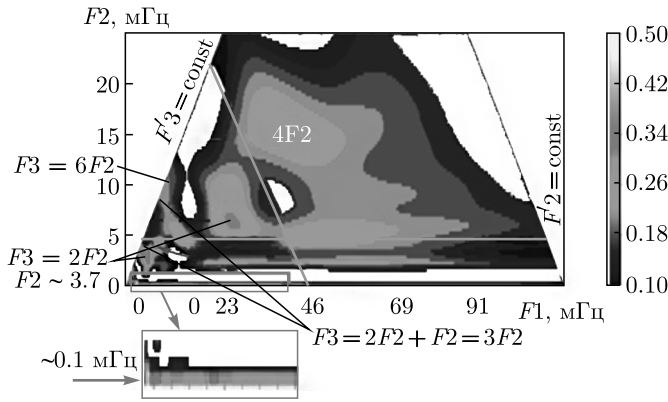


Рис. 2. Биспектрограмма nV со спутника SPECTR-R, 20.03.2012

ходящегося в СВ, все спутники, как правило, находились под ударной волной в магнитослое. Расстояние между ними в десятки радиусов Земли не позволяет определить экспериментально длины резонансных волн, которые оцениваются в несколько радиусов [4, 5]. Красными вертикальными линиями показаны гармоники УВ-резонансов, согласно таблице, черными и фиолетовыми — резонансы МП [6]. Низкочастотные МП-резонансы ($R = 25R_E$) пересекаются с резонансами УВ примерно на частоте 0.25 мГц. Экспериментальные максимумы видны вблизи УВ-резонансов на частотах 0.262, 0.0944 и 0.024 мГц (таблица). Поскольку рассматриваемые частоты много меньше протонной гирочастоты, мы считаем все волны магнитогидродинамическими. Первые две частоты относятся к максимальной толщине h . С учетом линейной зависимости частот резонансов от толщины h , за счет меньшей толщины (вплоть до 10 раз) можно объяснить более низкочастотные максимумы. Несколько более высокочастотные максимумы могут соответствовать меньшему R . Это представляется вполне удовлетворительным подтверждением применимости нашей модели УВ-резонансов.

На рис. 2 представлен биспектр nV со спутника SPECTR-R. Напомним, он выделяет когерентные процессы с частотами $F1 + F2 = F3$. На рис. 2: $F1$ — по горизонтали, $F2$ — по вертикали, $F3$ — подразумевается. Горизонтальная оранжевая линия соответствует $F'2 = \text{const}$ (накачка, « \llcorner » означает произвольные частоты), наклонная — $F'3 = \text{const}$ (распад). На рис. 2 таких каскадов можно идентифицировать по три каждого типа. Левая граница биспектрограммы соответствует $F3 = 2F2$ — генерации двукратных нелинейных гармоник. Мы назы-

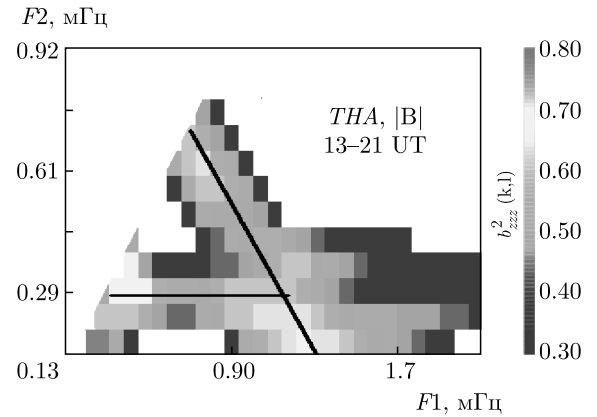


Рис. 3. Биспектрограмма со спутника THEMIS-A

ваем нелинейным трехволновым каскадом процесс (например, $F2 = \text{const}$, накачка), в котором волны на суммарной частоте снова и снова взаимодействуют с исходной $F2$: $F3 + F2 = F4$; $F4 + F2 = F5$ и т. д.

Внизу рис. 2 виден именно такой каскад (см. расширение в красной рамке). Его частота 0.1 мГц позволяет считать, что это резонанс УВ (см. таблицу, на МП частоты выше, рис. 1). Но возбуждаются также нелинейные гармоники ($2F2, 3F2, 4F2, 6F2$, см. стрелки на рис. 2), которые, свою очередь, могут возбуждать нелинейные каскады, неотличимые (по одной только величине частоты) от МП-каскадов. Подобные каскады могут возникать и вдоль оранжевой наклонной линии $F'3 = \text{const}$ (распад), но наблюдаются и прерывистые «распады», наряду с некаскадными трехволновыми взаимодействиями (см., например, рис. 2 в [6]).

На рис. 3 (опубликован ранее в нашей работе [6]) дана взвешенная биспектрограмма модуля магнитного поля $|B|$ со спутника THEMIS-A, который был в нескольких радиусах под дневной МП [6]. Она демонстрирует проникновение УВ-резонансов внутрь магнитосферы. Ширина резонансов обусловлена большим средним уровнем флуктуаций (свыше 30%): вместе со средними параметрами флуктуируют также резонансные частоты и масштабы. Внизу полоса анализа включает УВ-резонанс вблизи частоты 0.1 мГц, причем амплитуда максимальна на спектрограмме. Горизонтальная полоса 0.24–0.3 мГц (отмеченная горизонтальной черной прямой, накачка) включает УВ-резонанс на частоте 0.262 мГц (таблица). Этот горизонтальный каскад начинается максимумом $F2$ 70% (слева). Он соответствует едва заметному пику на рис. 1. Его вторая (нелинейная) гармоника близка к начальной частоте $F2$

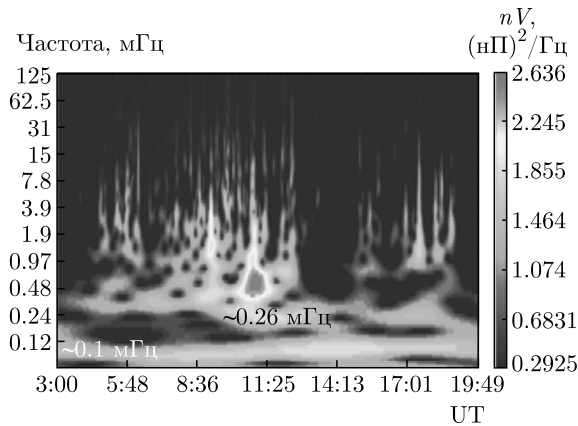


Рис. 4. Спектрограмма динамического давления со спутника DOUBLE STAR, 27.03.2005 в дневном магнитослое

наклонного каскада. Вклад МП-резонанса в накачку не исключен, но доминирование МП-резонанса с эффективным МП-радиусом в $25R_E$ мы считаем маловероятным. Таким образом, мы демонстрируем, что УВ-резонансы проникают прямо под МП, например, за счет ударов плазменных струй по МП [4, 6, 8]. Сигнал около 0.1–0.13 мГц (минимальный диапазон анализа на рис. 3) связан с горизонтальным максимумом, отмеченным черной прямой, генерацией второй (нелинейной) гармоники. Вместе они обеспечивают когерентную связь УВ-резонанса (0.1 мГц) с более высокочастотными резонансами у МП и непосредственно с внутримангнитосферными (см. ниже разд. 4 и [6, 9]), частота которых может превышать на порядок частоту исходного УВ-резонанса.

На вопрос, насколько длительными и стабильными могут быть УВ-резонансы, отвечает рис. 4. На нем дана вэйвлетная спектрограмма динамического давления (нормированного на давление в солнечном ветре) со спутника DOUBLE STAR, показывающая резонансный максимум вблизи частоты 0.1 мГц одной из гармоник из таблицы. УВ-резонанс виден в течение почти 17 часов (пока спутник находился в зоне магнитослоя ударной волны)! Небольшие вариации частоты мы приписываем как изменению внешних условий (меняющихся размеры и положение УВ), так и смещению спутника относительно УВ и МП. Вблизи другого резонанса около частоты 0.262 мГц виден горизонтальный максимум в середине рис. 4 (таблица).

В [4] отмечено, что утечка кислорода O^+ высокой энергии из магнитосферы в форшоке (солнечный ветер перед ударной волной, соединенный с ударной волной магнитным полем) коррелирует с

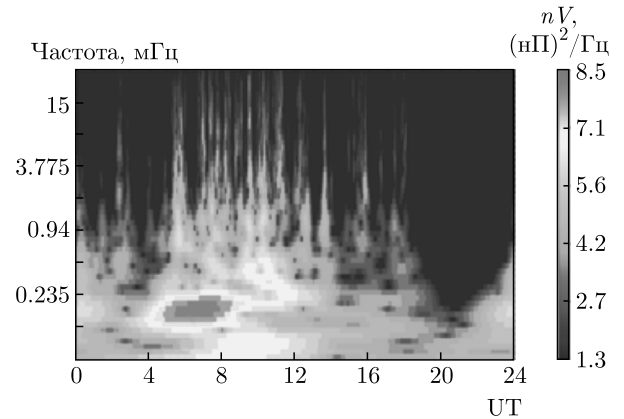


Рис. 5. Вэйвлетная кроссспектрограмма между потоком O^+ из ионосферы и динамическим давлением в форшоке (спутник CLUSTER-4, 27.03.2005). Нижний максимум на частоте около 0.1 мГц соответствует данным таблицы

динамическим давлением на CLUSTER-4. Рисунок 5 иллюстрирует роль резонансов УВ в этом процессе.

Вэйвлетная кроссспектрограмма между потоком O^+ и динамическим давлением демонстрирует два горизонтально протяженных максимума. Нижний (около 0.1 мГц), соответствующий данным таблицы, это УВ-резонанс. Наиболее яркий максимум (около 0.262 мГц) может быть как чисто за счет УВ-резонанса, так и мог возникнуть первоначально у МП с последующим возбуждением резонанса на УВ.

4. ДИСКУССИЯ

Представляется, что в настоящей работе нам удалось найти последний элемент общей картины обтекания СВ магнитосферы — сложнейшей и существенно нелинейной — и это когерентные резонансные моды, возникающие на УВ. Как мы показали раньше [4–6, 8], эти МСЛ-процессы дают «сильное эхо» во внутренней магнитосфере, ионосфере и даже в сверхзвуковом потоке СВ-форшоке. Во всех этих явлениях основополагающую роль играют трехволновые процессы. Мы подробно описываем эти процессы на примере рис. 2, 3 (см. разд. 3 и [5, 6]). Их наличие говорит о том, что амплитуды первоначально линейных резонансов, предсказываемых моделью, нарастают до нелинейных уровней, и уже трехволновые дискретные каскады и нелинейные гармоники определяют сложную взаимообусловленную картину взаимодействия резонансных УВ-мод с резонансами во внутренней и внешней магнитосфере (см. рис. 2, 3, ср. с линейным подходом внутри магнитосферы, например в [9]).

Используя упрощенную модель ударной волны в виде круглой пластины, свободной по внешнему контуру, нам удалось подтвердить гипотезу, что в такой конфигурации резонансы могут возникать на УВ на более низких частотах, чем на МП [4, 5, 8]. В работе [5] рассматривается единый синхронизованный процесс резонансов для ударной волны, магнитопаузы и магнитослоя. В работах [6, 8] показано, как синфазные резонансы распространяются до поверхности Земли за счет альвеновского резонанса магнитных силовых линий [9] и его трехволнового взаимодействия со сжимаемыми мембранными модами у МП [6]. Они являются источником наземных резонансов (так называемых «магических частот» [6]).

Если УВ-резонансы возбуждаются сразу на УВ за счет возмущений в СВ или форшоке, то модулированные плазменные струи (или более слабые флуктуации доминирующего динамического давления) прямо доходят до МП и ее деформируют [4, 8]. Горизонтальные каскады накачки (рис. 2, 3) связывают УВ-резонансы (в том числе их фазы) с более высокочастотными МП-резонансами, а также непосредственно с альвеновскими резонансами силовых линий (рис. 3) через трехволновые же взаимодействия [6]. Широкополосную когерентную связь резонансов в разных областях осуществляют именно нелинейные дискретные каскады и нелинейные гармоника, что существенно отличается от предыдущих подходов, учитывающих только линейные взаимодействия [9]. Многоспутниковая многопараметрическая демонстрация совместимости предсказаний модели УВ с экспериментальными данными, является одним из основных результатов нашей работы. Это подтверждает возможность применения нашей модели к описанию существенных свойств ударных волн.

По результатам корреляции данных с восьми спутников и 13 наземных станций 27.03.2005 [8] в 48 % случаев резонансы возбуждаются сначала у МП, а потом распространяются и к Земле, и к УВ [5, 6, 8]. МП-резонансы возбуждают синфазные УВ-резонансы, которые, деформируя УВ, создают синфазно же модулированные струи (или более слабые флуктуации динамического давления). Струи деформируют МП и вновь возбуждают МП-резонансы. Так, глобальная резонансный контур («петля») УВ-МП замыкается. Он может возникать и на УВ (в 52 % [8]). Потом трехволновые каскады «накачки» возбуждают более высокочастотные МП-резонансы, и дальше все идет опять по кругу, как и в случае первичного возбуждения резонансов у МП. При этом в петле УВ-МП с обратной связью в ви-

де узких импульсов вектора Пойнтинга, идущих к УВ [5], возможен и режим автогенерации резонансов в громадной распределенной системе УВ-МП за счет энергии вновь и вновь набегающего потока СВ, разбиваемого на струи (флуктуации динамического давления) резонансно деформируемой УВ. О возможности автогенерации говорит необычайно высокая бикогерентность (70–90 % и более [5, 8]) между слабыми импульсами, идущими от МП к УВ и несущими основную энергию динамическим давлением разрушаемого потока СВ. Причем импульсы выступают в качестве накачки обратной связи МП с УВ (см. рис. 3 в [5], ср. со слабой накачкой в лазере, синхронизирующей генерацию мощного радиоизлучения). В диапазоне частот исследуемых резонансов (УВ-МП-силовые линии) бикогерентность на рис. 2, 3 составляет 30–80 % и часто превышает 50 %. Стационарность одного из УВ-резонансов хорошо видна на рис. 4 на частоте около 0.1 МГц в течение 17 часов, которые спутник DOUBLE STAR находился в магнитосфере).

Полагаем, что когерентное действие распределенной системы с разными собственными линейными резонансами и многочисленными источниками их энергии должно существенно превосходить воздействие локализованных резонансов со случайной фазой.

Каким образом более высокочастотные МП-резонансы возбуждают низкочастотные когерентные УВ-резонансы? Лучше всего это иллюстрирует рис. 3. Допустим, черная горизонтальная прямая выделяет МП-резонансный каскад (что не исключено, рис. 1, [6]). Тогда на пересечении ее с наклонной черной прямой происходит распад вдоль этой наклонной линии, где суммарная $F3 = \text{const} = 0.7 \text{ МГц} = F2 + F1$. При этом формируется наклонный «распадный» каскад, который начинается сверху на второй (нелинейной) гармонике горизонтального каскада. Этот распадный каскад внизу доходит до горизонтального резонанса накачки вблизи частоты 0.1 МГц (т.е. здесь происходит распад $F3 = 0.7 = 0.1 + 0.6 \text{ МГц}$). Частоты 0.1 МГц близки к УВ-резонансным частотам из таблицы. В общем случае распад с сохранением $F3$ может происходить в любых дискретных точках ($F1, F2$). При этом, если частота $F2$ совпадет с более низкочастотным резонансом, то этот низкочастотный резонанс может нарастать, сохраняя фазу.

5. ВЫВОДЫ

Итак, мы предложили простую модель ударной волны и продемонстрировали регистрацию ее высо-

кочастотных резонансов 0.02–0.3 мГц по данным пяти спутников. Эти данные согласуются с нашей моделью: спектральные и биспектральные максимумы в потоке и динамическом давлении плазмы, в магнитном поле, а также кросскорреляции динамического давления и потока O^+ наблюдаются вблизи предсказанных моделью резонансных частот. Как уже упоминалось, особенно представителен в этом плане рис. 4: такой узкий и длительный резонанс в энергонесущем динамическом давлении наблюдается на предсказываемой моделью УВ-гармонике, а его регистрация в течение всего нахождения спутника DOUBLE STAR в МСЛ/СВ может свидетельствовать о практически постоянном существовании замкнутого контура (петли) взаимного возбуждения резонансов на УВ и МП (и, возможно, автогенерации). Это мы считаем одним из важных результатов нашей работы.

Отметим также значительное влияние именно УВ-резонансов на истечение O^+ из магнитосферы в форшок (которое мы демонстрируем на рис. 5).

Мы выделяем также возможность непосредственного проникновения УВ-резонансов под МП (рис. 3) без участия МП-резонансов.

Повторяем, что выявленное нами соответствие модели эксперименту постфактум подтверждает возможность использования нашей модели для описания части существенных свойств УВ-резонансов (ср. [6]).

Продемонстрированные доминирующие нелинейные процессы каскадного взаимодействия резо-

нансных мод (а также генерации нелинейных гармоник) в трех областях внешней магнитосферы могут представлять вполне определенный интерес для всей нелинейной физики.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Гонткевич, *Собственные колебания пластинок и оболочек*, Наукова думка, Киев (1964).
2. *Вибрации в технике*. Справочник в 6 томах, ред. В. Н. Челомей, Т. 1, *Колебания линейных систем*, Машиностроение, Москва (1978).
3. A. W. Leissa, *Vibration of Plates*, NASA (1969).
4. S. Savin, E. Amata, V. Budaev, L. Zelenyi et al., Письма в ЖЭТФ **99**, 19 (2014).
5. S. Savin, E. Amata, L. Zelenyi et al., JETP Lett. **101**, 323 (2019). DOI: 10.1134/S0021364019170028.
6. С. П. Савин, В. В. Ляхов, В. М. Нецадим и др., ЖЭТФ **159**, 339 (2021).
7. Z. Nemecek, J. Safrankova, O. Goncharov, L. Prech, and G. N. Zastenker, Geophys. Res. Lett. **40**, 4133 (2013). DOI: 10.1002/grl.50814.
8. S. Savin, E. Amata, L. Legen et al., Submitted to Nature Communications (2021).
9. А. С. Леонович, В. А. Мазур, *Линейная теория МГД-колебаний магнитосферы*, Физматлит, Москва (2016).

ВОЛНЫ ПУАНКАРЕ И ВОЛНЫ РОССБИ В СЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЯХ МЕЛКОЙ ВОДЫ

М. А. Юденкова^{a,b*}, Д. А. Климачков^b, А. С. Петросян^{b,a}

^a Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^b Институт космических исследований Российской академии наук
117997, Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 октября 2021 г.,
после переработки 14 октября 2021 г.
Принята к публикации 14 октября 2021 г.

Приближение мелкой воды обобщается для описания крупномасштабных течений тяжелой жидкости со свободной поверхностью. Классические уравнения мелкой воды являются альтернативой решению полной системы гидродинамических уравнений в поле силы тяжести, однако классическое приближение не учитывает плотностную неоднородность слоя жидкости. Исследовано течение тонкого слоя вращающейся жидкости со свободной поверхностью при учете эффектов сжимаемости. Получена система квазилинейных дифференциальных уравнений, которая описывает течение сжимаемой жидкости в приближении мелкой воды. Найдены решения полученной системы в виде линейных волн Пуанкаре на f -плоскости и волн Россби на β -плоскости в сжимаемых течениях. Исследована нелинейная динамика волн Россби в сжимаемых течениях методом многомасштабных разложений. Полученные трехволновые уравнения для амплитуд взаимодействующих волн проанализированы на наличие параметрических неустойчивостей, и найдены их инкременты.

DOI: 10.31857/S0044451022030099

1. ВВЕДЕНИЕ

Приближение мелкой воды играет фундаментальную роль при изучении крупномасштабных процессов в атмосферах планет и океанов. Уравнения мелкой воды широко используются в геофизической гидродинамике для исследования крупномасштабных волн и их нелинейных взаимодействий. Классические уравнения мелкой воды являются альтернативой решению полной системы гидродинамических уравнений течения жидкости со свободной границей в поле силы тяжести. Эти уравнения получаются из полных уравнений гидродинамики идеальной несжимаемой жидкости со свободной поверхностью, находящейся в поле силы тяжести, усреднением по глубине слоя в предположении гидростатичности распределения давлений и малости толщины слоя по отношению к характерному линейному размеру задачи и в пренебреже-

нии вертикальной неоднородностью плотности потока горизонтального импульса. Традиционно исследуют два типа линейных волн в приближении мелкой воды вращающейся жидкости. Первый тип — это высокочастотные волны (волны Кельвина и волны Пуанкаре (инерционно-гравитационные)), второй тип волн — это низкочастотные планетарные волны (волны Россби). Волны Кельвина и волны Пуанкаре представляют собой модифицированные вследствие вращения гравитационные волны, волны Россби образуются вследствие зависимости параметра Кориолиса от широты в течениях на вращающейся сфере.

Несмотря на фундаментальный характер приближения мелкой воды для описания течений жидкости в поле силы тяжести, классические уравнения мелкой воды не учитывают плотностную неоднородность, всегда формируемую силой гравитации. Поэтому условия применимости классических уравнений мелкой воды к реальным средам ограничиваются не только малостью отношения глубины слоя к характерному линейному размеру задачи, но и характерным вертикальным масштабом изме-

* E-mail: yudenkova.ma@phystech.edu

нения плотности вследствие наличия силы тяжести и масштабом вертикальных неоднородностей горизонтального поля скорости.

В работе предложена модель течения сжимаемой жидкости в приближении мелкой воды для описания эффектов неоднородности плотности [1]. Эта модель получается в результате усреднения по толщине слоя полных уравнений движения Эйлера сжимаемой жидкости в поле силы тяжести. Таким образом, в этом приближении фильтруются звуковые волны и учитывается зависимость плотности от давления на крупных масштабах, описывающая эффекты статической сжимаемости [2]. Такие условия возникают в течениях газов с примесями твердых частиц, например, в физике планетных колец [3], при изучении пылевых бурь на Марсе [4], крупномасштабных течений в атмосфере Земли с частицами пыли или песка [1], извержений вулканов [5, 6], а также в геофизике [7, 8].

Предложенная система выгодно отличается от традиционных уравнений мелкой воды для несжимаемой жидкости. В классических уравнениях мелкой воды высота и горизонтальная скорость столба жидкости полностью определяют его взаимодействие с остальным объемом жидкости. В уравнениях мелкой воды для сжимаемых жидкостей это взаимодействие определяется не только горизонтальной скоростью и высотой, но и средней плотностью столба жидкости. Вследствие этого учет горизонтального импульса в уравнениях происходит более точно, что является фундаментальным преимуществом при применении этих уравнений к атмосферным, океаническим и астрофизическим процессам. В работах [1, 9, 10] показано, что учет сжимаемости в модели мелкой воды приводит к улучшению предсказания скорости распространения газового потока с примесью твердых частиц. Такое приближение является альтернативой классическим многослойным моделям мелкой воды для течений с неоднородной плотностью [11], поскольку учитывает эффекты стратификации и не требует разбиения течения на несколько однородных слоев при численном моделировании крупномасштабных процессов. Фактически, приближение мелкой воды для изучения крупномасштабных неоднородных процессов в сжимаемой жидкости играет такую же фундаментальную роль, как и аналогичное приближение в гидродинамике несжимаемой однородной жидкости.

В разд. 2 получена система уравнений для сжимаемой вращающейся жидкости в приближении мелкой воды, разобраны два важных случая вращения: f -плоскость и β -плоскость. Показано,

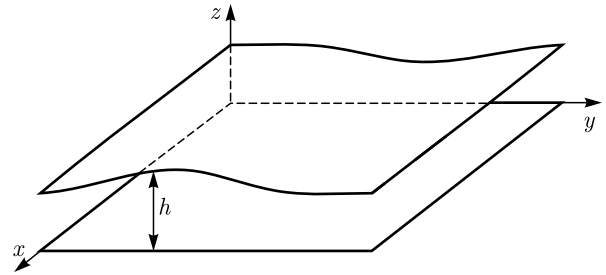


Рис. 1. Геометрия слоя жидкости

что исследование сжимаемых течений в приближении мелкой воды сводится к изучению квазилинейной системы уравнений в частных производных. В разд. 3 изучаются линейные волны в полученных системах. Для каждой системы уравнений найдены решения в виде плоских волн и их дисперсионные соотношения и описан графический метод анализа условия трехволнового синхронизма; этот метод применен к ранее полученным решениям систем уравнений. В разд. 4 рассматриваются слабонелинейные взаимодействия в сжимаемых течениях с помощью асимптотического метода многих масштабов. В Заключении приведены основные результаты работы.

2. УРАВНЕНИЯ МЕЛКОЙ ВОДЫ ДЛЯ СЖИМАЕМОГО ГАЗА С УЧЕТОМ ВРАЩЕНИЯ

В данном разделе получена система уравнений мелкой воды для сжимаемых вращающихся течений жидкости в поле силы тяжести.

Система уравнений сжимаемого газа в приближении мелкой воды получается из классических трехмерных уравнений движения сжимаемой жидкости усреднением по высоте слоя [10, 12, 13]. Предполагаем газ идеальным и политропным, распределение давлений по высоте — гидростатическим. Все процессы считаем адиабатическими. Скорости частиц жидкости и фазовые скорости возмущений полагаем малыми по сравнению со скоростью звука. Мы также пренебрегаем интегралами произведений отклонений переменных от их средних значений.

Ось z системы координат направлена вдоль вектора силы тяжести в противоположном направлении, ось x направлена вдоль широты, ось y соответственно вдоль долготы (рис. 1).

Запишем исходную систему уравнений для сжимаемой жидкости с учетом вращения:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} - f[\mathbf{e}_z \times \mathbf{u}] - \mathbf{g}, \quad (2)$$

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{const}, \quad (3)$$

$$p = \frac{1}{\mu} \rho T. \quad (4)$$

Здесь (1) — уравнение непрерывности, (2) — уравнение Эйлера с учетом вращения и силы тяжести, (3) — уравнение адиабаты идеального газа, (4) — уравнение Менделеева–Клапейрона. В системе (1)–(4) $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$ — крупномасштабная скорость, ρ — плотность газа, p — гидродинамическое давление, \mathbf{g} — ускорение свободного падения, f — параметр Кориолиса, γ — показатель адиабаты, μ — молярная масса, T — температура в энергетических единицах. Уравнения записаны в неинерциальной системе отсчета, вращающейся вместе с жидкостью.

Запишем граничные условия для системы (1)–(4):

$$u_z|_{z=0} = 0, \quad (5)$$

$$u_z|_{z=h} = \frac{\partial h}{\partial t} + u_x|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial x} + u_y|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial y}, \quad (6)$$

$$p|_{z=h} = p_h = \text{const}, \quad T|_{z=h} = T_h = \text{const}. \quad (7)$$

Высоту слоя жидкости, отсчитываемую от уровня нижней границы $z = 0$, обозначим $z = h(x, y, t)$. Выражения (5) и (6) соответствуют условию непротекания на дне и на свободной границе и обозначают обращение в нуль нормальной к поверхностям составляющей скорости жидкости. Условия (7) задают постоянные значения плотности и температуры на свободной границе. Отметим, что если на свободной границе хотя бы один из параметров p, ρ, T постоянен, то и остальные два необходимо постоянны вследствие адиабатичности процессов (3) и уравнения Клапейрона (4).

Из уравнения состояния (4) с учетом граничных условий (7) получим следующее выражение для плотности на свободной границе:

$$\rho|_{z=h} = \frac{p_h}{T_h \mu} = \rho_h. \quad (8)$$

Уравнение адиабаты (3) с учетом (7) запишется в виде

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \frac{p_h}{\rho_h^\gamma}. \quad (9)$$

Давление слоя жидкости предполагаем гидростатическим, тогда

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g. \quad (10)$$

Выразим ρ из уравнения (9) и подставим в уравнение (10). С учетом выражений (7) получим выражение для давления как функции координат и времени:

$$p(x, y, z, t) = p_h \left(1 + \frac{h-z}{H_\rho} \right)^{\gamma/(\gamma-1)}. \quad (11)$$

Тогда из (9) выразим $\rho(x, y, z, t)$:

$$\rho(x, y, z, t) = \rho_h \left(1 + \frac{h-z}{H_\rho} \right)^{1/(\gamma-1)}, \quad (12)$$

где $H_\rho = c_p T_h / g$ — характерная плотностная высота — масштаб, на котором вариация плотности по высоте становится существенной, $c_p = \mu^{-1} \gamma (\gamma - 1) = \text{const}$ — теплоемкость при постоянном давлении.

Условие гидростатического равновесия (10) означает пренебрежение вертикальными ускорениями. Это условие широко используется для описания сжимаемых астрофизических течений, таких как конвективные зоны Солнца и звезд [14], атмосфера Земли [15, 16]. Ниже показано, что использование стандартной процедуры усреднения для получения приближения мелкой воды с гидростатическим условием (10) позволяет значительно упростить исходную трехмерную систему уравнений (1)–(4). В результате получается новая система уравнений, в которой звуковые волны отфильтровываются и сохраняются эффекты крупномасштабной сжимаемости, а именно, зависимость градиента плотности от градиента давления.

Отметим, что в классических уравнениях мелкой воды для несжимаемой жидкости масса элементарного столба жидкости с единичным горизонтальным размером равна высоте свободной границы. В нашем случае приближения мелкой воды с учетом крупномасштабной сжимаемости масса элементарного столба жидкости с единичным горизонтальным размером равна произведению высоты свободной поверхности и средней плотности газа элементарного столба, при этом перенос массы между элементарными столбами отсутствует.

Усредним уравнения (1)–(4) по высоте слоя жидкости от $z = 0$ до $z = h(x, y, t)$, используя выражения для давления и плотности (11), (12) и граничные условия (5)–(7). Вынося знак интегрирования из-под знака интеграла, преобразуем слагаемые в уравнении (1) с учетом граничных условий (5) и (6):

$$\int_0^h \frac{\partial \rho}{\partial t} dz = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \rho dz - \rho|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (13)$$

$$\int_0^h \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} dz = \frac{\partial}{\partial x} \int_0^h \rho u_x dz - \rho u_x|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (14)$$

$$\int_0^h \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} dz = \frac{\partial}{\partial y} \int_0^h \rho u_y dz - \rho u_y|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial y}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \int_0^h \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} dz &= \rho u_z|_{z=h} = \\ &= \rho|_{z=h} \left(\frac{\partial h}{\partial t} + u_x|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial x} + u_y|_{z=h} \frac{\partial h}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Сложив уравнения (13)–(16), получим усредненное по высоте уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \rho dz + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^h \rho u_x dz + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^h \rho u_y dz = 0. \quad (17)$$

Аналогично, проинтегрировав x - и y -составляющие уравнения Эйлера (2) по высоте от $z = 0$ до $z = h(x, y, t)$ с учетом граничных условий (5), (6), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \rho u_x dz + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^h \rho u_x^2 dz + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^h \rho u_x u_y dz = \\ = - \int_0^h \frac{\partial p}{\partial x} dz + \int_0^h f u_x dz, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \rho u_y dz + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^h \rho u_x u_y dz + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^h \rho u_y^2 dz = \\ = - \int_0^h \frac{\partial p}{\partial y} dz - \int_0^h f u_y dz. \end{aligned} \quad (19)$$

Введем средние по высоте слоя плотность $\bar{\rho}$, давление \bar{p} и скорость \bar{u}_i :

$$\bar{\rho} = \frac{1}{h} \int_0^h \rho dz, \quad \bar{p} = \frac{1}{h} \int_0^h p dz, \quad (20)$$

$$\bar{u}_i = \frac{1}{h} \int_0^h u_i dz, \quad i = x, y. \quad (21)$$

Подставив в уравнения (20) значения давления и плотности из (11), (12), получим

$$\bar{\rho} = \frac{p_h}{h g} \left[\left(1 + \frac{h}{H_\rho} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} - 1 \right], \quad (22)$$

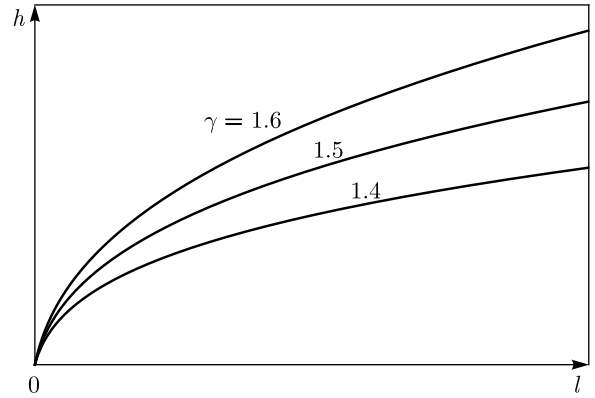


Рис. 2. Зависимости новой переменной l от высоты h при различных коэффициентах адиабаты γ

$$\begin{aligned} \bar{p} = \frac{p_h}{h} \frac{H_\rho}{\gamma/(\gamma-1) + 1} \frac{p_h}{h} \times \\ \times \left[\left(1 + \frac{h}{H_\rho} \right)^{\gamma/(\gamma-1)+1} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Величины p, ρ, u_i представим в виде суммы средних значений и малых флуктуаций: $p = \bar{p} + p', \rho = \bar{\rho} + \rho', u_i = \bar{u}_i + u'_i$. Заметим, что для малых флуктуаций

$$\int_0^h p' dz = \int_0^h \rho' dz = \int_0^h u'_i dz = 0. \quad (24)$$

Введем новую переменную l :

$$l = h \bar{p} = \frac{p_h}{g} \left[\left(1 + \frac{h}{H_\rho} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} - 1 \right], \quad (25)$$

которая, в отличие от высоты слоя h , имеет размерность длины, умноженной на плотность. На рис. 2 показана связь между новой переменной l и высотой слоя h при разных значениях показателя адиабаты γ . Новая переменная l нелинейно связана с высотой слоя h , таким образом, модернизированные уравнения относительно переменной l точнее описывают динамику высоты слоя. Однозначное соответствие между новой переменной l и высотой слоя h , согласно выражению (25), позволяет однозначно восстановить форму свободной поверхности после нахождения решения модернизированной системы уравнений.

Выразим теперь слагаемые в выражениях (17)–(19) через средние значения $\bar{p}, \bar{\rho}, \bar{u}_i$ и переменную l , пренебрегая интегралами от произведений флуктуаций:

$$\int_0^h \frac{\partial p}{\partial x} dz = g \bar{\rho} h \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{a^2 g}{l} \frac{\partial l}{\partial x}, \quad (26)$$

$$\int_0^h \rho u_i dz = \int_0^h (\bar{\rho} + \rho')(\bar{u}_i + u'_i) dz =$$

$$= \int_0^h \bar{\rho} \bar{u}_i dz + \bar{\rho} \int_0^h u'_i dz + \bar{u}_i \int_0^h \rho' dz + \int_0^h \rho' u'_i dz =$$

$$= h \bar{\rho} \bar{u}_i = l \bar{u}_i, \quad (27)$$

$$\int_0^h \rho u_i u_j dz = h \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j = l \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (28)$$

В выражении (26)

$$a^2 = \frac{l}{\rho h} \left(\frac{lg}{\rho h} + 1 \right)^{-1/\gamma}. \quad (29)$$

Новая переменная a вводится так, чтобы величина $a^2 g$ представляла собой квадрат скорости слабых возмущений в сжимаемой жидкости, в отличие от несжимаемого случая, в котором выражение для квадрата скорости слабых возмущений имеет вид gh . Таким образом, величина a^2 имеет размерность длины.

Подставив выражения (26)–(28) в усредненные по высоте слоя уравнения непрерывности и Эйлера (17)–(19), получим усредненную по высоте слоя систему

$$\frac{\partial l}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y)}{\partial y} = 0, \quad (30)$$

$$\frac{\partial(lu_x)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_x u_y)}{\partial y} + a^2 g \frac{\partial l}{\partial x} - f l u_y = 0, \quad (31)$$

$$\frac{\partial(lu_y)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y^2)}{\partial y} + a^2 g \frac{\partial l}{\partial y} + f l u_x = 0, \quad (32)$$

в которой выражение для квадрата скорости малых возмущений a^2 определено в (29). Для упрощения записи здесь и далее опущены знаки усреднения.

Система (30)–(32) является обобщением системы уравнений мелкой воды для сжимаемой жидкости, рассмотренной в работах [1, 9, 10], на двумерный случай с учетом вращения. Данная система записана в переменных поверхностной плотности слоя l и средних по высоте компонент скорости v_x и v_y . Уравнение (30) является следствием закона сохранения массы, а уравнения (31), (32) — следствием закона сохранения импульса.

Отметим отличия системы (30)–(32) от классической системы уравнений мелкой воды для несжимаемой жидкости [1]. В классической системе переменными являются высота h свободной поверхности и средняя скорость \mathbf{v} . Полученная же система

уравнений содержит переменную l , зависящую от средней плотности столба жидкости и высоты свободной поверхности. Заметим, что в выражение для плотности (12) входит параметр H_ρ — характерная плотностная высота. Отношение характерной высоты h_0 слоя к характерной плотностной высоте определяет масштаб сжимаемости. При $h_0/H_\rho \rightarrow 0$ жидкость можно считать несжимаемой, система уравнений (30)–(32) переходит в классическую систему уравнений мелкой воды для несжимаемой жидкости.

Вращение в задаче определяет параметр Кориолиса $f = 2\Omega \sin \theta$, где θ — широта, а Ω — угловая скорость вращения сферы. Далее рассмотрим два приближения: вращение на f -плоскости и на β -плоскости.

В первом случае считаем, что $f = f_0 = \text{const}$. Тогда система уравнений на f -плоскости запишется в виде

$$\frac{\partial l}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y)}{\partial y} = 0, \quad (33)$$

$$\frac{\partial(lu_x)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_x u_y)}{\partial y} + a^2 g \frac{\partial l}{\partial x} - f_0 l u_y = 0, \quad (34)$$

$$\frac{\partial(lu_y)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y^2)}{\partial y} + a^2 g \frac{\partial l}{\partial y} + f_0 l u_x = 0. \quad (35)$$

В приближении β -плоскости считаем изменение параметра Кориолиса f при малых изменениях широты θ линейным:

$$f = 2\Omega \sin \theta \approx 2\Omega \sin \theta_0 + (\theta - \theta_0) \cos \theta_0 = f_0 + \beta y. \quad (36)$$

Здесь $f_0 = 2\Omega \sin \theta_0$, $\beta = \partial f / \partial y$. Подставим параметр Кориолиса (36) в систему (30)–(32) и продифференцируем уравнение (31) по y , чтобы исключить y из уравнения. Таким образом, в приближении β -плоскости система (30)–(32) перепишется в виде

$$\frac{\partial l}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y)}{\partial y} = 0, \quad (37)$$

$$\frac{\partial^2(lu_x)}{\partial y \partial t} + \frac{\partial^2(lu_x^2)}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2(lu_x u_y)}{\partial y^2} + \frac{\partial(a^2 g)}{\partial y} +$$

$$+ a^2 g \frac{\partial^2 l}{\partial y \partial x} - f_0 \frac{\partial(lu_y)}{\partial y} - \beta l u_y = 0, \quad (38)$$

$$\frac{\partial(lu_y)}{\partial t} + \frac{\partial(lu_x u_y)}{\partial x} + \frac{\partial(lu_y^2)}{\partial y} \frac{\partial l}{\partial x} + a^2 g \frac{\partial l}{\partial y} + f_0 l u_x = 0. \quad (39)$$

Таким образом, исследование сжимаемых течений в приближении мелкой воды сводится к исследованию квазилинейной системы уравнений (30)–(32). Далее будем анализировать эту систему как в приближении f -плоскости (33)–(35), так и в приближении β -плоскости (37)–(39).

3. ЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ В СЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЯХ МЕЛКОЙ ВОДЫ

В данном разделе будем изучать волновые процессы в течении тонкого сжимаемого слоя газа в линейном приближении. Для этого линеаризуем систему уравнений в f -приближении (33)–(35) и β -приближении (37)–(39) около стационарных решений и найдем решения в виде плоских волн. Также сравним полученные дисперсионные соотношения с аналогичными результатами для несжимаемых течений.

3.1. Волны Пуанкаре в сжимаемых течениях на f -плоскости

Обратимся к системе уравнений на f -плоскости (33)–(35). Линеаризуя систему около стационарного решения $l = l_0, u_x = u_y = 0$, получим

$$\frac{\partial l}{\partial t} + l_0 \frac{\partial u_x}{\partial x} + l_0 \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0, \quad (40)$$

$$l_0 \frac{\partial u_x}{\partial t} + a_0^2 g \frac{\partial l}{\partial x} - f_0 l_0 u_y = 0, \quad (41)$$

$$l_0 \frac{\partial u_y}{\partial t} + a_0^2 g \frac{\partial l}{\partial y} + f_0 l_0 u_x = 0. \quad (42)$$

Здесь $a_0^2 = a^2(l_0)$, функция $a^2(l)$ определена в (29).

Ищем решение линеаризованной системы в виде плоских волн:

$$\begin{pmatrix} l \\ u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{l} \\ \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \end{pmatrix} \exp(-i\omega t + ik_x x + ik_y y), \quad (43)$$

где ω — частота волны, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)^T$ — волновой вектор.

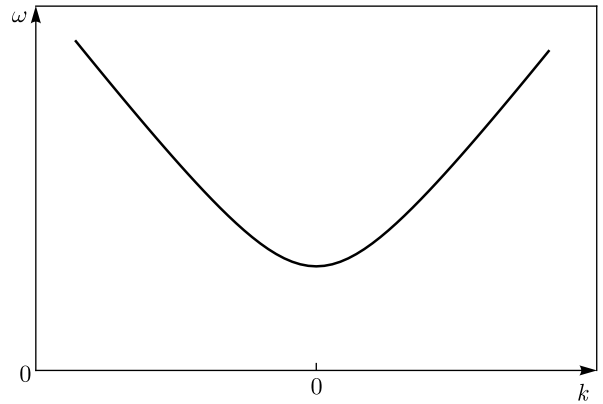


Рис. 3. Проекция дисперсионной поверхности волны Пуанкаре

После подстановки решения в виде плоской волны (43) в линеаризованную систему (40)–(42) получим систему линейных однородных уравнений

$$\begin{pmatrix} -\omega & k_x l_0 & k_y l_0 \\ -k_x a_0^2 g & \omega l_0 & -i f_0 l_0 \\ -k_y a_0^2 g & i f_0 l_0 & \omega l_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{l} \\ \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (44)$$

Однородная система (44) имеет нетривиальное решение, когда определитель матрицы системы равен нулю. Приравняв определитель матрицы к нулю, получим уравнение для нахождения дисперсионного соотношения:

$$\omega^3 + \omega f_0^2 + \omega(k_x^2 + k_y^2)a_0^2 g = 0. \quad (45)$$

Уравнение (45) имеет нулевое решение и два нетривиальных решения:

$$\omega = \pm \sqrt{f_0^2 + k^2 a_0^2 g}. \quad (46)$$

Уравнение (46) описывает дисперсионное соотношение для линейной волны в сжимаемой жидкости на f -плоскости. Полученная волна известна как волна Пуанкаре, ее дисперсионное соотношение изображено на рис. 3. Заметим, что частота волны всегда превышает частоту Кориолиса f_0 .

В коротковолновом пределе, когда

$$k^2 \gg \frac{f_0^2}{a_0^2 g}, \quad (47)$$

дисперсионное соотношение сводится к случаю без вращения. Физически это значит, что длина волны много меньше радиуса деформации Россби $L = \sqrt{a_0^2 g / f_0}$ [17]. Тем не менее длина волны должна быть больше толщины слоя жидкости, чтобы выполнялось приближение мелкой воды.

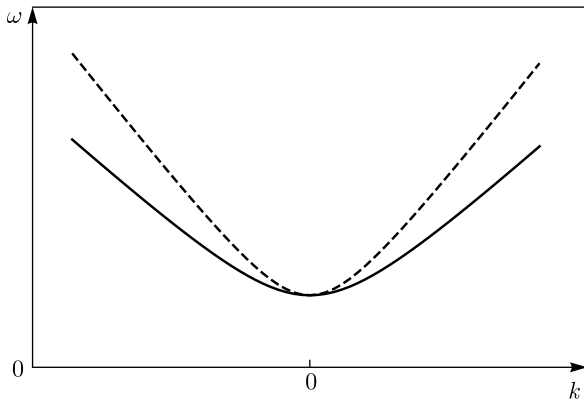


Рис. 4. Проекция дисперсионной поверхности волны Пуанкаре в несжимаемой жидкости (штриховая линия) и в сжимаемой жидкости (сплошная линия)

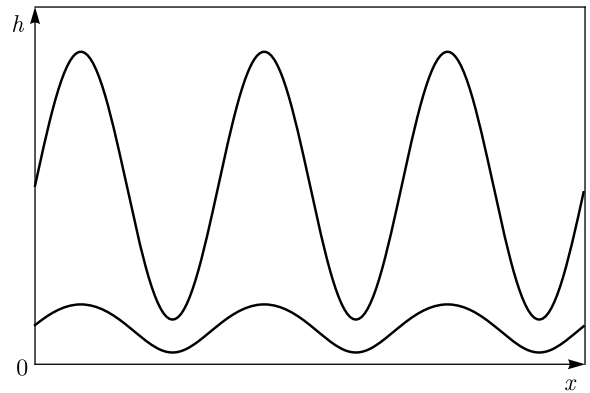


Рис. 5. Свободная поверхность в сжимаемой (нижняя кривая) и несжимаемой (верхняя кривая) жидкостях

В длинноволновом пределе, когда

$$k^2 \ll \frac{f_0^2}{a_0^2 g}, \quad (48)$$

т.е. длина волны много больше радиуса деформации L , дисперсионные соотношения преобразуются и имеет вид

$$\omega = f_0. \quad (49)$$

Этот случай известен как инерционные колебания.

Заметим, что если высота слоя жидкости много меньше характерной высоты H_ρ , то $a_0^2 \approx h_0$ и дисперсионное соотношение (46) переходит в дисперсионное соотношение для волны Пуанкаре в несжимаемой жидкости [18]:

$$\omega = \pm \sqrt{f_0^2 + hgk^2}. \quad (50)$$

На рис. 4 изображены проекции дисперсионных поверхностей волн Пуанкаре в сжимаемой (46) и несжимаемой (50) жидкостях. На рисунке видно, что дисперсионные соотношения (46) и (50) — уравнения одного вида, однако наличие сжимаемости влияет на кривизну дисперсионных поверхностей.

На рис. 5 представлены решения для высоты h свободной поверхности в случае несжимаемой жидкости и в случае учета крупномасштабной сжимаемости. Учет эффектов сжимаемости позволяет скорректировать решение для высоты свободной поверхности. Таким образом, реальная высота свободной поверхности в сжимаемой жидкости меньше предсказываемой в модели несжимаемой жидкости. Кроме того, форма свободной поверхности в случае распространения одиночной плоской волны, в отличие от случая несжимаемой жидкости, имеет фор-

му, отличающуюся от синусоиды. Решение уравнений для сжимаемой жидкости переходит в решение для несжимаемой жидкости, когда $h/H_\rho \rightarrow 0$.

3.2. Волны Пуанкаре и Россби на β -плоскости

Аналогичным образом найдем дисперсионные соотношения для линейных волн на β -плоскости. Линеаризуя систему (37)–(39) около стационарного решения $l = l_0, u_x = u_y = 0$, получим

$$\frac{\partial l}{\partial t} + l_0 \frac{\partial u_x}{\partial x} + l_0 \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0, \quad (51)$$

$$l_0 \frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial t} + a_0^2 g \frac{\partial^2 l}{\partial y \partial x} - f_0 l_0 \frac{\partial u_y}{\partial y} - \beta l_0 u_y = 0, \quad (52)$$

$$l_0 \frac{\partial u_y}{\partial t} + a_0^2 g \frac{\partial l}{\partial y} + f_0 l_0 u_x = 0. \quad (53)$$

После подстановки плоской волны (43) в линеаризованную систему (51)–(53) получим систему линейных однородных уравнений

$$\begin{pmatrix} -\omega & k_x l_0 & k_y l_0 \\ -k_x k_y a_0^2 g & \omega k_y l_0 & -i k_y f_0 l_0 - \beta l_0 \\ -k_y a_0^2 g & i f_0 l_0 & \omega l_0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{l} \\ \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (54)$$

Приравняв детерминант матрицы системы к нулю, получим уравнение

$$\omega^3 - \omega(f_0^2 + a_0^2 g k^2) - \beta a_0^2 g k_x = 0. \quad (55)$$

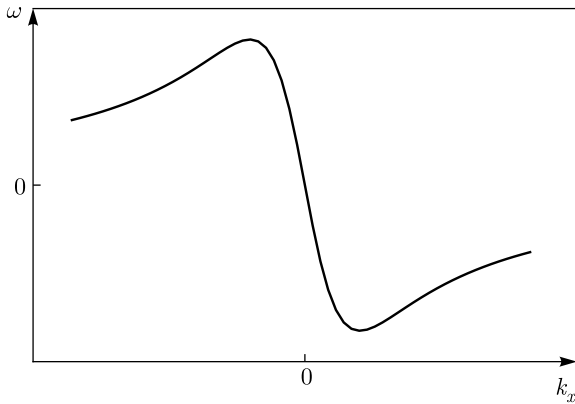


Рис. 6. Проекция дисперсионной поверхности волны Россби на k_x

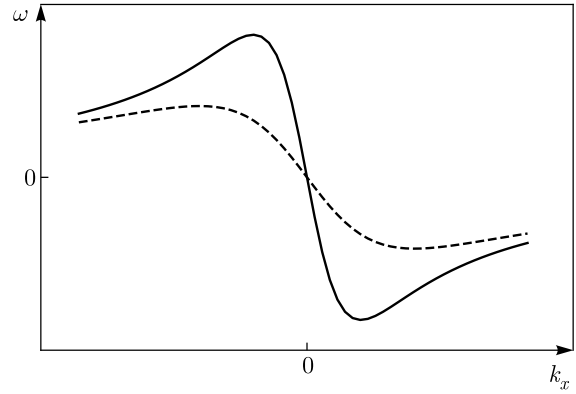


Рис. 7. Проекция дисперсионной поверхности волны Россби в несжимаемой (штриховая линия) и в сжимаемой (сплошная линия) жидкостях

Точное решение этого уравнения дается формулой Кардано:

$$\omega_1 = A + B, \quad \omega_{2,3} = -\frac{A+B}{2} \pm i\frac{A-B}{2}\sqrt{3}, \quad (56)$$

где

$$A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}}, \quad B = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}},$$

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{3}\right)^3, \quad p = -(f_0^2 + a_0^2 g k^2), \\ q = -\beta a_0^2 g k_x.$$

Рассмотрим два важных предельных случая. В коротковолновом пределе, если

$$k_x \gg \frac{f_0^3}{\beta a_0^2 g} = \frac{1}{L^2} \frac{f_0}{\beta},$$

то дисперсионное соотношение принимает вид

$$\omega^2 = f_0^2 + a_0^2 g k^2, \quad (57)$$

что соответствует случаю волны Пуанкаре. В длинноволновом пределе, если

$$k_x \ll \frac{f_0^3}{\beta a_0^2 g} = \frac{1}{L^2} \frac{f_0}{\beta},$$

то

$$\omega = -\frac{\beta a_0^2 g k_x}{f_0^2 + a_0^2 g k^2}. \quad (58)$$

Волна, описываемая данным дисперсионным соотношением, называется волной Россби. На рис. 6 изображена дисперсионная поверхность волны Россби (57), (58) в проекции на k_x .

Отметим, что если масштаб плотностной неоднородности много больше высоты слоя жидкости, то

дисперсионное соотношение волны Россби перейдет в дисперсионное соотношение для волны Россби в случае несжимаемой жидкости:

$$\omega = -\frac{\beta h g k_x}{f_0^2 + h g k^2}. \quad (59)$$

На рис. 7 приводится сравнение проекций дисперсионных поверхностей волны Россби в несжимаемой жидкости (59) и волны Россби в сжимаемой жидкости (58). Как и в случае с волной Пуанкаре, наличие сжимаемости влияет на кривизну дисперсионных поверхностей.

Таким образом, полученные в линейном приближении дисперсионные уравнения (46) и (58) имеют тот же вид, что и дисперсионные уравнения (50), (59) в несжимаемой жидкости, и отличаются только числовыми коэффициентами. При этом в несжимаемом пределе дисперсионные уравнения (46) и (58) переходят в уравнения (50) и (59) соответственно.

3.3. Качественный анализ трехволновых взаимодействий

Определим, для каких из полученных типов волн возможны резонансные взаимодействия. Для того чтобы три волны испытывали взаимодействие, необходимо выполнение условия трехволнового синхронизма:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3, \quad \omega_1(\mathbf{k}_1) + \omega_2(\mathbf{k}_2) = \omega_3(\mathbf{k}_3), \quad (60)$$

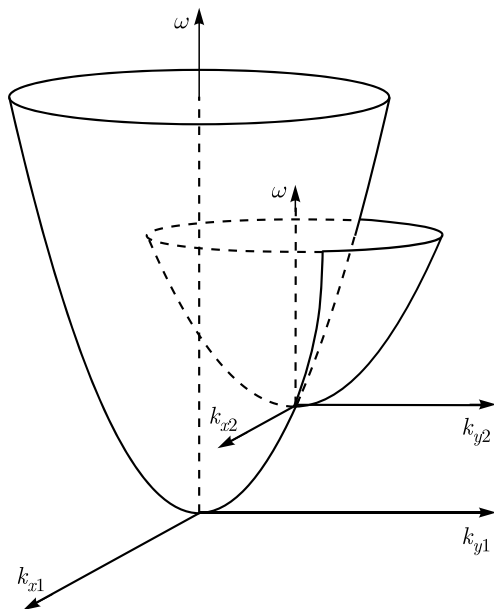


Рис. 8. Пересечение дисперсионных поверхностей взаимодействующих волн

где \mathbf{k}_i — волновые векторы взаимодействующих волн, $\omega_i(\mathbf{k})$ — дисперсионное соотношение для соответствующей волны.

Будем рассматривать условие резонанса как пересечение дисперсионных поверхностей [19]. Для двумерного вектора $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ функция $\omega(\mathbf{k})$ задает поверхность в трехмерном пространстве ω, k_x, k_y . Рассмотрим две поверхности (рис. 8): S_1 , заданную уравнением $\omega = \omega_1(\mathbf{k})$, и S_2 , заданную уравнением $\omega = \omega_1(\mathbf{k}_1) + \omega_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) = \omega_1(\mathbf{k}_1) + \omega_2(\mathbf{k}_2)$ — вторым слагаемым условия синхронизма (60) в смещенной точке $(\mathbf{k}_1, \omega_1(\mathbf{k}_1))$. Если поверхности пересеклись, обозначим точку пересечения \mathbf{k}_3 . Пересечение дисперсионных поверхностей S_1 и S_2 означает, что существует вектор $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ и некоторая дисперсионная поверхность $\omega_3(\mathbf{k})$ такая, что

$$\omega_3(\mathbf{k}_3) = \omega_3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) = \omega_2(\mathbf{k}_2) + \omega_1(\mathbf{k}_1).$$

Проанализируем дисперсионные соотношения линейных волн для системы уравнений на f -плоскости (33)–(35), описывающей волны Пуанкаре (46). Покажем, что для волн Пуанкаре не выполняется условие трехволнового синхронизма (60). На рис. 9 изображены проекции дисперсионных поверхностей двух волн Пуанкаре на плоскость k_x, ω . Очевидно, что дисперсионные поверхности не имеют пересечений, а значит, условие синхро-

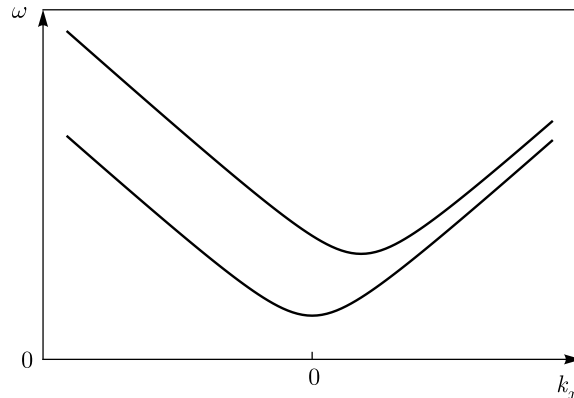


Рис. 9. Отсутствие синхронизма трех волн Пуанкаре

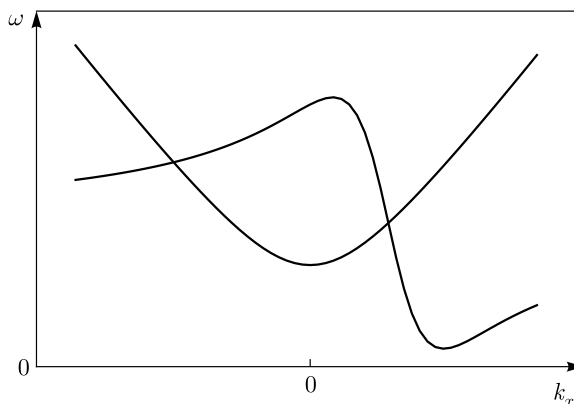


Рис. 10. Условие трехволнового синхронизма для двух волн Россби и волны Пуанкаре

низма (60) не выполняется. Таким образом, для волн на f -плоскости трехволновое взаимодействие невозможно.

Для системы уравнений на β -плоскости (37)–(39) были получены дисперсионные соотношения волны Пуанкаре (57) и волны Россби (58). Возможны четыре конфигурации взаимодействия волн: три волны Пуанкаре; две волны Пуанкаре и волна Россби; волна Пуанкаре и две волны Россби; три волны Россби.

Дисперсионные поверхности двух волн Пуанкаре не имеют пересечений, поэтому трехволновое взаимодействие невозможно для трех волн Пуанкаре, а также для двух волн Пуанкаре и волны Россби.

На рис. 10 изображены проекции волновых поверхностей на ось k_x дисперсионной поверхности волны Пуанкаре и волны Россби в смещенной точке. Кривые имеют пересечение, поэтому выполняет-

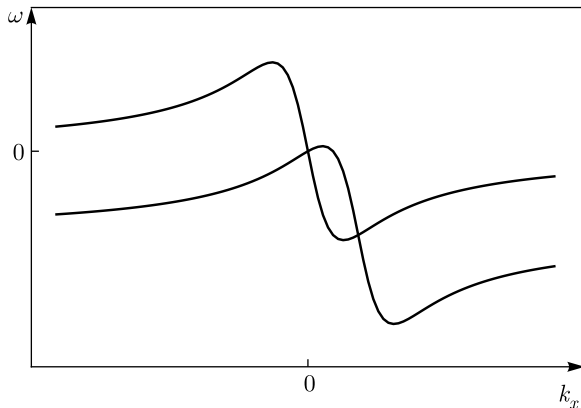


Рис. 11. Условие трехволнового синхронизма для трех волн Россби

ся условие трехволнового синхронизма. Аналогично на рис. 11 показано пересечение проекций волновых поверхностей волн Россби.

Таким образом, для системы уравнений на β -плоскости (37)–(39) возможны трехволновые взаимодействия для двух конфигураций — трех волн Россби, а также двух волн Россби и одной волны Пуанкаре. В обоих случаях это означает существование таких волновых векторов \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , что условие трехволнового синхронизма (60) выполнено [20].

4. СЛАБОНЕЛИНЕЙНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЯХ В ПРИБЛИЖЕНИИ МЕЛКОЙ ВОДЫ

В предыдущем разделе было показано, что в приближении f -плоскости существуют линейные волны Пуанкаре, для которых волновые взаимодействия невозможны. Между тем, на β -плоскости есть два типа волн — волны Пуанкаре в коротковолновом диапазоне и волны Россби в длинноволновом диапазоне. Условие трехволнового синхронизма для этих волн выполняется в двух вариантах: для трех волн Россби, для двух волн Россби и одной волны Пуанкаре.

4.1. Метод многих масштабов

Исследуем систему уравнений на β -плоскости (37)–(39), для которой ранее была качественно показана возможность трехволновых взаимодействий.

Для изучения слабонелинейных взаимодействий используем асимптотический метод многих масштабов [21]. В основе метода многих масштабов лежит идея перехода от одного набора аргументов a к нескольким наборам A_n , таких что $A_0 = a$, $A_1 = \varepsilon a$, $A_2 = \varepsilon^2 a$ и т. д. В нашем случае разложим аргументы t, x, y на «быстрые» переменные T_0, X_0, Y_0 и «медленные» переменные T_1, X_1, Y_1 . В таком случае операторы частных производных переписутся в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial T_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial T_1}, \tag{61}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial X_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial X_1}, \tag{62}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial Y_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial Y_1}. \tag{63}$$

Решение системы (61)–(63) будем искать в виде асимптотического ряда по степеням ε :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \varepsilon \mathbf{u}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{u}_2 + \dots \tag{64}$$

Здесь $\mathbf{u} = (l, u_x, u_y)^T$ — вектор-решение, $\mathbf{u}_0 = (l_0, u_{x0}, u_{y0})^T$ — стационарное решение, $\mathbf{u}_1 = (l_1, u_{x1}, u_{y1})^T$ — решение линеаризованной системы (51)–(53), \mathbf{u}_2 — квадратичная поправка.

Приравнивая слагаемые нулевого порядка по ε , получаем стационарное решение, приравнивая слагаемые первого порядка по ε , получаем линейную систему (51)–(53).

Подставим в исходную систему уравнений на β -плоскости разложение (64) и выражения для частных производных (61)–(63). Выписав слагаемые с ε^2 , получим систему

$$\hat{A} \mathbf{u}_2 = \hat{S} \mathbf{u}_1 + \hat{R}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1), \tag{65}$$

где \hat{A} — линейный оператор, действующий на квадратичную поправку, такой, что

$$\hat{A} \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\partial l_2}{\partial T_0} + l_0 \frac{\partial u_{x2}}{\partial X_1} + l_0 \frac{\partial u_{y2}}{\partial Y_0} \\ l_0 \frac{\partial^2 u_{x2}}{\partial Y_0 \partial T_1} + a_0^2 g \frac{\partial^2 l_2}{\partial Y_0 \partial T_0} - f_0 \frac{\partial u_{y2}}{\partial Y_0} - \beta l_0 u_{y2} \\ l_0 \frac{\partial u_{y2}}{\partial T_0} + a_0^2 g \frac{\partial l_2}{\partial Y_0} + f_0 l_0 u_{x2} \end{pmatrix}, \tag{66}$$

\hat{S} — линейный оператор, действующий на линейную поправку, такой, что

$$\hat{S}\mathbf{u}_1 = - \begin{pmatrix} \frac{\partial l_1}{\partial T_1} + l_0 \frac{\partial u_{x1}}{\partial X_1} + l_0 \frac{\partial u_{y1}}{\partial Y_1} \\ l_0 \frac{\partial^2 u_{x1}}{\partial Y_0 \partial T_1} + l_0 \frac{\partial^2 u_{x1}}{\partial Y_1 \partial T_0} + a_0^2 g \frac{\partial^2 l_1}{\partial Y_0 \partial X_1} + a_0^2 g \frac{\partial l_1}{\partial Y_1 \partial X_0} - f_0 l_0 \frac{\partial u_{y1}}{\partial Y_1} \\ l_0 \frac{\partial u_{y1}}{\partial T_1} + a_0^2 g \frac{\partial l_1}{\partial Y_1} \end{pmatrix}, \quad (67)$$

\hat{R} — нелинейный оператор такой, что

$$\hat{R}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = - \begin{pmatrix} \frac{\partial(l_1 u_{x1})}{\partial X_0} + \frac{\partial(l_1 u_{y1})}{\partial Y_0} \\ \frac{\partial^2(l_1 u_{x1})}{\partial Y_0 \partial T_0} + l_0 \left(\frac{\partial^2 u_{x1}^2}{\partial Y_0 \partial X_0} + \frac{\partial^2(u_{x1} u_{y1})}{\partial Y_0^2} \right) \\ \frac{\partial(l_1 u_{y1})}{\partial T_0} + l_0 \frac{\partial(u_{x1} u_{y1})}{\partial X_0} + l_0 \frac{\partial u_{y1}^2}{\partial Y_0} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{a_0^2 g}{L} \left(\frac{\partial l_1}{\partial Y_0} \frac{\partial l_1}{\partial X_0} + l_1 \frac{\partial^2 l_1}{\partial Y_0 \partial X_0} \right) - f_0 \frac{\partial(l_1 u_{y1})}{\partial Y_0} - \beta l_1 u_{y1} \\ a_0 g \frac{l_1}{L} \frac{\partial l_1}{\partial Y_0} + f_0 l_1 u_{x1} \end{pmatrix}. \quad (68)$$

Здесь величина

$$\frac{1}{L} = \frac{1}{l_0} - \frac{g}{\gamma} \frac{1}{p + l_0 g}$$

получается при разложении величины a^2 , заданной формулой (29), в ряд по ε .

В правой части уравнения (65) содержатся слагаемые, полученные при решении линеаризованной системы уравнений (51)–(53). Они могут привести к линейному по времени или координате росту решения, что приведет к нарушению условия малости поправки по сравнению с решением линейной задачи ($\varepsilon^2 \mathbf{u}_2 \ll \varepsilon \mathbf{u}_1$) на больших масштабах. Чтобы исключить влияние резонансных слагаемых, введем зависимость амплитуды волны от медленных переменных, а фазы волны — от быстрых переменных:

$$\mathbf{u}_1 = \hat{\mathbf{u}}_1(T_1, X_1, Y_1) \exp(-i\omega T_0 + ik_x X_0 + ik_y Y_0). \quad (69)$$

Если искать \mathbf{u}_2 в виде линейных волн, то получим систему

$$A\hat{\mathbf{u}}_2 = \mathbf{b}, \quad (70)$$

где \mathbf{b} — вектор правой части, который можно найти подстановкой выражения для линейной поправки (69) в правую часть уравнения (65), A — матрица

системы. Матрица A совпадает с матрицей однородной системы (54):

$$A = \begin{pmatrix} -\omega & k_x l_0 & k_y l_0 \\ -k_x k_y a_0^2 g & \omega k_y l_0 & -ik_y f_0 l_0 - \beta l_0 \\ -k_y a_0^2 g & i f_0 l_0 & \omega l_0 \end{pmatrix}. \quad (71)$$

При выполнении дисперсионного соотношения (55) определитель матрицы A равен нулю. Воспользуемся теоремой Фредгольма, чтобы найти условие совместности системы (70). Система алгебраических уравнений совместна тогда и только тогда, когда каждое решение сопряженной однородной системы $\mathbf{z}^T A = 0$ ортогонально вектору правой части \mathbf{b} .

Найдем вектор $\mathbf{z} = (z_1, z_2, z_3)^T$ из системы

$$-\omega z_1 - k_x k_y a_0^2 g z_2 - k_y a_0^2 g z_3 = 0, \quad (72)$$

$$k_x l_0 z_1 + \omega k_y l_0 z_2 - i f_0 l_0 z_3 = 0, \quad (73)$$

$$k_y z_1 + (-ik_y f_0 l_0 - \beta l_0) z_2 + \omega l_0 z_3 = 0. \quad (74)$$

Поскольку уравнения (72)–(74) линейно зависимы, мы можем выразить компоненты вектора \mathbf{z} через уравнения (72) и (73). Тогда получим

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 1 \\ a_0^2 g (if_0 - \omega k_y) \\ \frac{if_0 \omega - k_x k_y a_0^2 g}{k_y (\omega^2 - k_x a_0^2 g)} \end{pmatrix} c, \quad (75)$$

где c — произвольная константа.

4.2. Уравнения трехволновых взаимодействий

Представим решение в виде трех волн, удовлетворяющих условию синхронизма (60):

$$\mathbf{u}_1 = \phi \mathbf{a}(\mathbf{k}_1) \exp(i\theta_1) + \psi \mathbf{a}(\mathbf{k}_2) \exp(i\theta_2) + \chi \mathbf{a}(\mathbf{k}_3) \exp(i\theta_3) + \text{c.c.} \quad (76)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \phi &= \phi(T_1, X_1, Y_1), & \psi &= \psi(T_1, X_1, Y_1), \\ \chi &= \chi(T_1, X_1, Y_1) \end{aligned}$$

— амплитуды взаимодействующих волн, $\theta_i = -\omega(\mathbf{k}_i)T_0 + k_x X_0 + k_y Y_0$ — фазы волн, \mathbf{a} — собственный вектор матрицы A . Так как для волновых взаимодействующих волн выполняется условие синхронизма (60), то $\theta_3 = \theta_1 + \theta_2$.

Подставим (76) в правую часть уравнения (65). Выпишем часть, пропорциональную $\exp(i\theta_1)$:

$$\begin{aligned} \hat{S}\mathbf{u}_1 + \hat{R}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) &= - \left(\begin{array}{c} a_1 \frac{\partial \phi}{\partial T_1} + a_2 l_0 \frac{\partial \phi}{\partial X_1} + a_3 l_0 \frac{\partial \phi}{\partial Y_1} \\ ia_2 l_0 k_{y1} \frac{\partial \phi}{\partial T_1} - ia_2 l_0 \omega(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \phi}{\partial Y_1} + ia_1 a_0^2 g k_{y1} \frac{\partial \phi}{\partial X_1} - a_3 f_0 l_0 \frac{\partial \phi}{\partial Y_1} + ia_1 a_0^2 g k_{x1} \frac{\partial \phi}{\partial Y_1} \\ a_3 l_0 \frac{\partial \phi}{\partial T_1} + a_1 a_0^2 g \frac{\partial \phi}{\partial Y_1} \end{array} \right) - \\ &- \left(\begin{array}{c} 2ia_1 a_2 k_{x1} \psi^* \chi + 2ia_1 a_3 k_{y1} \psi^* \chi \\ 2a_1 a_2 k_{y1} \omega(\mathbf{k}_1) \psi^* \chi - 2l_0 a_2^2 k_{x1} k_{y1} \psi^* \chi - 2l_0 a_2^2 k_{y1}^2 \\ -2ia_1 a_3 \omega(\mathbf{k}_1) \psi^* \chi + 2il_0 a_2 a_3 k_x + 2il_0 a_3^2 k_{y1} \psi^* \chi \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} 0 \\ 4 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 k_{x1} k_{y1} \psi^* \chi - if_0 a_1 a_3 k_{y1} \psi^* \chi - \beta a_1 a_3 \psi^* \chi \\ 2 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 k_{y1} \psi^* \chi + f_0 a_1 a_2 \psi^* \chi \end{array} \right). \quad (77) \end{aligned}$$

Домножим получившееся выражение (77) на вектор-решение \mathbf{z} сопряженной системы и получим уравнение для амплитуды ϕ первой волны

$$s_1 \phi = f_1 \psi^* \chi. \quad (78)$$

Здесь s_1 — линейный дифференциальный оператор по переменным T_1, X_1, Y_1 :

$$s_1 = r_1 \frac{\partial}{\partial T_1} + p_1 \frac{\partial}{\partial X_1} + q_1 \frac{\partial}{\partial Y_1}, \quad (79)$$

$$r_1 = a_1 z_1 + ia_2 z_2 l_0 k_{y1} + a_3 l_0 z_3, \quad (80)$$

$$p_1 = a_2 z_1 l_0 + ia_1 z_2 a_0^2 g k_{y1}, \quad (81)$$

$$\begin{aligned} q_1 &= a_3 z_1 l_0 - ia_2 z_2 l_0 \omega(\mathbf{k}_1) - \\ &- a_3 z_2 f_0 l_0 + ia_1 z_2 a_0^2 g k_{x1}, \quad (82) \end{aligned}$$

где $\mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{k}_1)$ — собственный вектор матрицы A .

Коэффициент f_1 в правой части соотношения (78) зависит от волновых векторов взаимодействующих волн:

$$\begin{aligned} f_1 &= f_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = 2ia_1 a_2 z_1 k_{x1} + 2ia_1 a_3 z_1 k_{y1} + \\ &+ 2a_1 a_2 z_2 k_{y1} \omega(\mathbf{k}_1) - 2l_0 a_2^2 z_2 k_{x1} k_{y1} - 2l_0 a_2^2 z_2 k_{y1}^2 + \\ &+ 4 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 z_2 k_{x1} k_{y1} - if_0 a_1 a_3 z_2 k_{y1} - \beta a_1 a_3 z_2 - \\ &- 2ia_1 a_3 z_3 \omega(\mathbf{k}_1) + 2il_0 a_2 a_3 z_3 k_{x1} + 2il_0 a_3^2 k_{y1} + \\ &+ 2 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 z_3 k_{y1} + f_0 a_1 a_2 z_3. \quad (83) \end{aligned}$$

Аналогично можем получить уравнения для амплитуд ψ и χ , выписав слагаемые, пропорциональные соответственно $\exp(i\theta_2)$ и $\exp(i\theta_3)$:

$$s_2 \psi = f_2 \phi^* \chi, \quad (84)$$

$$s_3 \phi = f_3 \phi \psi, \quad (85)$$

где s_2 и s_3 — дифференциальные операторы, f_2, f_3 — коэффициенты, зависящие только от волновых векторов взаимодействующих волн.

В уравнении (84) оператор s_2 выражается следующим образом:

$$s_2 = r_2 \frac{\partial}{\partial T_1} + p_2 \frac{\partial}{\partial X_1} + q_2 \frac{\partial}{\partial Y_1}, \quad (86)$$

$$r_2 = a_1 z_1 + ia_2 z_2 l_0 k_{y2} + a_3 l_0 z_3, \quad (87)$$

$$p_2 = a_2 z_1 l_0 + ia_1 z_2 a_0^2 g k_{y2}, \quad (88)$$

$$q_2 = a_3 z_1 l_0 - ia_2 z_2 l_0 \omega(\mathbf{k}_2) - a_3 z_2 f_0 l_0 + ia_1 z_2 a_0^2 g k_{x2}, \quad (89)$$

а коэффициент f_2 —

$$\begin{aligned} f_2 = f_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = & 2ia_1 a_2 z_1 k_{x2} + 2ia_1 a_3 z_1 k_{y2} + \\ & + 2a_1 a_2 z_2 k_{y2} \omega(\mathbf{k}_2) - 2l_0 a_2^2 z_2 k_{x2} k_{y2} - 2l_0 a_2^2 z_2 k_{y2}^2 + \\ & + 4 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 z_2 k_{x2} k_{y2} - if_0 a_1 a_3 z_2 k_{y2} - \beta a_1 a_3 z_2 - \\ & - 2ia_1 a_3 z_3 \omega(\mathbf{k}_2) + 2il_0 a_2 a_3 z_3 k_{x2} + 2il_0 a_3^2 k_{y2} + \\ & + 2 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 z_3 k_{y2} + f_0 a_1 a_2 z_3. \end{aligned} \quad (90)$$

Аналогично для уравнения (85):

$$s_3 = r_3 \frac{\partial}{\partial T_1} + p_3 \frac{\partial}{\partial X_1} + q_3 \frac{\partial}{\partial Y_1}, \quad (91)$$

$$r_3 = a_1 z_1 + ia_2 z_2 l_0 k_{y3} + a_3 l_0 z_3, \quad (92)$$

$$p_3 = a_2 z_1 l_0 + ia_1 z_2 a_0^2 g k_{y3}, \quad (93)$$

$$q_3 = a_3 z_1 l_0 - ia_2 z_2 l_0 \omega(\mathbf{k}_3) - a_3 z_2 f_0 l_0 + ia_1 z_2 a_0^2 g k_{x3}, \quad (94)$$

$$\begin{aligned} f_3 = f_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = & 2ia_1 a_2 z_1 k_{x3} + 2ia_1 a_3 z_1 k_{y3} + \\ & + 2a_1 a_2 z_2 k_{y3} \omega(\mathbf{k}_3) - 2l_0 a_2^2 z_2 k_{x3} k_{y3} - 2l_0 a_2^2 z_2 k_{y3}^2 + \\ & + 4 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 z_2 k_{x3} k_{y3} - if_0 a_1 a_3 z_2 k_{y3} - \beta a_1 a_3 z_2 - \\ & - 2ia_1 a_3 z_3 \omega(\mathbf{k}_3) + 2il_0 a_2 a_3 z_3 k_{x3} + 2il_0 a_3^2 k_{y3} + \\ & + 2 \frac{a_0^2 g}{L} a_1^2 z_3 k_{y3} + f_0 a_1 a_2 z_3, \end{aligned} \quad (95)$$

Таким образом, получена система уравнений для амплитуд взаимодействующих волн на β -плоскости:

$$s_1 \phi = f_1 \psi^* \chi, \quad (96)$$

$$s_2 \psi = f_2 \phi^* \chi, \quad (97)$$

$$s_3 \chi = f_3 \phi \psi. \quad (98)$$

Система из трех уравнений (96)–(98) для трех неизвестных амплитуд взаимодействующих волн описывает трехволновые взаимодействия волн, удовлетворяющие условию трехволнового синхронизма (60). В уравнениях (96)–(98) операторы s_1, s_2, s_3 определяются соответственно выражениями (79)–(82), (86)–(89), (91)–(94), а коэффициенты f_1, f_2, f_3 — выражениями (83), (90), (95).

Рассмотрим случай, когда амплитуда одной из взаимодействующих волн в начальный момент много больше амплитуд двух других, например, $\phi \gg \psi \chi$. В этом случае можно принять амплитуду первой волны постоянной: $\phi = \phi_0$. При этом можно пренебречь влиянием волн малых амплитуд ψ и χ на волну постоянной амплитуды ϕ_0 . Тогда система (96)–(98) примет вид

$$s_2 \psi = f_2 \phi_0^* \chi, \quad (99)$$

$$s_3 = f_3 \phi_0 \psi. \quad (100)$$

Решение линейной системы (99)–(100) ищем в виде

$$\begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi' \\ \chi' \end{pmatrix} \exp(\Gamma_i T_1). \quad (101)$$

Отсюда найдем инкремент неустойчивости

$$\Gamma_i = \sqrt{\frac{|f_2 f_3|}{|r_2 r_3|}} |\phi_0| > 0, \quad (102)$$

где f_2 и f_3 — константы, определенные в (90) и (95).

Таким образом, для волн, полученных в разд. 3, возможны следующие варианты распадных неустойчивостей.

1. Волна Пуанкаре с волновым вектором \mathbf{k}_1 , частотой, удовлетворяющей дисперсионному уравнению (57) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$, амплитудой ϕ распадается на две волны Россби с волновыми векторами $\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$, частотами, удовлетворяющими дисперсионному уравнению (58) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$ и амплитудами ψ и χ .

2. Волна Россби с волновым вектором \mathbf{k}_1 , частотой, удовлетворяющей дисперсионному уравнению (58) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$, амплитудой ϕ распадается на волну Пуанкаре с волновым вектором \mathbf{k}_2 , частотой, удовлетворяющей дисперсионному уравнению (57) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2$, амплитудой ψ и волну Россби с волновым вектором \mathbf{k}_3 , частотой, удовлетворяющей дисперсионному уравнению (58) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_3$, амплитудой χ .

3. Волна Россби с волновым вектором \mathbf{k}_1 , частотой, удовлетворяющей дисперсионному уравнению (58) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$, амплитудой ϕ распадается на две

волны Россби с волновыми векторами \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}_3 , частотами, удовлетворяющими дисперсионному уравнению (58) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$ и амплитудами ψ и χ .

Напомним, что для всех волн выполняется условие волнового синхронизма (60).

Теперь рассмотрим случай, когда амплитуда одной из взаимодействующих волн много меньше амплитуд двух других, т. е. $\phi \ll \psi, \chi$. Тогда можно считать амплитуды ψ и χ постоянными: $\psi = \psi_0$, $\chi = \chi_0$. Из системы (96)–(98) получим уравнение для амплитуды ϕ :

$$s_1 \phi = f_1 \psi^* \chi_0. \quad (103)$$

Решение уравнения ищем в виде

$$\phi = \phi' \exp(\Gamma_a T_1). \quad (104)$$

Подставив (104) в уравнение (103), получим выражение для коэффициента усиления

$$\Gamma_a = \frac{|f_1|}{|r_1|} |\phi_0^* \chi_0|. \quad (105)$$

Константы f_1 и r_1 определены соответственно в (83) и (80).

Возможны три случая параметрического усиления.

1. Две начальные волны Россби с амплитудами ψ и χ усиливают волну Пуанкаре с амплитудой ϕ .

2. Волна Пуанкаре с амплитудой ψ и волна Россби с амплитудой χ усиливают волну Россби с амплитудой ϕ .

3. Две волны Россби с амплитудами ψ и χ усиливают волну Россби с амплитудой ϕ .

Для исходных волн волновые векторы \mathbf{k}_2 и \mathbf{k}_3 , для новой волны волновой вектор \mathbf{k}_1 — волновой вектор новой волны. Частоты волн получаются подстановкой их волновых векторов в соответствующие дисперсионные уравнения — (57) для волны Пуанкаре и (58) для волны Россби. Частоты и волновые векторы волн удовлетворяют условию трехволнового синхронизма (60).

В случае несжимаемой жидкости также существуют взаимодействия аналогичных типов волн [22].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получена система дифференциальных уравнений движения вращающейся сжимаемой жидкости в поле силы тяжести со свободной границей в приближении мелкой воды. Полученная система уравнений нетривиально зависит от характерного вертикального масштаба течения и масштаба

высот, на котором изменение плотности становится существенным. В отличие от классических уравнений мелкой воды для несжимаемых течений, высота свободной поверхности не может считаться аналогом массы столба жидкости, и закон сохранения массы записывается для новой переменной, являющейся произведением высоты свободной поверхности на среднюю плотность жидкости. С учетом широкого спектра применимости полученных уравнений в геофизической гидродинамике, в астрофизике и физике планет в работе приведен их подробный вывод, проведен анализ пределов их применимости. Показано, что при малости высоты слоя по сравнению с масштабом сжимаемости полученная система переходит в систему классических уравнений мелкой воды. Вследствие различия выражений для квадрата скорости распространения слабых возмущений нелинейная динамика таких течений отличается от динамики классических уравнений для несжимаемой жидкости в приближении мелкой воды, несмотря на формальную аналогию гиперболической структуры обеих моделей.

В работе получена система уравнений для сжимаемой жидкости в приближении мелкой воды на β -плоскости, в которой учитывается линейная зависимость параметра Кориолиса от широты. Для системы уравнений на f -плоскости получены линейные решения в виде волн Пуанкаре в сжимаемой жидкости. Для системы уравнений на β -плоскости получены два вида волн — волны Пуанкаре в сжимаемой жидкости в коротковолновом пределе и волны Россби в сжимаемой жидкости в длинноволновом пределе. Качественный анализ дисперсионных соотношений показал, что на f -плоскости невозможны трехволновые взаимодействия волн Пуанкаре в сжимаемой жидкости, а на β -плоскости возможны трехволновые взаимодействия для трех волн Россби в сжимаемой жидкости, а также двух волн Россби и одной волны Пуанкаре в сжимаемой жидкости. На β -плоскости асимптотическим методом многомасштабных разложений получены нелинейные уравнения для амплитуд взаимодействующих волн. Для каждого случая трехволновых взаимодействий исследованы параметрические неустойчивости и найдены коэффициенты взаимодействия трех волн в сжимаемой жидкости на β -плоскости.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.-L. E. Timmermans, J. R. Lister, and H. E. Huppert, *J. Fluid Mech.* **445**, 305 (2001).

2. C. K. Batchelor and G. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge Univ. Press (2000).
3. A. M. Fridman and N. N. Gorkavyi, *Physics of Planetary Rings: Celestial Mechanics of Continuous Media*, Springer Science and Business Media (2013).
4. J. D. Parsons, *Geophys. Res. Lett.* **27**, 2345 (2000).
5. F. Dobran, A. Neri, and G. Macedonio, *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **98**, 4231 (1993).
6. G. A. Valentine and K. H. Wohletz, *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **94**, 1867 (1989).
7. C. Ancey, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **142**, 4 (2007).
8. C. Ancey, A. Davison, T. Böhm, M. Jodeau, and P. Frey, *J. Fluid Mech.* **595**, 83 (2008).
9. К. В. Карельский, А. С. Петросян, А. В. Черняк, *ЖЭТФ* **141**, 1206 (2012) [*JETP* **114**, 1058 (2012)].
10. К. В. Карельский, А. С. Петросян, А. В. Черняк, *ЖЭТФ* **143**, 779 (2013) [*JETP* **116**, 680 (2013)].
11. C. B. Vreugdenhil, *Numerical Methods for Shallow-Water Flow*, Vol. 13, Springer Science & Business Media (1994).
12. K. Karelsky, A. Petrosyan, and S. Tarasevich, *Phys. Scripta* **2013**, 014024 (2013).
13. A. Chernyak, K. Karelsky, and A. Petrosyan, *Phys. Scripta* **2013**, 014041 (2013).
14. S. Lantz and Y. Fan, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **121**, 247 (1999).
15. R. Klein, *Theor. Comput. Fluid Dynamics* **23**, 161 (2009).
16. D. R. Durran, *J. Atmosph. Sci.* **46**, 1453 (1989).
17. A. E. Gill, *Atmosphere-Ocean Dynamics*, Elsevier (2016), pp. 205–208.
18. G. K. Vallis, *Atmospheric and Oceanic Fluid Dynamics*, Cambridge Univ. Press (2017), pp. 124–126.
19. G. Falkovich, *Fluid Mechanics: a Short Course for Physicists*, Cambridge Univ. Press (2011).
20. O. Pokhotelov, J. McKenzie, P. Shukla, and L. Stenflo, *Phys. Fluids* **7**, 1785 (1995).
21. L. Ostrovsky, *Asymptotic Perturbation Theory of Waves*, Imperial College Press (2015), pp. 18–38.
22. K. Wiklund, *Nonlin. Proc. Geophys.* **5**, 137 (1998).

УДАРНАЯ ПЕРЕДАЧА ДАВЛЕНИЯ ТВЕРДОМУ ВЕЩЕСТВУ В МИШЕНИ С ПОРИСТЫМ ПОГЛОТИТЕЛЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ МОЩНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

*И. А. Белов^а, С. А. Бельков^а, С. В. Бондаренко^а, Г. А. Вергунова^б,
А. Ю. Воронин^а, С. Г. Гаранин^а, С. Ю. Головкин^а, С. Ю. Гуськов^б,
Н. Н. Демченко^б, В. Н. Деркач^а, Е. О. Дмитриев^б, Н. В. Змитренко^с,
А. В. Илюшечкина^а, А. Г. Кравченко^а, И. В. Кузьмин^а, П. А. Кучугов^{с,б},
А. Е. Мюсова^а, В. Г. Рогачев^а, А. Н. Рукавишников^а, Е. Ю. Соломатина^а,
К. В. Стародубцев^а, П. В. Стародубцев^а, И. А. Чугров^а,
О. О. Шаров^а, Р. А. Яхин^{б*}*

^а *Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

^б *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

^с *Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук
125047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 14 октября 2021 г.,
после переработки 14 октября 2021 г.
Принята к публикации 19 ноября 2021 г.

Представлены результаты экспериментов по увеличению давления лазерно-индуцированной ударной волны при ее переходе из менее плотного в более плотное вещество через вакуумный зазор. При воздействии наносекундного лазерного импульса тераваттной мощности на плоские мишени в виде слоя малоплотного поглотителя лазерного излучения из пористого вещества с плотностью 0.01–0.025 г/см³ и слоя алюминия, разделенных вакуумным промежутком, зарегистрированы скорости ударной волны в алюминии 25–29 км/с. Скачок давления на границе алюминиевого слоя в 1.2–1.5 раза превысил имеющиеся результаты экспериментов по кумуляционному переходу лазерно-индуцированной ударной волны в твердое вещество. Экспериментальные данные сопоставляются с результатами численных расчетов по гидродинамическим программам, в которых генерация и распространение ударной волны моделировались с учетом взаимодействия лазерного импульса с частично гомогенизированной плазмой пористого вещества. На основании результатов экспериментов и расчетно-теоретического анализа обсуждается эффективность использования малоплотных пористых сред в мишенях, предназначенных для исследований уравнивания состояния вещества и зажигания термоядерной реакции при инерциальном удержании.

DOI: 10.31857/S0044451022030105

1. ВВЕДЕНИЕ

Ударная волна, образованная в результате воздействия на вещество мощного импульса лазерного

или лазерно-индуцированного излучения, представляет собой одно из ярких явлений физики высоких плотностей энергии. Практическая сторона исследований в этой области в первую очередь состоит в повышении давления в современном эксперименте по исследованию уравнивания состояния (УРС) вещества, а также в практической реализации инерци-

* E-mail: yakhin.rafael@gmail.com

ального термоядерного синтеза (ИТС). Благодаря высокой плотности потока энергии импульсов лазерного, лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и лазерно-ускоренных электронов, в лабораторном эксперименте достигнуты рекордные давления квазистационарной ударной волны в твердом веществе.

Традиционным методом является непосредственное облучение мишени лазерным или лазерно-индуцированным рентгеновским импульсом. Давления, достигаемые с использованием импульсов коротковолнового излучения Nd-лазера тераваттной мощности, составляют в этом случае несколько десятков мегабар [1–3]. Ударная волна генерируется за счет так называемого абляционного давления, возникающего в результате испарения и теплового разлета вещества (абляции) на облучаемой поверхности мишени. Другой метод, применение которого позволяет в значительной степени увеличить давление ударной волны, состоит в повышении концентрации энергии в мишени в результате удара макрочастицы, ускоренной как целое за счет лазерной абляции. С использованием такого «столкновительного» метода, более сложного в экспериментальной реализации, а также тераваттных импульсов излучения Nd-лазера и лазерно-индуцированного рентгеновского излучения достигнуты рекордные давления ударной волны в несколько сотен мегабар [4–7]. Наконец, имеется расчетно-теоретическое обоснование генерации квазистационарной ударной волны с давлением в несколько гигабар при воздействии пучка релятивистских электронов, ускоренных в поле излучения лазеров петаваттной мощности [8, 9].

Универсальным методом увеличения давления ударной волны является ее переход в вещество с большей плотностью [10]. Этот метод можно рассматривать как разновидность «столкновительного» метода, в котором роль ускоренной макрочастицы играет ударная волна. В самой простой схеме эксперимента с лазерным воздействием этот метод основывается на использовании мишени в виде слоев веществ разной плотности, в которой генерация первичной ударной волны происходит за счет абляции вещества с меньшей плотностью. В качестве малоплотного аблятора такой мишени можно представить себе газ с плотностью, превышающей критическую плотность образующейся плазмы, соответствующую длине волны воздействующего лазерного излучения. Однако это сопряжено со значительным усложнением технической реализации эксперимента. В этом случае мишень должна помещаться либо

в газонаполненную камеру с вводными диагностическими окнами и окном для ввода лазерного пучка, либо конструкция самой мишени должна предусматривать стенки, окружающие такой «газовый» аблятор, и тоже окно для ввода лазерного пучка.

Более подходящим материалом малоплотного аблятора является пористое вещество легких химических элементов. Физика взаимодействия мощного лазерного излучения с пористым веществом активно исследуется в настоящее время в связи с интересом к фундаментальным явлениям лазер-плазменного взаимодействия, имеющим важное значение для ряда прикладных задач и в первую очередь к уже упоминавшемуся ИТС [11, 12]. Пористое вещество обладает набором важных достоинств, относящихся к поглощению лазерного излучения и образованию абляционного давления. Одно из них состоит в высокой эффективности поглощения излучения тераваттного лазерного импульса. Установленная во многих экспериментах доля энергии излучения первой–третьей гармоник Nd-лазера, поглощаемая на глубине геометрической прозрачности пористых веществ легких элементов различного типа как с докритической, так и со сверхкритической плотностью, составляет 80–90% [13–18]. Кроме того, поглощение лазерного излучения в веществе со сверхкритической плотностью ($\rho > \rho_{cr}$) является предпосылкой образования абляционного давления более высокого, чем при воздействии лазерного импульса на твердое вещество, когда излучение имеет возможность поглощаться только в образующейся плазме докритической плотности [19, 20]. Тем самым слой пористого вещества играет одновременно роль поглотителя лазерного излучения с минимальными потерями энергии на собственное излучение и аблятора, обеспечивающего генерацию ударной волны.

Перенос энергии в частично гомогенизированной плазме пористого вещества осуществляется гидротепловой волной [13], которая представляет собой ударную волну с квазиоднородным распределением температуры за фронтом и без ионизационного предвестника перед фронтом, отсутствие которого обусловлено подавленной электронной теплопроводностью в связи с отсутствием свободных электронов в невозмущенном пористом веществе. Скорость гидротепловой волны D_h меньше, чем скорость ударной волны D_s в эквивалентном по средней плотности и химическому составу однородном веществе. Это связано с задержкой формирования давления за фронтом гидротепловой волны, которая определяется временем гомогенизации пористого вещества. Для тераваттного лазерного импульса

и пористого вещества с плотностью $(3-10)\rho_{cr}$ отношение D_h/D_s составляет 0.7–0.5 [13, 14, 17, 20–25].

Увеличение давления ударной волны при переходе из малоплотного пористого аблятора в твердое вещество исследовалось в работах [26–28]. В них мишени в виде слоя алюминия, покрытого слоем пористого вещества $C_{15}H_{20}O_6$ в широком диапазоне плотностей последнего, облучались лазерными импульсами субнаносекундной длительности (400–600 пс) излучения второй гармоники Nd-лазера и третьей гармоники I-лазера с интенсивностью порядка 10^{14} Вт/см². Было получено 2.5-кратное увеличение давления в алюминиевом слое по сравнению с давлением в пористом веществе.

В настоящей работе подход, основанный на использовании мишени с пористым аблятором, развивается в направлении усиления «столкновительного» эффекта за счет разделения слоев пористого аблятора и твердой части мишени вакуумным промежутком. Во втором разделе работы представлены результаты экспериментов по облучению мишеней такого типа тераваттным импульсом излучения второй гармоники Nd-лазера. В качестве слоя твердого вещества, в котором измерялась скорость ударной волны, использовался слой алюминия, а в качестве слоя пористого поглотителя — пористое вещество на основе триацетата целлюлозы. Лазерный импульс имел длительность 3.5–4 нс (на полувысоте интенсивности), которая в 5–6 раз превышала длительность импульса в экспериментах [26–28]. В отличие от работ [26–28], это позволяло организовать квазистационарный режим передачи максимального давления пористого аблятора в твердую часть мишени. В третьем разделе обсуждаются результаты численного моделирования и особенности генерации и распространения ударной волны в пористом абляторе и твердой части мишени.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Эксперименты выполнены в Российском федеральном ядерном центре — Всероссийском научно-исследовательском институте экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ) на лазерной установке ЛУЧ [29] с использованием методики высокоскоростной развертки свечения плазмы. Импульс излучения второй гармоники лазера на неодимовом фосфатном стекле с длиной волны $\lambda = 0.53$ мкм имел временную форму в виде трапеции с длительностью на полувысоте интенсивности от 3.4 до 3.8 нс, длительностью нарастающей части

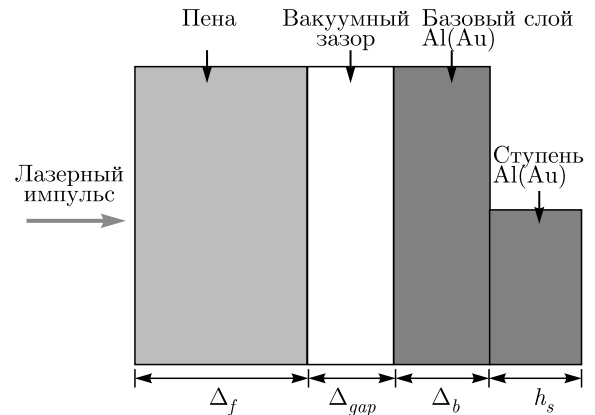


Рис. 1. Схема мишени в виде слоя пористого ТАЦ-вещества и ступенчатого слоя из алюминия, разделенных вакуумным промежутком

от 1.5 до 2.2 нс и длительностью спадающей части около 1 нс. Лазерное излучение падало по нормали к поверхности мишени, которая состояла из слоя алюминия и слоя пористого вещества, разделенных вакуумным промежутком (рис. 1). Слой алюминия имел ступенчатую форму в виде базового слоя толщиной 20 мкм и ступени той же толщины на его тыльной поверхности.

В качестве пористого вещества использовалась пена из триацетата целлюлозы (ТАЦ) с брутто-формулой $(C_{12}H_{16}O_8)_n$, микроструктура которой представляет собой мелкопористую сетку из спитых волокон (рис. 2a). ТАЦ-пену получали методом стимулированного гелеобразования в системе «триацетат целлюлозы–хлороформ/метанол» с объемным соотношением 1/1 с последующей сверхкритической сушкой для получения аэрогеля. При приготовлении пенной заготовки гелеобразующий раствор полимера расчетной концентрации заливается в формы, состоящие из плоской шайбы-держателя и плоских ограничивающих поверхностей из стекла. После охлаждения раствора в форме образовывался гель, который после замены растворителя высушивался на установке для сверхкритической сушки. В качестве экстрагента использовался диоксид углерода. При сушке пена претерпевала усадку от 15 до 50 % от объема геля, тем самым формируя зазор. Измерение геометрических параметров заготовок пены после сушки и удаления оснастки осуществлялось с помощью оптического 3D-профилометра Alicona Infinite Focus G5. На рис. 2б и 2в приведены фотографии готовой мишени с фронтальной (пена) и тыльной (профилированный алюминий) сторон.

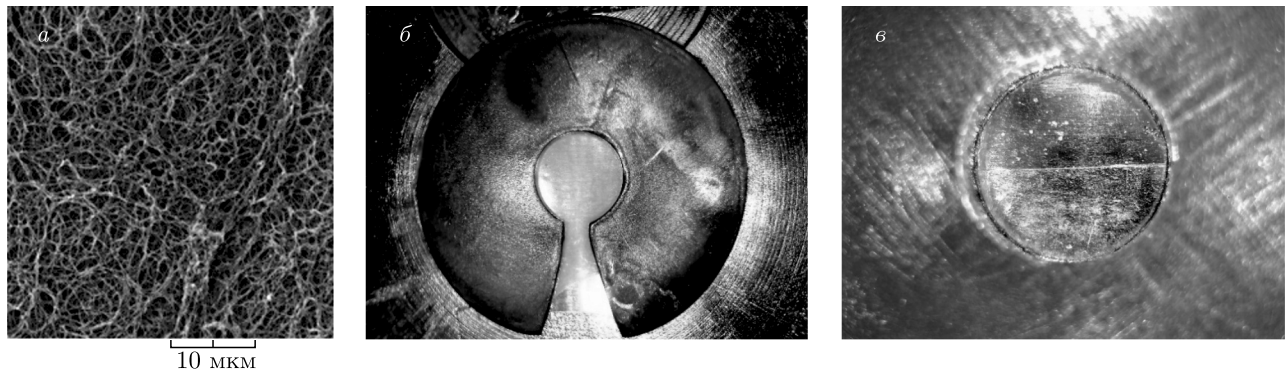


Рис. 2. Фотографии мишени: микроструктура пористого вещества на основе триацетата целлюлозы (а), фронтальная (б) и тыльная (в) стороны мишени

Использовались слои пористого вещества с различной плотностью от 24 до 9 мг/см³. Толщины слоев были примерно одинаковы (около 250 мкм) и значительно превышали длину геометрической прозрачности веществ с плотностями в указанном выше диапазоне. Толщина вакуумного зазора составляла примерно одну треть от толщины пористого слоя и выбиралась из расчета, чтобы, с одной стороны, обеспечить усиление «столкновительного» эффекта, а с другой стороны, не слишком сильно увеличить скорость разгрузки слоя алюминия и, следовательно, не слишком сильно уменьшить время квазистационарной стадии распространения ударной волны в алюминии.

В эксперименте регистрировались моменты выхода ударной волны из базового слоя и ступени алюминия. Средняя скорость ударной волны в ступени определялась как отношение толщины ступени к разности этих времен Δt . Регистрация свечения тыльной поверхности мишени проводилась с помощью щелевого фотохронографа [30], включающего время-анализирующий электронно-оптический преобразователь (ЭОП) с предельным временным разрешением 1 пс, размером рабочего поля фотокатода $h = 8$ мм; усилитель яркости с микроканальной пластиной; цифровую ПЗС-камеру с матрицей 1000 × 1000 элементов. При длительности рабочей развертки 10 нс/экран фотохронограф позволяет измерять временные интервалы между фронтами регистрируемых импульсов с погрешностью не более 15 пс. Часть излучения лазерного импульса заводилась через отдельный оптоволоконный канал на щель фотохронографа и обеспечивала временную привязку воздействующего на мишень излучения к процессу распространения ударной волны в мишени.

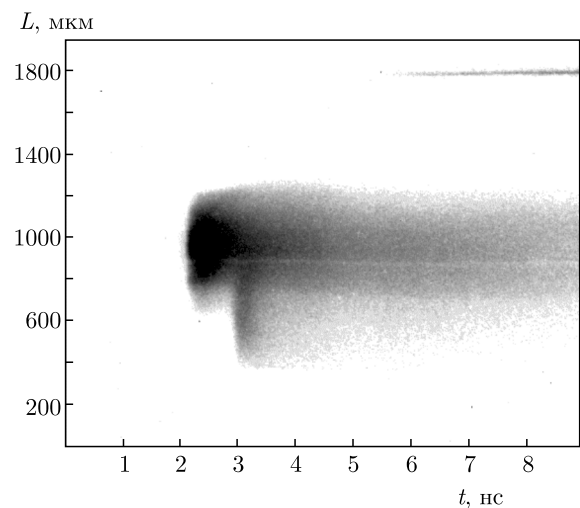


Рис. 3. Временная развертка свечения плазмы в эксперименте 3 (см. табл. 1)

Параметры лазерного импульса и мишени, а также средняя скорость ударной волны в ступени алюминиевой мишени для трех экспериментов приведены в табл. 1. Интенсивность лазерного излучения приведена для однородной части пятна облучения мишени и с учетом пропускания объектива (изменялось в течение серии экспериментов). Для средней скорости ударной волны в ступени указана погрешность измерения, складывающаяся из погрешности измерения толщины ступени, задержки свечения плазмы из базовой части и ступени алюминия, определения времени начала свечения плазмы, учитывающая, в том числе, и неодновременность возникновения свечения.

На рис. 3 в качестве примера показана временная развертка свечения плазмы ступенчатого слоя алюминия для эксперимента 3 (см. табл. 1), в кото-

Таблица 1. Условия проведения экспериментов и результаты измерения скорости ударной волны в ступени слоя алюминия: E_L — энергия лазерного импульса на мишени; $\tau_{0.5}$ — длительность импульса на полувысоте; τ_1 — время нарастания импульса; τ_2 — время спада импульса; I_{Lm} — максимальная интенсивность на мишени; ρ_f — плотность пористого ТАЦ-вещества; Δ_f — толщина слоя пористого вещества; Δ_{gap} — толщина вакуумного зазора; D — скорость ударной волны в ступени алюминия

Номер опыта	E_L , Дж	$\tau_{0.5}$, нс	τ_1 , нс	τ_2 , нс	I_{Lm} , 10^{14} Вт/см ²	ρ_f , г/см ³	Δ_f , мкм	Δ_{gap} , мкм	D , км/с
1	230	3.4	2.2	1	0.16	0.024	275	87	29.5 ± 2.2
2	190	3.8	1.5	0.9	0.11	0.011	242	72	25.0 ± 3.2
3	240	3.45	1.7	0.8	0.15	0.009	241	92	25.8 ± 2.0

ром величина задержки между временем свечения базового слоя и ступеньки составила $\Delta t = 0.78$ нс.

3. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Расчеты были выполнены для трех групп мишеней: 1) трех мишеней, использованных в экспериментах, характеристики которых приведены в табл. 1; 2) трех мишеней с теми же слоями пористого аблятора, которые присутствовали в мишенях, использованных в эксперименте, но без вакуумного зазора; 3) трех мишеней без вакуумного зазора с абляторами в виде однородного вещества того же химического состава, с теми же плотностями и толщинами слоев, что и пористый аблятор мишеней в табл. 1. Толщина слоя алюминия была выбрана равной 50 мкм, чтобы проследить полную картину распространения ударной волны в базовом слое и в ступени слоя алюминия.

Расчеты мишеней с однородными абляторами были выполнены с использованием стандартной версии программы ДИАНА [31, 32]. Для мишеней с пористыми абляторами использовалась версия программы ДИАНА-П, которая включала блок расчета взаимодействия лазерного излучения с частично гомогенизированной плазмой пористого вещества. Программа обеспечивает расчет поглощения лазерного излучения в результате объемно-тормозного процесса в области плазмы, размер которой определяется глубиной геометрической прозрачности [33, 34]. Глубина геометрической прозрачности является функцией времени гомогенизации плазмы в ион-ионных столкновениях [34, 35]. В уравнении движения и уравнении энергии используются операторы ограничения соответственно градиента давления и потока электронной теплопроводности, которые также яв-

ляются функциями времени гомогенизации, зависящего от времени и координаты [19, 35]. Параметры структуры пористого вещества задавались выбором среднего размера пор δ_0 , для всех рассматриваемых мишеней равного 0.5 мкм, и единого фрактального параметра структуры α [34, 35], равного 0.8 и соответствующего смешанной мембранно-нитевидной структуре. Тогда средняя толщина b_0 твердых элементов пористого вещества выбиралась из соотношения $b_0 = \delta_0 (\rho/\rho_s)^\alpha$ [34, 35] (ρ — средняя плотность пористого вещества, $\rho_s = 1.1$ г/см³ — плотность вещества твердых элементов). Значения толщины b_0 равны 0.025 мкм для вещества со средней плотностью $\rho = 0.024$ г/см³, 0.013 мкм для вещества с $\rho = 0.011$ г/см³ и 0.012 мкм для вещества с $\rho = 0.009$ г/см³. Плотность газа с химическим составом, эквивалентным пористому аблятору, в зазоре выбиралась равной 10^{-5} г/см³.

Результаты расчетов, относящиеся к средним значениям давления и скорости ударной волны в абляторе мишеней, а также в базовом слое и в ступени слоя алюминия приведены в табл. 2. Расчеты были проведены также по программам РФЯЦ-ВНИИЭФ, в том числе с учетом радиационного теплопереноса в пористом веществе и в алюминии. Полученные в этих расчетах величины практически идентичны данным табл. 2 и отдельно не приводятся.

Анализ данных табл. 2 дает возможность сделать следующие выводы. Во всех мишенях наблюдается кумуляционное увеличение давления ударной волны в алюминии по сравнению с давлением ударной волны в абляторе. Наиболее сильно этот эффект выражен в мишенях с зазором между слоем аблятора и алюминия. Увеличение давления в базовом слое для различных мишеней лежит в диапазоне от 3.5 до 6.3 раз. Давления за фронтами ударных волн в абляторе, которые практически составляют зна-

Таблица 2. Результаты расчетов, относящиеся к абляционному давлению в малоплотном поглотителе, давлениям и скоростям ударной волны в базовом слое и ступени алюминия: P_{abl} — среднее давление за фронтом ударной волны в абляторе; D_{abl} — скорость ударной волны в абляторе; P_{base} — давление в базовом слое алюминия; D_{base} — скорость ударной волны в базовом слое алюминия; P_{step} — давление ударной волны в ступени алюминия; D_{step} — скорость ударной волны в ступени алюминия (звездочкой отмечены расчеты, выполненные с однородным аблятором)

Номер расчета	I_{Lm} , 10^{14} Вт/см ² ,	ρ_f , г/см ³ ,	Δ_f , мкм	Δ_{gap} , мкм	P_{abl} , Мбар	D_{abl} , км/с	P_{base} , Мбар	D_{base} , км/с	P_{step} , Мбар	D_{step} , км/с
1	0.16	0.024	275	87	3.5	110	18	30	16	28
2	0.16	0.024	275	0	3.5	110	18	30	11	23
3*	0.16	0.024	275	0	3.5	120	17	29	13	25
4	0.11	0.011	242	72	2.8	120	16	28	7	17
5	0.11	0.011	242	0	2.8	120	10	22	5	16
6*	0.11	0.011	242	0	2.8	130	12	24	6	18
7	0.154	0.009	241	92	3.5	150	13	26	7	18
8	0.154	0.009	241	0	3.5	150	12	24	6	17
9*	0.154	0.009	241	0	3.5	160	12	24	6	17

чения абляционных давлений, различаются незначительно в соответствии с незначительными различиями в интенсивностях воздействующих лазерных импульсов. Значения абляционного давления лежат в диапазоне 2.8–3.5 Мбар. Для оценки абляционного давления и его зависимости от лазерной интенсивности для всех мишеней может быть использован известный скэйлинг [3, 36] для случая воздействия лазерного импульса на вещество со сверхкритической плотностью ($\rho > \rho_{cr}$). Это связано с тем, что плотности абляторов 11 и 9 мг/см³ (расчеты 5–8) меньше критической плотности всего лишь соответственно в 1.2 и 1.4 раз, и после генерации ударной волны лазерное излучение будет воздействовать на вещество со сверхкритической плотностью. Скэйлинг для абляционного давления имеет вид

$$P_{abl}[\text{Мбар}] \approx \rho_{cr} \left(\frac{2(\gamma - 1)}{3\gamma - 1} \frac{I_L}{\rho_{cr}} \right)^{2/3} \approx 12 \left[\frac{2(\gamma - 1)}{3\gamma - 1} \right]^{2/3} \left(\frac{A}{Z} \right)^{1/3} \frac{I_{L(14)}^{2/3}}{\lambda_\mu^{2/3}}, \quad (1)$$

где $\rho_{cr} \approx 1.8 \cdot 10^{-3} A/Z \lambda_\mu^2$ — критическая плотность в г/см³, A и Z — атомное число и степень ионизации плазмы, λ_μ — длина волны в мкм, $I_{L(14)}$ — интенсивность в единицах 10^{14} Вт/см², γ — показатель адиабаты.

В приближении полностью ионизованной плазмы испаряемой части аблятора ($A/Z \approx 2$, $\gamma = 5/3$)

при $\lambda_\mu = 0.53$ мкм для $I_L = 0.16 \cdot 10^{14}$ Вт/см² и $I_L = 0.154 \cdot 10^{14}$ Вт/см² оценка по формуле (1) дает значение $P_{abl} = 3.2$ Мбар, а для $I_L = 0.11 \cdot 10^{14}$ Вт/см² имеем $P_{abl} = 2.5$ Мбар. Эти значения находятся в очень хорошем согласии с результатами численных расчетов.

Приближенная оценка увеличения давления при переходе ударной волны из аблятора с плотностью ρ_{abl} в слой твердого вещества с плотностью ρ_s дается выражением [28, 37]:

$$G \approx \left(\frac{1 + \beta^{1/2}}{1 + \beta^{1/2} \rho_{abl} / \rho_s} \right)^2,$$

где $\beta = (1 + \gamma_{abl}) / (1 + \gamma_s)$, γ_{abl} и γ_s — показатели адиабаты в абляторе и в испытуемой мишени. Для мишеней с протяженным аблятором при $\rho_{abl} \ll \rho_s$ эта оценка дает масштаб увеличения давления примерно в 4 раза. В численных расчетах, выполненных с учетом реального уравнения состояния алюминия, увеличение давления в мишенях без зазора составляет от 3.5 до 6.3 раз, что соответствует достижению давления в базовом слое алюминия 12, 10 и 18 Мбар при плотностях аблятора 9 мг/см³ (расчеты 8, 9 в табл. 2), 11 мг/см³ (расчеты 5, 6) и 24 мг/см³ (расчеты 2, 3). Наличие зазора приводит к увеличению давления ударной волны в слое алюминия примерно на 30%: давление в ступени алюминия достигает значения 16 Мбар, в случае аблятора с плотностью 24 мг/см³ (расчет 1) и 7 Мбар в случаях аблято-

ров с плотностями 11 мг/см³ (расчет 4) и 9 мг/см³ (расчет 7).

Важное значение для прикладных задач имеет вопрос о затухании ударной волны в алюминии. В данной редакции экспериментов при примерно одинаковой толщине абляторов это затухание определяется скоростью разгрузки аблятора — с ростом этой скорости растет степень затухания ударной волны в алюминии. С учетом выражения (1) изотермическая скорость звука $V_s \approx (P_{abl}/\rho_{abl})^{1/2}$ составляет

$$V_s \left[\frac{\text{см}}{\text{с}} \right] = \left(\frac{\rho_{cr}}{\rho_{ab}} \right)^{1/2} \left(\frac{2(\gamma-1)}{3\gamma-1} \frac{I_L}{\rho_{cr}} \right)^{1/3} \approx \\ \approx 3.5 \cdot 10^6 \left[\frac{2(\gamma-1)}{3\gamma-1} \right]^{1/3} \left(\frac{A}{Z} \right)^{1/6} \frac{I_L^{1/3}}{\lambda_\mu^{1/3} \rho_{abl}^{1/2}}. \quad (2)$$

Согласно формуле (2), в условиях расчетов 1, 2 и 3 (см. табл. 2) с абляторами, имеющими плотность 24 мг/см³, при интенсивности $I_L = 0.16 \cdot 10^{14}$ Вт/см² скорость звука V_s составляет около 120 км/с. В условиях расчетов 4, 5 и 6 с абляторами, имеющими плотность 11 мг/см³, в 2.2 раза меньшую, чем в расчетах 1, 2 и 3, при незначительном уменьшении интенсивности лазерного импульса до значения $I_L = 0.11 \cdot 10^{14}$ Вт/см² скорость V_s составляет около 160 км/с. Наконец, в условиях расчетов 7, 8 и 9 с абляторами, имеющими плотность 9 мг/см³, в 2.7 раза меньшую, чем в расчетах 1, 2 и 3, при практически той же интенсивности лазерного импульса $I_L = 0.15 \cdot 10^{14}$ Вт/см² скорость V_s имеет максимальное значение 200 км/с.

В расчетах 1, 2, 3 при минимальной скорости V_s скорость затухания ударной волны в алюминии минимальна: средние скорости в базовом слое и в ступени алюминия составляют соответственно 29–30 и 23–28 км/с. Уменьшение скорости в ступени составляет 5 км/с — 15% от скорости в базовом слое. Незначительный эффект затухания в этом случае подтверждается следующей оценкой. Время разгрузки аблятора в этих расчетах можно оценить как $\Delta_f/V_s \approx 2.3$ нс, за это время ударная волна со средней скоростью 30 км/с пройдет расстояние около 70 мкм, т. е. сильное затухание в этом случае можно ожидать на толщинах слоя алюминия, значительно больших, чем 40 мкм. В расчетах 4, 5 и 6 с ростом скорости V_s растет и степень затухания ударной волны: скорости в базовом слое и в ступени алюминия составляют соответственно 22–28 и 16–18 км/с. Уменьшение скорости в ступени составляет 16–11 км/с — около 30% от скорости в базовом слое. Время разгрузки аблятора в этих расчетах

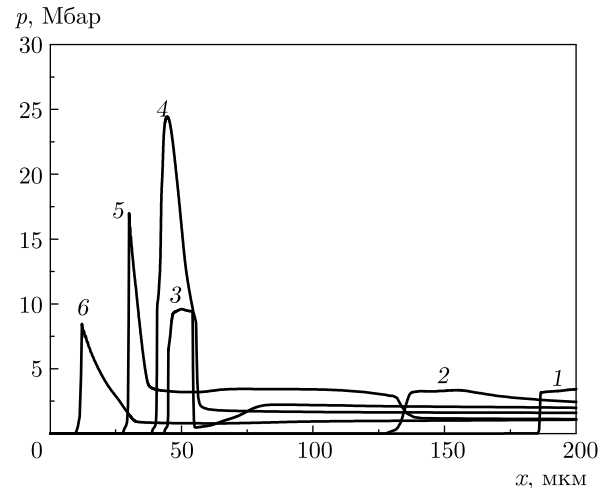


Рис. 4. Профили давления, соответствующие расчету 1 (табл. 2), для мишени, содержащей слой Al толщиной 50 мкм и слой пористого аблятора толщиной 275 мкм со средней плотностью 24 мг/см³, разделенные вакуумным зазором 87 мкм при интенсивности лазерного импульса $0.16 \cdot 10^{14}$ Вт/см² в разные моменты времени $t = 3$ нс (кривая 1), 3.5 нс (2), 4.2 нс (3), 4.4 нс (4), 4.75 нс (5), 5.45 нс (6)

около 1.5 нс, за это время ударная волна со средней скоростью 21 км/с пройдет расстояние около 30 мкм. Наконец, в расчетах 7, 8 и 9 при максимальной скорости V_s имеет место максимальное относительное уменьшение скорости ударной волны: средние скорости в базовом слое и в ступени алюминия составляют соответственно 25 и 17 км/с, т. е. уменьшение скорости в ступени составляет около 30% от скорости в базовом слое. Время разгрузки аблятора в этих расчетах составляет около 1.2 нс. За это время ударная волна со средней скоростью 18 км/с пройдет расстояние около 20 мкм. Таким образом, в расчетах с плотностью аблятора около 10 мг/см³ характерные глубины затухания 20–30 мкм оказываются меньше толщины слоя алюминия 40 мкм, что свидетельствует о достаточно сильном затухании ударной волны.

Детали временной динамики распространения ударной волны иллюстрируют рис. 4, 5 и 6, на которых представлены расчетные профили давления в различные моменты времени соответственно для расчетов 1, 2 и 3 мишени с пористым аблятором с плотностью 24 мг/см³ и зазором (расчет 1), мишени с пористым аблятором с плотностью 24 мг/см³ без зазора (расчет 2) и мишени с эквивалентным однородным аблятором с плотностью 24 мг/см³ без зазора (расчет 3) при интенсивности лазерного импульса

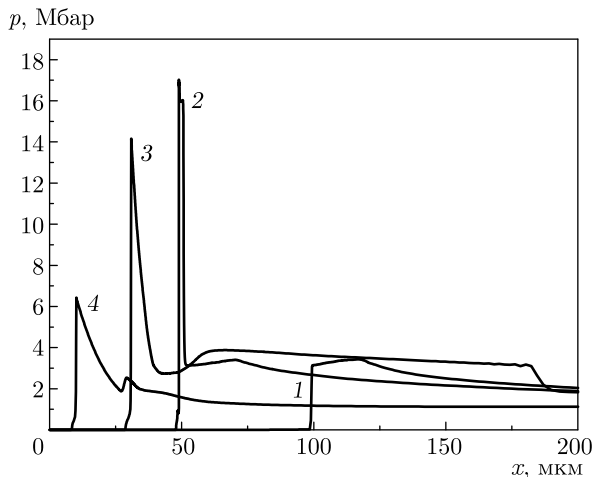


Рис. 5. Профили давления, соответствующие расчету 2 (табл. 2), для мишени, содержащей слой Al толщиной 50 мкм и слой пористого аблятора толщиной 275 мкм со средней плотностью 24 мг/см³ без зазора при интенсивности лазерного импульса 0.16 · 10¹⁴ Вт/см² в разные моменты времени $t = 3$ нс (кривая 1), 3.5 нс (2), 4.1 нс (3), 5.0 нс (4)

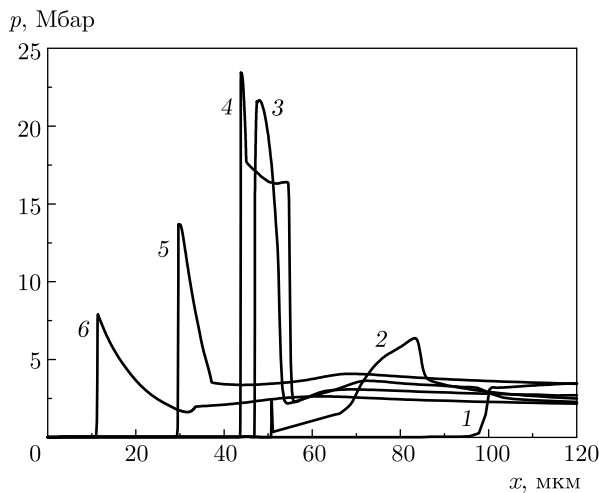


Рис. 6. Профили давления, соответствующие расчету 3 (табл. 2), для мишени, содержащей слой Al толщиной 275 мкм и слой однородного аблятора толщиной 275 мкм со средней плотностью 24 мг/см³ без зазора при интенсивности лазерного импульса 0.16 · 10¹⁴ Вт/см² в разные моменты времени $t = 2.5$ нс (кривая 1), 2.8 нс (2), 3.0 нс (3), 3.1 нс (4), 3.6 нс (5), 4.4 нс (6)

0.16 · 10¹⁴ Вт/см². В расчете мишени с однородным аблятором без зазора ударная волна проходит слой толщиной 275 мкм и выходит на границу с алюминием за время $t_{abl} \approx 2.8$ нс (рис. 6), т. е. ее средняя скорость в однородном абляторе $D_{abl} \approx 1.0 \cdot 10^7$ см/с.

При достижении максимальной интенсивности лазерного импульса в момент времени 2.2 нс значение скорости составляет $1.2 \cdot 10^7$ см/с. Для значения абляционного давления 3.5 Мбар оценка скорости ударной волны

$$D \approx [(\gamma + 1)P_{abl}/2\rho_{abl}]^{1/2}$$

дает близкое значение $D_{abl} \approx 1.4 \cdot 10^7$ см/с.

В пористом абляторе ударная волна распространяется заметно медленнее, чем в однородном абляторе за счет процесса гомогенизации плазмы (рис. 4 и 5). В мишени без зазора ударная волна проходит слой аблятора той же толщины и выходит на границу с алюминием за время $t_{abl} \approx 3.5$ нс, т. е. ее средняя скорость составляет около $7 \cdot 10^6$ см/с (рис. 5). Для оценки времени гомогенизации может быть использовано выражение [34]

$$\tau_h [c] \approx \frac{\delta_0}{V_i} \left[1 + \frac{\delta_0}{\lambda_{ii}} \right] \approx 3.3 \cdot 10^{-12} \frac{A^{1/2} \delta_0}{(Z+1)^{1/2} T^{1/2}} \times \left[1 + 7.3 \frac{Z^4 (Z+1)^{1/2} \delta_0 \rho}{AT^2} \right], \quad (3)$$

в котором δ_0 — средний размер поры, измеряемый в мкм, V_i — тепловая скорость ионов, λ_{ii} — длина ион-ионных столкновений, T — температура плазмы, измеряемая в кэВ, ρ — средняя плотность пористого вещества, измеряемая в г/см³.

В выражении (3) первое слагаемое описывает время первичного затекания поры, второе — выравнивание плотности за счет ион-ионных столкновений. Для $\delta_0 = 0.5$ мкм, $\rho = 0.024$ г/см³, $T = 1$ кэВ, $Z = 1$ оценка времени гомогенизации дает около 1.5 нс. Соотношение подобия для скорости распространения ударной волны в частично-гомогенизованной плазме пористого вещества дается соотношением [25]

$$D_h \left[\frac{cm}{c} \right] \approx 9.7 \cdot 10^4 \frac{A^{2/3} I_L^{1/3}}{Z^{2/3} \lambda_\mu^{4/3} \rho^\alpha \rho_s^{1-\alpha}}. \quad (4)$$

Для полностью ионизованной плазмы при $I_L = 0.16 \cdot 10^{14}$ Вт/см², $\lambda = 0.53$ мкм, $\rho = 24$ мг/см³, $\rho_s = 1.1$ г/см³, $\alpha = 0.8$ оценка по формуле (4) дает для скорости D_h значение около $5 \cdot 10^6$ см/с, что примерно в той же степени, что и численный расчет, свидетельствует о значительно более медленном распространении ударной волны в пористом абляторе по сравнению с однородным. В случае мишени с зазором (рис. 4) формирование на поверхности слоя алюминия давления, равного давлению ударной волны в абляторе, в результате протекания через зазор вещества аблятора, ускорен-

ного за фронтом ударной волны, и его торможения на слое алюминия происходит за время $t_g \approx 0.5$ нс. Поэтому в мишени с зазором мощная ударная волна в алюминии формируется в момент времени $t_{abl} + t_g \approx 3.45$ нс. Простая оценка времени протекания через зазор толщиной 87 мкм вещества аблятора, движущегося за фронтом ударной волны, скорость которой составляет $1.3 \cdot 10^7$ см/с, дает значение, близкое к $t_g \approx 0.6$ нс.

В мишенях без зазора (рис. 5 и 6) давления, с которыми ударные волны входят из пористого и однородного абляторов в алюминий, близки друг к другу и составляют около 18 Мбар. Давление в этих мишенях незначительно уменьшается на первых 10 мкм прохождения ударной волны в алюминии. Затухание увеличивается на следующих 10 мкм, но незначительно (до 14 Мбар). На последних 20 мкм давление падает практически в 2 раза (до 7 Мбар), выходя затем на квазистационарный режим распространения с давлением, близким к давлению в абляторе. В мишени с пористым аблятором и вакуумным зазором (рис. 4) давление, с которым ударная волна входит в алюминий, составляет около 26 Мбар и практически не уменьшается на первых 10 мкм своего распространения в алюминии, после чего незначительно уменьшается до 15–17 Мбар на последующих 20 мкм своего распространения в алюминии. Даже после прохождения 40 мкм сохраняется давление около 10 Мбар. Темп затухания ударных волн достаточно точно описывается с помощью оценок, представленных выше при анализе данных из табл. 2.

На рис. 7 для каждой из трех мишеней приведены расчетные временные зависимости гидродинамической эффективности η передачи лазерной энергии в энергию ударной волны — отношения кинетической энергии алюминия с плотностью выше начального значения к лазерной энергии, поглощенной в мишени к текущему моменту времени. Максимальные значения гидродинамической эффективности достигают 1.28 % к моменту времени 3.3 нс в мишени с пористым аблятором без зазора, 1.42 % к моменту времени 3.8 нс в мишени с пористым аблятором с зазором и 1.82 % к моменту времени 4.5 нс в мишени с однородным аблятором без зазора. Более высокое значение гидродинамической эффективности мишени с однородным аблятором обусловлено меньшим значением поглощенной энергии из-за того, что ударная волна в таком абляторе распространяется без задержки на гомогенизацию.

Важным является факт более высокой гидродинамической эффективности в мишени с пористым аблятором с зазором по сравнению с мишенью с тем

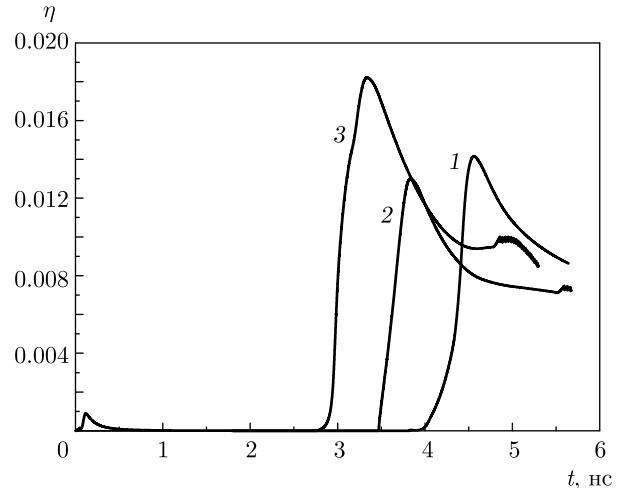


Рис. 7. Зависимости от времени отношения кинетической энергии алюминия с плотностью выше начального значения к лазерной энергии, поглощенной в мишенях с пористым аблятором плотностью 24 мг/см^3 с зазором (кривая 1) и без зазора (кривая 2), а также в мишени с однородным аблятором с той же плотностью, но без зазора (кривая 3)

же аблятором без зазора. С учетом того, что в мишени с зазором к моменту начала передачи энергии алюминию поглощается больше лазерной энергии, этот результат свидетельствует о большей энергии, передаваемой алюминию при ударном воздействии через зазор.

На поздних стадиях распространения ударной волны в алюминии гидродинамическая эффективность для обеих мишеней выходит на «абляционные» значения — около 1%. Максимальные значения гидродинамической эффективности 1.8–2.1 % более чем в 2 раза выше по сравнению со случаем обычного абляционного режима генерации ударной волны, когда лазерный импульс воздействует непосредственно на поверхность твердой мишени, например, алюминиевой [38]. При этом следует отметить, что гидродинамическая эффективность передачи лазерной энергии в абляционном режиме в энергию ударной волны в твердой мишени более чем на порядок меньше гидродинамической эффективности при абляционном ускорении тонкого плоского слоя вещества как целого, которая при оптимальной доле испаренной массы около 80 %, как известно, может достигать 38 % [3, 36, 39].

Масштабирование результатов экспериментов работ [26, 28] показывает, что в экспериментах нашей работы в эквивалентных условиях по максимальной

интенсивности лазерного импульса и характеристикам пористого вещества получены значительно более высокие значения скорости ударной волны в алюминии. Так, в работах [26, 28] для лазерного импульса с интенсивностью $I_L \approx 0.5 \cdot 10^{14}$ Вт/см² и длительностью 600 пс при использовании пористого поглотителя с плотностью 10 и 20 мг/см³ зарегистрированы скорости ударной волны на глубине 13–18 мкм в алюминии соответственно 22–24 км/с и 22–26 км/с. Имея в виду скейлинг для абляционного давления $P_{abl} \propto I_L^{2/3}$, при интенсивности $I_L \approx 0.15 \cdot 10^{14}$ Вт/см² в экспериментах настоящей работы эти скорости составили бы соответственно 16–17 и 16–18.5 км/с. В наших экспериментах на большей глубине 20–40 мкм зарегистрированы скорости около 25 и 29 км/с, которые примерно в 1.5 раза превышают масштабированные значения результатов работ [26, 28].

Можно указать две причины такого превышения. Это, во-первых, существенно большая длительность лазерного импульса, обеспечивающая достижение максимального абляционного давления в пористом абляторе в течение всего процесса распространения ударной волны в абляторе и алюминии, и, во-вторых, использование вакуумного зазора между аблятором и алюминием, обеспечивающего повышенную эффективность передачи энергии ударной волне в алюминии, что подтверждают выполненные в нашей работе численные расчеты.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В экспериментах по облучению наносекундным лазерным импульсом с интенсивностью $(1\text{--}1.5) \cdot 10^{13}$ Вт/см² плоских мишеней в виде слоя малоплотного пористого аблятора-поглотителя лазерного излучения с плотностью 10–25 мг/см³ и слоя алюминия, разделенных вакуумным промежутком, зарегистрированы скорости ударной волны 25–29 км/с на глубине 20–40 мкм в алюминии. Анализ результатов экспериментов с помощью численных расчетов, моделирующих генерацию и распространение ударной волны в частично гомогенизированной лазерной плазме пористого вещества, показал, что основными факторами достижения столь высоких скоростей ударной волны является, во-первых, использование вакуумного зазора, который в 1.2–1.5 раза увеличивал давление в ударной волне в алюминии, и, во-вторых, оптимальная длительность лазерного импульса (около 4 нс), обеспечивающая достижение максимального абля-

ционного давления в пористом абляторе в течение всего процесса распространения ударной волны в абляторе и алюминии.

Имея в виду скейлинг для инициирующего абляционного давления $P_{abl} \propto I_L^{2/3}$, при увеличении интенсивности лазерного импульса на порядок и переходе к третьей гармонике можно прогнозировать увеличение как давления ударной волны в твердой мишени в 8 раз — до значений 200–250 Мбар, так и скорости в 2.8 раз — до значений $(8\text{--}9) \cdot 10^6$ см/с, что представляется очень серьезным результатом для эксперимента по исследованию УРС с использованием простой плоской мишени в стандартных условиях облучения лазерным импульсом.

Наконец, следует отметить, что дистанция распространения квазистационарной ударной волны в алюминии около 10 мкм соответствует дистанции около 30 мкм в пластике, что, в свою очередь, соответствует типичной толщине аблятора из твердого пластика мишеней ЛТС прямого облучения [3, 40, 41]. Это означает, что использование составного аблятора из слоев твердого пластика и пористого вещества может привести не только к увеличению эффективности поглощения лазерного излучения и выравниванию неоднородностей облучения мишени ЛТС лазерными пучками, но и к увеличению гидродинамической эффективности передачи поглощенной лазерной энергии мишени.

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Г. Гаранин, УФН **181**, 434 (2011).
2. R. S. Craxton, K. S. Anderson, T. R. Boehly et al., Phys. Plasmas **22**, 110501 (2015).
3. J. Lindl, Phys. Plasmas **2**, 3933 (1995).
4. R. Cauble, D. W. Phillion, T. J. Hoover et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 2102 (1993).
5. M. Karasik, J. L. Weaver, Y. Aglitskiy et al., Phys. Plasmas **17**, 056317 (2010).
6. T. Watari, T. Sakaiya, H. Azechi et al., J. Phys.: Conf. Ser. **112**, 022065 (2008).
7. M. Murakami, H. Nagatomo, T. Johzaki et al., Nuclear Fusion **54**, 054007 (2014).
8. С. Ю. Гуськов, Письма в ЖЭТФ **100**, 79 (2014).
9. S. Yu. Gus'kov, P. A. Kuchugov, and G. A. Vergunova, Matter Radiat. Extrem. **6**, 020301 (2021).

10. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Физматлит, Москва (2008).
11. С. Ю. Гуськов, Н. В. Змитриенко, В. Б. Розанов, ЖЭТФ **108**, 296 (1995).
12. A. S. Moore, N. B. Meezan, C. A. Thomas et al., Phys. Plasmas **27**, 082706 (2020).
13. A. E. Bugrov, I. N. Burdonskii, V. V. Gavrilov et al., Laser and Part. Beams **17**, 415 (1999).
14. Ph. Nicolaï, M. Olazabal-Loume, S. Fujioka et al., Phys. Plasmas **19**, 113105 (2012).
15. S. Depierreux, C. Labaune, D. Michel et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 195005 (2009).
16. M. Tanabe, H. Nishimura, S. Fujioka et al., Appl. Phys. Lett. **93**, 051505 (2008).
17. A. Caruso, C. Strangio, S. Yu. Gus'kov et al., Laser and Part. Beams **18**, 25 (2000).
18. T. Hall, D. Batani, W. Nazarov et al., Laser and Part. Beams **20**, 303 (2002).
19. S. Yu. Gus'kov, M. Cipriani, R. De. Angelis et al., Plasma Phys. Control. Fusion **57**, 125004 (2015).
20. R. De. Angelis, F. Consoli, S. Yu. Gus'kov et al., Phys. Plasmas **22**, 072701 (2015).
21. А. Э. Бугров, И. Н. Бурдонский, В. В. Гаврилов и др., ЖЭТФ **111**, 497 (1997).
22. M. Cipriani, S. Yu. Gus'kov, R. De. Angelis et al., Phys. Plasmas **25**, 092704 (2018).
23. J. D. Colvin, H. Matsukuma, K. C. Brown et al., Phys. Plasmas **25**, 032702 (2018).
24. J. Velechovsky, J. Limpouch, R. Liska, and V. Tikhonchuk, Plasma Phys. Control. Fusion **58**, 095004 (2016).
25. S. Yu. Gus'kov, J. Limpouch, Ph. Nicolaï, and V. T. Tikhonchuk, Phys. Plasmas **18**, 103114 (2011).
26. A. Benuzzi, M. Koenig, B. Faral et al., Phys. Plasmas **5**, 2410 (1998).
27. M. Temporal, S. Atzeni, D. Batani et al., Eur. Phys. J. D **12**, 509 (2000).
28. D. Batani, A. Balducci, W. Nazarov et al., Phys. Rev. E **63**, 046410 (2001).
29. С. Г. Гаранин, А. И. Зарецкий, Р. И. Ильяев и др., КЭ **35**, 299 (2005).
30. Д. С. Корниенко, А. Г. Кравченко, Д. Н. Литвин и др., ПТЭ № 2, 78 (2014).
31. Н. В. Змитренко, В. Я. Карпов, А. П. Фадеев и др., ВАИТ, сер. Методики и прогр. численного решения задач ат. физ. № 2, 34 (1983).
32. S. Yu. Gus'kov, P. A. Kuchugov, R. A. Yakhin et al., Plasma Phys. Control. Fusion **61**, 105014 (2019).
33. С. Ю. Гуськов, В. Б. Розанов, КЭ **24**, 715 (1997).
34. S. Yu. Gus'kov and J. Russ, Laser Res. **31**, 574 (2010).
35. M. Cipriani M., S. Yu. Gus'kov, R. De Angelis et al., Laser and Part. Beams **36**, 121 (2018).
36. Yu. V. Afanasiev and S. Yu. Gus'kov, *Nuclear Fusion by Inertial Confinement. A Comprehensive Treatise*, Ch. 4, ed. by G. Velarde, Y. Ronen, and J. M. Martinez-Val., CRC Press, Boca Raton (1992).
37. S. Yu. Gus'kov, H. Azechi, N. N. Demchenko et al., Plasma Phys. Control. Fusion **51**, 095001 (2009).
38. С. Ю. Гуськов, С. Бородзюк, М. Калал и др., КЭ **34**, 989 (2004).
39. Ю. В. Афанасьев, Е. Г. Гамалий, О. Н. Крохин и др., ПММ **39**, 451 (1975).
40. V. B. Rozanov, C. P. Verdon, M. Decroisette et al., in *Energy from Inertial Fusion*, ed. by W. J. Hogan, IAEA, Vienna (1995), p. 21.
41. С. А. Бельков, С. В. Бондаренко, Г. А. Вергунова и др., ЖЭТФ **148**, 784 (2015).

РЕШЕНИЕ САМООРГАНИЗОВАННО-КРИТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МАННЫ ДЛЯ РАЗМЕРНОСТЕЙ ПРОСТРАНСТВА 2–4

*А. В. Подлазов**

*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук
125047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 ноября 2021 г.,
после переработки 22 ноября 2021 г.
Принята к публикации 23 ноября 2021 г.

Исследуется модель Манны — консервативная изотропная самоорганизованно-критическая модель типа кучи песка. Для нее приводятся результаты компьютерного моделирования в двух-, трех- и четырехмерной постановках, а также аналитическое решение для размерности пространства между нижней и верхней критическими размерностями. Решение основано на построении модели мезоуровня, формулируемой в терминах плотности возбуждения, его корреляционной длины, средней активности лавины и ширины границы ее области. Расчет показателей выполнен двумя независимыми способами: на основе перенормировки стохастических дифференциальных уравнений и путем сведения происходящих процессов к случайным блужданиям.

DOI: 10.31857/S0044451022030117

1. ВВЕДЕНИЕ

В 2021 г. исполнилось 30 лет модели Манны [1], в класс универсальности которой попадают многие стохастические анизотропные консервативные модели теории самоорганизованной критичности [2]. Несмотря на длительную историю исследований и частую встречаемость, этот класс получил частное — для двумерного случая — аналитическое описание лишь сравнительно недавно [3, 4], а общего описания не имел вовсе. В настоящей работе удастся устранить этот пробел.

Работа построена следующим образом. Далее во Введении приводится краткое описание явления самоорганизованной критичности, моделей типа кучи песка и способов обращения со степенными распределениями вероятностей. В разд. 2 описываются правила рассматриваемой модели и рассчитывается ее верхняя критическая размерность. Разделы 3 и 4 посвящены теоретическому изучению модели на основе двух различных инструментариев, связанных соответственно с ланжевеновскими уравнениями и со случайными блужданиями. В разд. 5 проводится сопоставление полученного решения с результатами

компьютерного эксперимента. Завершается статья обсуждением, включающим введение нового суперуниверсального показателя.

1.1. Парадигма самоорганизованной критичности

Базовой моделью теории самоорганизованной критичности является куча песка [5]. Рассмотрим уголок с песком, изображенный на рис. 1. Если считать, что возможно лишь поверхностное перемещение песка, инерцией движения которого можно пренебречь, то состояние системы определяется средним наклоном поверхности z . Когда он невелик, песок в целом неподвижен. А при превышении наклоном некоторого порогового значения z_c возникает спонтанный ток песка J по поверхности, непрерывно возрастающий по мере увеличения z , как показано на вставке на рис. 1. Таким образом, имеет место непрерывный фазовый переход, в котором наклон поверхности z является управляющим параметром, а ток песка J — параметром порядка.

Критическое состояние соответствует моменту отрыва параметра порядка от нуля. Обычные критические системы попадают в это состояние благодаря тонкой подстройке управляющего параметра к заранее неизвестному критическому значению. Однако в ряде систем оказывается возможным, уста-

* E-mail: Tiger@Keldysh.ru

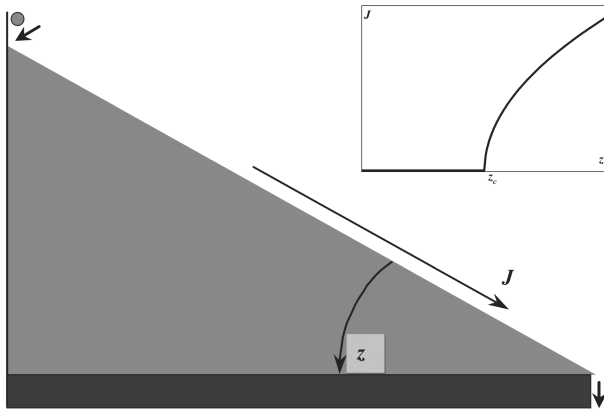


Рис. 1. Фазовый переход для кучи песка. Ее критическое состояние может достигаться как искусственно, так и в результате самоорганизации

навливая параметр порядка в $+0$, заставить управляющий параметр самостоятельно отыскать критическую точку, это и называется самоорганизованной критичностью.

Иначе говоря, вместо того, чтобы крутить ручку прибора, можно начать сдвигать с нулевой отметки стрелку на его шкале, вынуждая ручку повернуться до нужного положения [6]. Такое управление параметром порядка обыкновенно достигается при помощи разделения временных масштабов [7], при котором время релаксации системы много меньше времени между последовательными возмущениями, т. е. песок едва перемещается по куче.

Самоорганизация системы в критическое состояние происходит при токе $J = +0$. Чтобы обеспечить такую величину параметра порядка, будем добавлять песчинки по одной на вершину кучи (см. рис. 1), дожидаясь завершения процесса релаксации. При этом ток песка через кучу, очевидно, имеет минимально возможное значение — в среднем одна песчинка за время одного события.

Если наклон поверхности мал, то осыпание, вызванное добавленной песчинкой, скорее всего, не достигнет края кучи и наклон ее поверхности увеличится. При большом наклоне возможно возникновение глобального осыпания, в результате которого некоторое количество песка покинет систему и наклон уменьшится. Равновесие между количеством песка, добавляемого в систему, и количеством песка, покидающего ее, достигается при критическом наклоне поверхности, когда возмущение может распространяться по куче сколь угодно далеко, не затухая и не разрастаясь.

Таким образом, возникает отрицательная обратная связь, вынуждающая наклон со временем принять значение $z = z_c$ вне зависимости от начального профиля поверхности. При этом куча, состоящая из локально взаимодействующих песчинок, начинает вести себя как единое целое. То есть в результате самоорганизации в критическое состояние система приобретает свойства, которых не было у ее элементов.

Поведение самоорганизованно-критической системы является масштабно-инвариантным, что означает отсутствие собственных характерных размеров у описывающих его переменных. Они подчиняются степенным распределениям с плотностью вероятности вида

$$u_X(X) \propto X^{-(1+\alpha_x)}, \quad (1)$$

где α_x — характеристический показатель распределения величины X .

Здесь и далее применяются следующие обозначения. При записи переменных заглавные буквы используются для итоговых значений, относящихся к уже завершившимся событиям, а соответствующие строчные — для текущих значений, относящихся к развивающимся событиям. В индексах функций всегда стоят заглавные буквы (распределения имеют смысл лишь для итоговых значений переменных), а в индексах показателей — строчные (это не принципиально, но существенно улучшает читаемость формул).

1.2. Свойства реальных степенных распределений

Формула (1) является математической идеализацией и применима лишь в промежуточной асимптотике, протяженность которой ограничена с обеих сторон: сверху — в силу конечности размера рассматриваемой системы, а снизу — в силу конечности размеров слагающих ее элементов. И если отклонение $u_X(X)$ от степенного вида при малых X обычно не представляет особого интереса, то при больших оно имеет принципиальное значение.

Нестепенное поведение плотности учитывается с помощью метода конечноразмерного скейлинга, связанного с заменой формулы (1) более общей записью вида

$$u_X(X) = X^{-(1+\alpha_x)} g_X(X/X_1). \quad (2)$$

Скейлинговая функция g_X полагается примерно постоянной при малых значениях аргумента и убывающей быстрее любой его степени при больших. Из-

за масштабной инвариантности величина X_1 , характеризующая события, крупные настолько, что они уже не помещаются в систему конечного размера L , растет как некоторая его степень:

$$X_1 \propto L^{\nu_x}. \quad (3)$$

При этом доля событий, не помещающихся в систему, убывает с ее размером как

$$\begin{aligned} P\{X > X_1\} &= \int_{X_1}^{\infty} u_X(X) dX \cong \\ &\cong \int_{L^{\nu_x}}^{\infty} X^{-(1+\alpha_x)} g_X(XL^{-\nu_x}) dX \propto L^{-\varepsilon}, \end{aligned} \quad (4)$$

где универсальный показатель

$$\varepsilon \equiv \alpha_x \nu_x$$

не зависит от того, какая именно величина используется для его вычисления, поскольку если событие не помещается в систему, то не помещается сразу по всем своим характеристикам.

Сочетание формул (2), (3) и (4) позволяет определить скейлинговое поведение и для среднего события

$$\langle X \rangle = \int X^{-\alpha_x} g_X(X/X_1) dX \propto L^{\sigma_x}, \quad (5a)$$

где

$$\sigma_x = \nu_x - \varepsilon. \quad (5b)$$

При исследовании конкретных моделей для некоторых величин удается из общих соображений найти скейлинговые показатели ν_x и σ_x , связывающие характерные значения X_1 и $\langle X \rangle$ с обусловившим их появление конечным размером L , что будет продемонстрировано далее.

В масштабно-инвариантном состоянии взаимосвязь разных характеристик события X и Y дается степенной формулой

$$X^{\alpha_x} \propto Y^{\alpha_y}, \quad (6)$$

получаемой из сохранения вероятности для некрупных событий, еще попадающих на степенной участок распределения (2). С другой стороны, сопоставление величин крупных событий $X_1 \propto L^{\nu_x}$ и $Y_1 \propto L^{\nu_y}$ приводит к формуле

$$Y^{\nu_x} \propto X^{\nu_y}, \quad (7)$$

в сочетании с зависимостью (6) воспроизводящей тождество (4).

Основной задачей при исследовании самоорганизованно-критических моделей является их решение, т.е. определение характеристических и скейлинговых показателей для распределений всех переменных, описывающих происходящие события.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

После появления первой модели кучи песка Бака – Танга – Визенфельда (БТВ) [8, 9], заложившей основы теории самоорганизованной критичности, был создан целый ряд моделей этого типа. Описанная выше концептуальная схема с жестко заданным направлением склона кучи порождает сравнительно простые модели [10, 11], которые легко могут быть решены аналитически [10, 12]. Значительно более интересны изотропные модели, одна из которых, предложенная Субраншу Манной [1], и рассматривается в настоящей работе.

2.1. Описание правил

Модель Манны формулируется как клеточный автомат (система с дискретным пространством, временем и состояниями) на d -мерной кубической решетке линейного размера L . Целые числа z в ячейках решетки, согласно традиции, интерпретируются как количество содержащихся в них песчинок.

Ячейки, содержащие не менее z_c песчинок, считаются неустойчивыми и опрокидываются, передавая указанное число песчинок соседним (имеющим общую грань с данной) ячейкам. При этом каждая передаваемая песчинка случайным образом выбирает, в какую из соседних ячеек ей перейти. Значение порога устойчивости $z_c > 1$ не оказывает принципиального влияния на свойства модели. В оригинальной версии модели было $z_c = 2$ [1], однако в настоящей работе рассматривается более популярная версия с $z_c = 2d$ [13], в которой на каждую соседку опрокинувшейся ячейки приходится в среднем по 1 переданной песчинке. При этом правила модели Манны становятся максимально похожи на правила модель БТВ, отличаясь только стохастическим характером раздачи песчинок из опрокинувшейся ячейки.

Краевые условия полагаются открытыми, т.е. при опрокидывании ячеек, находящихся на краю решетки, часть песчинок может выпасть за него, покидая кучу. Потеря кучей песчинок при опрокидывании компенсируется их вбросом, осуществляемым

в состоянии, когда все ячейки устойчивы. Для рассматриваемых здесь решеток четного размера L песчинки добавляются по одной в ячейку, выбранную случайно среди 2^d центральных ячеек, чем обеспечивается максимальная удаленность от краев точки вброса. Если в его результате происходит нарушение устойчивости ячейки, она опрокидывается, передавая песчинки соседкам и тем самым, возможно, нарушая их устойчивость. Развивается лавина опрокидываний, по завершении которой вбрасывается новая песчинка и все повторяется.

Модель является абелевой, т.е. состояние системы после лавины оказывается одним и тем же при обработке неустойчивых ячеек в любом порядке (при условии, что с каждой ячейкой ассоциирована своя последовательность случайных чисел, определяющих передачу песчинок). Независимо от начального состояния кучи после некоторого количества лавин она переходит в состояние, описываемое степенным распределением лавин по их характеристикам.

Основными характеристиками лавины являются:

T — длительность в параллельном времени (при одновременной обработке всех неустойчивых ячеек);

N — размер — число опрокидываний, или длительность в последовательном времени (при обработке неустойчивых ячеек по одной);

S — d -мерный объем — число ячеек, где произошли опрокидывания (без учета его кратности);

C — периметр — число ячеек, получивших песчинки, но сохранивших устойчивость, дополненное числом песчинок, выпавших за край решетки.

Наряду с указанными характеристиками лавины будут рассматриваться ее линейная протяженность R , в предположении компактности области лавины задаваемая формулой $R \propto S^{1/d}$, средняя активность $A = N/T$, ширина границы области лавины $W \propto C/R^{d-1}$ и средняя кратность опрокидывания $M = N/S$.

2.2. Предварительный анализ

Два скейлинговых показателя можно определить непосредственно из правил модели. Во-первых, линейная протяженность и объем наиболее крупных лавин ограничены только размерами решетки, т.е. $R_1 \propto L$ и $S_1 \propto L^d$, или

$$\nu_r = 1 \text{ и } \nu_s = d. \quad (8)$$

Во-вторых, путь каждой песчинки через систему представляет собой случайное блуждание, в силу чего среднее число опрокидываний, в которых

песчинка успевает поучаствовать до того, как покинет решетку, квадратично по ее линейному размеру $\langle N \rangle \propto L^2$, или, согласно формулам (5a) и (5b)

$$\sigma_n = \nu_n - \varepsilon = 2. \quad (9)$$

Показатели ν_r и σ_n являются суперуниверсальными, т.е. не зависят от размерности пространства.

При рассмотрении четырех основных характеристик лавины (T , N , S и C) для полного решения модели необходимо определить восемь показателей (четыре пары показателей α и ν). Формула (4) дает три скейлинговых соотношения, формулы (8) и (9) — еще по одному. Таким образом, остается получить еще три уравнения, связывающие между собой характеристики лавины, на чем и сосредоточены дальнейшие усилия. При этом, чтобы не перегружать текст, базовые скейлинговые соотношения (4), (6), (7), (8) и (9) используются без ссылок.

Поскольку основной интерес представляют показатели распределения, все выкладки здесь проводятся с точностью до коэффициента. Поэтому, предполагая степенной вид зависимостей между всеми характеристиками лавины, деление мы не отличаем от дифференцирования, а умножение — от интегрирования. По тем же причинам коэффициенты во всех уравнениях далее полагаются единичными.

2.3. Верхняя критическая размерность

Описание правил завершает определение диапазона изучаемых размерностей пространства d . Случай $d = 1$ исключается из рассмотрения в силу его вырожденности, свидетельство чего будет получено далее. Так же не рассматриваются случаи $d > d_{uc} = 4$, поскольку при превышении верхней критической размерности d_{uc} становится неверным предположение о компактности области лавины. Убедиться в этом позволяет элементарный анализ двух процессов.

Сначала рассмотрим распространение лавины по решетке. Если песчинки, передаваемые из опрокинувшейся ячейки ее соседкам, не взаимодействуют друг с другом, то $r \propto t^{1/2}$, т.е. линейная протяженность лавины изменяется в параллельном времени диффузионным образом. Для взаимодействующих песчинок (в силу их взаимного отталкивания) зависимость будет иметь больший показатель. Таким образом,

$$\kappa_r \geq 1/2, \quad (10)$$

где использовано обозначение

$$\kappa_x = \nu_x / \nu_t \quad (11)$$

для временной размерности характеристики X .

Теперь рассмотрим развитие лавины как ветвящийся процесс, участвующие в котором частицы ответственны за потерявшие устойчивость ячейкам. Их число – активность лавины $a \propto n/t$. Вследствие самоорганизации кучи в критическое состояние ветвящийся процесс имеет единичный коэффициент размножения частиц. И если они не взаимодействуют друг с другом, то $a \propto n^{1/2}$, т.е. активность изменяется в последовательном времени диффузионным образом. Отсюда получаем $n \propto t^2$. Для взаимодействующих частиц (в силу обедненности песком соседок неустойчивых ячеек) зависимость будет иметь меньший показатель. Таким образом,

$$\kappa_s \leq \kappa_n \leq 2, \tag{12}$$

где учтено, что объем области лавины не превышает ее размера.

Коль скоро показатель $\nu_r = 1$ не зависит от размерности пространства, сочетание неравенств (10) и (12) накладывает ограничение на размерность области лавины,

$$\nu_s = \kappa_s / \kappa_r \leq 4.$$

При $d = d_{uc}$ данное неравенство обращается в равенство, из-за чего начиная с четырехмерного случая следует ожидать среднеполевых значений для всех показателей.

Все отмеченные обстоятельства хорошо известны для модели БТВ [14–16], однако, как можно видеть, ситуация имеет единую природу для любых изотропных консервативных моделей типа кучи песка.

3. РЕШЕНИЕ НА ОСНОВЕ ЛАНЖЕВЕНОВСКОГО ФОРМАЛИЗМА

Переход от микроуровня, на котором формулируются правила модели, оперирующие состоянием отдельных ячеек и судьбой отдельных песчинок, к макроуровню, на котором учитываются лишь интегральные характеристики лавин, лежит через мезоуровень, на котором строится промежуточная модель, описывающая коллективную динамику элементов системы. Правила промежуточной модели не выводятся, а угадываются. Поэтому все, сказанное в этом разделе, следует рассматривать, в первую очередь, не как расчет показателей, а как подробное описание промежуточной модели. Общефизическое обоснование ее положений и сопоставление ее результатов с экспериментом вынесены в следующие разделы. Пока же сосредоточимся на вопросе, как

следует проводить расчеты, отложив вопрос, почему это следует делать именно так.

3.1. Плотность возбуждения и корреляционная длина

Развитие лавины представляет собой распространение по системе возбуждения, инициированного вбросом в нее одной песчинки. Этот процесс будем характеризовать плотностью возбуждения $\rho(\mathbf{x}, t)$, агрегированно учитывающей не только пространственное размещение неустойчивых ячеек, но и изменение заполнения ячеек устойчивых, которое прямо влияет на их возбудимость.

Будучи скрытой переменной, плотность возбуждения, тем не менее, напрямую влияет на изменение наблюдаемых величин, поэтому анализ мы начинаем именно с нее. Ее эволюция описывается стохастическим уравнением диффузии

$$\dot{\rho}(\mathbf{x}, t) = \Delta \rho(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, \rho) \tag{13}$$

с дельта-коррелированным шумом:

$$\langle \eta(\mathbf{x}, \rho) \cdot \eta(\mathbf{x}', \rho') \rangle \propto \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \cdot \delta(\rho - \rho'). \tag{14}$$

Действие случайных факторов определяется заполнением решетки, которое меняется при изменении возбуждения, в силу чего шумовой член η зависит только от d -мерной пространственной координаты \mathbf{x} и текущей плотности ρ , но не от времени t . Таким образом, шум в уравнении (13) следует считать закрепленным, если рассматривать это уравнение как описывающее динамику поверхности, движущейся в $(d + 1)$ -мерном пространстве, на которой и производится усреднение шума в формуле (14).

Следует особо подчеркнуть, что выбор шума свободного вида $\eta(\mathbf{x}, t)$ здесь был бы грубой ошибкой. Явная зависимость от времени предполагает описание плотности только неустойчивых ячеек, непосредственно участвующих в развитии лавины. Однако для этой величины в модели Манны сконструировать ланжевеновское уравнение невозможно в принципе. Как показывает компьютерный эксперимент, показатели распределений не меняются, если при опрокидывании неустойчивой ячейки передавать ее соседкам не ровно z_c песчинок, а вообще все песчинки, оказавшиеся в этой ячейке (разумеется, при этом модель перестает быть абелевой, так что все ячейки, одновременно потерявшие устойчивость, и обрабатывать следует одновременно). Иначе говоря, свойства кучи не зависят от того, отсчитывается количество песчинок z от произвольного уровня или

от строго фиксированного. Уравнение для плотности неустойчивых ячеек должно быть инвариантно относительно одновременного увеличения порога z_c и всех z на одну и ту же величину в первом случае и неинвариантно — во втором, что несовместно. А вот для плотности возбуждения, понимаемого в указанном выше смысле, эти постановки эквивалентны и предполагают инвариантную запись, не содержащую членов, нелинейных по ρ .

Отмеченное единство свойств абелевой (передача фиксированного числа песчинок) и неабелевой (раздача всех имеющихся песчинок) версий правил иллюстрирует важный принцип, лежащий в основе построения промежуточных моделей: все, что в них можно не учитывать, учитывать не следует. В частности, если на классе универсальности модели никак не сказывается разрушение ее абелевости, значит, нет оснований при построении решений опираться на теоретический аппарат абелевых моделей. Они обладают нетривиальным свойством эквивалентности возвратных конфигураций и остовных деревьев решетки, что позволило получить ряд важных теоретических результатов для модели БТВ [16–21]. И нарушить абелевость этой модели без качественного изменения ее свойств, по всей видимости, нельзя. В то же время модель Манни допускает варьирование правил в широких пределах, что требует максимальной общности подхода как при записи уравнений, так и при их исследовании.

Исследовать ланжевеновские уравнения, описывающие масштабно-инвариантные системы, проще всего с помощью так называемой наивной перенормировки, связанной с огрублением всех масштабов [22]. При согласованном увеличении всех переменных значимые члены уравнения должны изменяться пропорциональным образом, а незначимые — стремиться к нулю (что позволяет при записи уравнений сразу отрешиться от любых деталей устройства системы на микроуровне, исчезающих на макроуровне).

Традиционно перенормировочные выражения привязывают к пространственной координате, однако в рассматриваемой задаче формулы оказываются значительно компактнее, если взять за основу время. При огрублении его масштаба $t \rightarrow bt$ остальные переменные преобразуются по формулам

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\rightarrow b^{\kappa_\xi} \mathbf{x}, \\ \rho &\rightarrow b^{\kappa_\rho} \rho, \\ \eta &\rightarrow b^{-(\kappa_\xi d + \kappa_\rho)/2} \eta, \end{aligned}$$

где временные размерности определяются формулой (11), а масштабирование шума рассчитано на основе его корреляции (14).

Для размерности, с которой перенормируется пространственная координата \mathbf{x} , в качестве индекса здесь указана буква ξ , а не буква r . Дело в том, что развитие лавины описывается несколькими пространственными масштабами, из которых динамику плотности возбуждения характеризует именно его корреляционная длина ξ , много меньшая линейной протяженности области лавины r .

В результате выполненной перенормировки уравнение (13) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} b^{\kappa_\rho - 1} \dot{\rho}(\mathbf{x}, t) &= \\ &= b^{\kappa_\rho - 2\kappa_\xi} \Delta \rho(\mathbf{x}, t) + b^{-(\kappa_\xi d + \kappa_\rho)/2} \eta(\mathbf{x}, \rho). \end{aligned}$$

Его эквивалентность исходной записи (13) требует выполнения равенств

$$\kappa_\rho - 1 = \kappa_\rho - 2\kappa_\xi = -(\kappa_\xi d + \kappa_\rho)/2,$$

из которых находятся показатели $\kappa_\xi = 1/2$ и

$$\kappa_\rho = (4 - d)/6, \quad (15)$$

описывающие динамику введенных переменных, связанных между собой формулой

$$\rho \propto \xi^{(4-d)/3}. \quad (16)$$

Эта формула вновь указывает на верхнюю критическую размерность $d_{uc} = 4$, при достижении которой плотность возбуждения не возрастает с увеличением корреляционной длины.

3.2. Активность и ширина границы

Эволюция средней активности (числа опрокидываний за шаг параллельного времени) как макрохарактеристики описывается обыкновенным стохастическим дифференциальным уравнением

$$\dot{a}(t) = \chi(\rho) \quad (17)$$

с дельта-коррелированным шумом:

$$\langle \chi(\rho) \cdot \chi(\rho') \rangle \propto \delta(\rho - \rho'). \quad (18)$$

Такой вид шума означает, что изменение количества одновременно существующих неустойчивых ячеек определяется исключительно амплитудой плотности возбуждения, которая учитывает локальные флуктуации заполнения ячеек.

Запись (17), (18) лучше всего подходит на роль определения плотности возбуждения, поскольку кроме нее включает только наблюдаемые величины. Однако даже такое определение остается неполным, так как описывает лишь амплитуду плотности, но не ее профиль.

При огрублении масштабов здесь переменные преобразуются по формулам

$$\begin{aligned} t &\rightarrow bt, \\ a &\rightarrow b^{\kappa_a} a, \\ \chi &\rightarrow b^{-\kappa_\rho/2} \chi, \end{aligned}$$

где масштабирование шума рассчитано на основе его корреляции (18). Нечувствительность уравнения (17) к такой перенормировке требует выполнения равенства

$$\kappa_a - 1 = -\kappa_\rho/2,$$

из которого с помощью соотношения (15) получаем первое из скейлинговых соотношений, необходимых для решения модели:

$$\kappa_a = (8 + d) / 12. \quad (19)$$

Развитие лавины связано с ростом ее области — продвижением вовне границы, трактуемым здесь как рост поверхности над некоторой $(d - 1)$ -мерной подложкой, соответствующей положению границы, сглаженному усреднением. Разложим относительно подложки d -мерную пространственную координату \mathbf{x} на $(d - 1)$ -мерную тангенциальную и 1-мерную нормальную составляющие \mathbf{x}_\parallel и \mathbf{x}_\perp . Динамика модуля последней описывается стохастическим уравнением

$$\dot{x}_\perp(\mathbf{x}_\parallel, t) = \rho \Delta_\parallel x_\perp(\mathbf{x}_\parallel, t) + \rho^{-1} \zeta(t). \quad (20)$$

В нем амплитуда плотности возбуждения играет роль коэффициента диффузии, т. е. выступает как фактор, способствующий разглаживанию границы, и одновременно задает относительный уровень свободного шума, стремящегося нарушить ее гладкость. Шум, как и в уравнениях (13) и (17), здесь предполагается дельта-коррелированным:

$$\langle \zeta(t) \cdot \zeta(t') \rangle \propto \delta(t - t'). \quad (21)$$

Его зависимость именно и только от времени связана с тем, что в силу фрактальности границы множество ее точек находится над одной и той же точкой подложки, из-за чего действие случайных факторов лишается пространственной привязки. При этом хотя события происходят практически на каждом временном шаге, лишь случающиеся во внешних точках

границы обеспечивают рост ее ширины, что учитывается коэффициентом при шумовом члене. Он возникает как отношение минимально возможного возбуждения, обусловленного дискретностью процессов, происходящих на границе, к амплитуде плотности возбуждения, характеризующей процессы, происходящие в глубине области лавины. За время, уходящее на то, чтобы эти процессы сказались на событиях у границы, профиль плотности возбуждения успевает смазаться. Поэтому в уравнение (20) она входит уже без аргументов — только своей амплитудой.

С физической точки зрения, принципиально важным отличием уравнения (20) от уравнений (13) и (17) является учет им тех симметрий, которые, присутствуя на микроуровне, на мезоуровне уже подвержены локальным нарушениям. Хотя передача песчинок при опрокидывании неустойчивых ячеек происходит направленным образом, у границы области лавины есть выделенное направление движения — из ее глубины наружу.

Тангенциальная составляющая \mathbf{x}_\parallel координаты отвечает за протяженность области лавины r , а разброс смещений вдоль нормальной составляющей \mathbf{x}_\perp — за ширину границы w . Поэтому при огрублении масштабов переменные преобразуются по формулам

$$\begin{aligned} t &\rightarrow bt, \\ \rho &\rightarrow b^{\kappa_\rho} \rho, \\ x_\perp &\rightarrow b^{\kappa_w} x_\perp, \\ \mathbf{x}_\parallel &\rightarrow b^{\kappa_r} \mathbf{x}_\parallel, \\ \zeta &\rightarrow b^{-1/2} \zeta, \end{aligned}$$

где масштабирование шума рассчитано на основе его корреляции (21). Чтобы вид уравнения (20) не менялся при такой перенормировке, необходимо выполнение равенств

$$\kappa_w - 1 = \kappa_\rho + \kappa_w - 2\kappa_r = -\kappa_\rho - 1/2,$$

из которых получаются два недостающих скейлинговых соотношения:

$$\kappa_w = (d - 1) / 6, \quad (22)$$

$$\kappa_r = (10 - d) / 12. \quad (23)$$

Дальнейшие выкладки элементарны, но громоздки, поэтому ограничимся их результатом:

$$\begin{array}{l}
 X \quad \kappa_x \quad \nu_x \quad \alpha_x \\
 T \quad 1 \quad \frac{12}{10-d} \quad \frac{d}{4} \\
 N \quad \frac{d+20}{12} \quad \frac{d+20}{10-d} \quad \frac{3d}{d+20} \\
 S \quad \frac{(10-d)d}{12} \quad d \quad \frac{3}{10-d} \\
 C \quad \frac{12-d}{12(d-1)} \quad \frac{(12-d)(d-1)}{10-d} \quad \frac{3d}{(12-d)(d-1)}
 \end{array} \quad (24)$$

и
$$\varepsilon = 3d / (10 - d). \quad (25)$$

Из упомянутых дополнительных характеристик лавины не рассмотренной осталась только средняя кратность опрокидывания, для которой находим

$$\kappa_m = (4 - d)(5 - d) / 12.$$

Отсюда следует, что уже в четырехмерном случае повторные опрокидывания ячеек оказываются исключительными событиями. Иначе говоря, при $d \geq d_{uc}$ геометрия решетки несущественна, поскольку реализованная на ней модель практически не отличается от модели со случайным соседством.

Наличие в соотношении (22) и в показателях для C члена $d - 1$ демонстрирует, что у модели кроме верхней критической размерности d_{uc} имеется и нижняя $d_{lc} = 1$. При $d = 1$ решение (24), очевидно, становится нереалистичным, поскольку вытекающая из него формула $N \propto TC$ предполагает постоянную активность некоторой доли ячеек в области лавины. При этом вынос избытка песчинок на ее границу, состоящую всего из пары ячеек, не может остановить развитие лавины. Поэтому оно прекращается лишь за счет удачного перераспределения песчинок в ее области. А это требует значительного времени и сравнительно низкой активности, в силу чего получаемый в численном эксперименте показатель $\nu_t = 10/7$ оказывается больше значения $4/3$, предсказываемого решением (24), а показатель $\nu_n = 9/4$ — меньше аналогичного значения $7/3$. Будучи вырожденным, одномерный случай требует построения иной промежуточной модели, что выходит за рамки данной работы. Поэтому и скейлинговые показатели для него приведены здесь лишь справочным порядком, без подтверждающих графиков.

4. РЕШЕНИЕ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИЗА СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ

В этом разделе используются понятия и обозначения из предыдущего раздела, однако все связывающие их формулы выводятся независимо. И именно

этот вывод следует считать физически обоснованным.

За t шагов развития лавины песчинки, совершающие случайные блуждания по решетке, смещаются на характерное расстояние

$$\xi \propto \sqrt{t}, \quad (26)$$

которым определяется объем $\omega \propto \xi^d$, в котором возбуждение остается скоррелированным.

Как случайное блуждание можно трактовать и изменение линейной протяженности области лавины r . При рассмотрении в параллельном времени t частота скачков задается плотностью возбуждения ρ , т. е.

$$r^2 \propto \rho t. \quad (27)$$

Если же рассматривать процесс в последовательном времени n , то частота скачков будет определяться локальным избытком песка. Поскольку за время лавины песчинки успевают свободно перемещаться в объеме корреляции ω , внутри него имеет значение не их изначальное расположение, а только суммарное количество. Его флуктуации пропорциональны $\omega^{1/2}$, т. е. избыток песка, приходящий на одну ячейку, составляет порядка $\omega^{-1/2} \propto \xi^{-d/2}$. Таким образом,

$$r^2 \propto \xi^{-d/2} n. \quad (28)$$

Подставив сюда корреляционную длину (26), получаем выражение

$$t^{d/4} \propto n / r^2 \propto r^{\nu_n - 2}.$$

Элементарное преобразование показателя его правой части

$$\nu_n - 2 = \varepsilon = \alpha_r$$

позволяет найти показатель распределения лавин по длительности

$$\alpha_t = d/4. \quad (29)$$

Столь простое выражение, разумеется, может быть получено и без промежуточных выкладок. Лавина доживает до шага t с вероятностью $\propto t^{-\alpha_t}$. Выживание лавины определяется тем, что локальный избыток песка превышает некоторый фиксированный порог, вероятность чего $\propto \omega^{-1/2}$. Приравняв эти две вероятности, с помощью формулы (26) и получаем значение (29). Следует отметить, что из него, как и из формулы (16), можно определить верхнюю критическую размерность, если помнить, что продолжительность критического ветвящегося процесса, к которому сводится развитие лавины при случайном соседстве, характеризуется значением $\alpha_t = 1$ [23].

Сопоставление формул (27) и (28) приводит к выражению

$$a/\rho \propto \omega^{1/2}, \tag{30}$$

означающему, что отношение активности (экстенсивной характеристики) к амплитуде плотности возбуждения (интенсивной характеристике) обусловливается флуктуациями количества песчинок в объеме корреляции, т. е. условиями не на макро-, а на мезомасштабе. Иными словами, условия в области лавины существенно неоднородны.

Ширина границы области лавины w задает пространственный масштаб корреляции там, где плотность возбуждения приближается к своему минимально возможному значению, обусловленному дискретностью происходящих процессов. А амплитуда плотности возбуждения определяет пространственный масштаб корреляции ξ в области лавины в целом, т. е. $\xi \propto w\rho$, откуда посредством формул (26) и (27) получаем еще одно соотношение пространственных масштабов:

$$r \propto w\rho^{3/2}. \tag{31}$$

В результате выноса песка на границу области лавины каждая ячейка внутри нее теряет в среднем $c/s \propto w/r$ песчинок. Это означает, что их избыток \sqrt{w} , имеющийся в объеме корреляции, локализован в $\sqrt{w} \cdot r/w$ ячейках. События захвата и потери таких ячеек объемом корреляции являются шагами процесса, обуславливающего изменение корреляционной длины. Рассмотрение его в качестве случайного блуждания дает выражение

$$\xi^2 \propto \xi^{d/2} r/w,$$

которое с помощью формулы (31) позволяет воспроизвести зависимость (16) для амплитуды плотности возбуждения. А из нее с помощью выражений (26) и (27) получается и соотношение (23). Его в сочетании с определением (11), соотношением (29) и формулой (31) достаточно для получения полного решения модели (24), (25).

5. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Из-за того, что плотности распределений имеют степенной вид лишь в промежуточной асимптотике, результаты численного эксперимента оказываются тем надежнее, чем больше размер решетки L . Здесь используются его значения, даваемые степенью двойки, что способствует оптимизации кода. Максимальные доступные для моделирования значения $L = 2^{14}; 2^{11}; 2^8$ для $d = 2; 3; 4$. В двумерном случае основным фактором, ограничивающим L , оказывается быстрдействие (на решетке максимального размера средняя лавина обсчитывается

несколько секунд, а крупные лавины требуют уже нескольких часов машинного времени), в четырехмерном — доступная память, а в трехмерном — и то, и другое одновременно. Решетку можно считать большой, если отношение ее объема к площади открытого края $L/2d \gg 1$. При указанных максимальных L переход от двумерного случая к трехмерному сопряжен с уменьшением этой величины в 12 раз, а к четырехмерному — в 128 раз, пропорционально чему ухудшаются и ожидания точности экспериментальных результатов.

Общий вид скейлинговых функций g_X неизвестен, поэтому при обработке результатов моделирования следует исключить его влияние, используя автомодельность формул (2) и (3). Для этого служит процедура скейлинга, т. е. рассмотрение зависимостей $X^{1+\alpha_x} \cdot u_X(X)$ от X/L^{ν_x} , полученных при различных значениях L . Правые части графиков плотности, перемасштабированных таким образом, должны совмещаться, а средние — выполаживаться, чем подтверждается правильность найденных характеристических и скейлинговых показателей.

Описанная схема кажется очень простой. Однако оказывается, что для каждой анализируемой размерности она сталкивается со специфическими трудностями, требующими отдельного рассмотрения.

Для удобства изложения предсказанные теорией значения скейлинговых и характеристических показателей для основных характеристик лавины сведены в таблицу. В ее последних столбцах, кроме того, даны показатели логарифмических поправок, возникающих в случае верхней критической размерности. Они будут определены далее.

	$d = 2$		$d = 3$		$d \geq 4$		$d = 4$	
X	ν	α	ν	α	ν	α	$\tilde{\nu}$	$\tilde{\alpha}$
T	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{12}{7}$	$\frac{3}{4}$	2	1	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
N	$\frac{11}{4}$	$\frac{3}{11}$	$\frac{23}{7}$	$\frac{9}{23}$	4	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$
R	1	$\frac{3}{4}$	1	$\frac{9}{7}$	1	2	0	1
S	2	$\frac{3}{8}$	3	$\frac{3}{7}$	4	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$
C	$\frac{5}{4}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{18}{7}$	$\frac{1}{2}$	4	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{4}$
	$\epsilon = \frac{3}{4}$		$\epsilon = \frac{9}{7}$		$\epsilon = 2$		$\tilde{\epsilon} = 1$	

Предваряя результаты компьютерного эксперимента, полученные автором и призванные подтвердить правильность выполненных расчетов, уместно кратко обобщить то, что уже известно к настоящему моменту.

Теоретических результатов здесь немного. Если не принимать во внимание тривиальные показатели ν_r и ν_s и среднеполевые значения в четырехмерном случае, остается упомянуть лишь полное решение модели в двумерном случае, полученное автором на иной методологической основе [3, 4], не обобщаемой на пространства высокой размерности. Все остальные показатели рассчитаны впервые.

В плане результатов моделирования картина существенно богаче — их обширный обзор содержится в работе [2]. Для $d = 2$ все приведенные показатели очень близки к их экспериментальным оценкам, полученным другими авторами, за исключением величины ν_t [1, 13, 14, 24–31] (причем в работе [25] — единственной из всех — дается даже показатель для периметра ν_c). Для $d = 3$ имеющиеся в литературе оценки скейлинговых показателей (включая тривиальные), как правило, оказываются несколько больше теоретических значений при удовлетворительном совпадении характеристических показателей [25–27, 32]. Наконец, для $d = 4$ кроме экспериментального подтверждения среднеполевых значений [14], известны и оценки поправочных показателей $\tilde{\alpha}$ для модели БТВ [16], ожидаемо совпадающие с их теоретическими значениями для модели Манна. Поправочные показатели $\tilde{\nu}$ ранее численно не определялись.

5.1. Двумерный случай

На рис. 2 представлены распределения основных характеристик лавины для $d = 2$, построенные по результатам обработки $8.1 \cdot 10^8$ лавин, в ходе которых произошли $2.9 \cdot 10^{15}$ опрокидываний. При домножении ординаты на $X^{1+\alpha}$ и делении абсциссы на L^ν графики, полученные для систем различного размера L , совмещаются при $1 \ll X$ и выполаживаются при $1 \ll X \ll X_1$.

На вставках на рис. 2 показаны немасштабированные плотности вероятности. В двойном логарифмическом масштабе их степенной вид в области промежуточной асимптотики представляется линейным участком графика.

Как можно видеть, скейлинг с теоретическими показателями оказывается практически идеальным для размера, объема и периметра лавин, но графики заметно расходятся в правой части для длительнос-

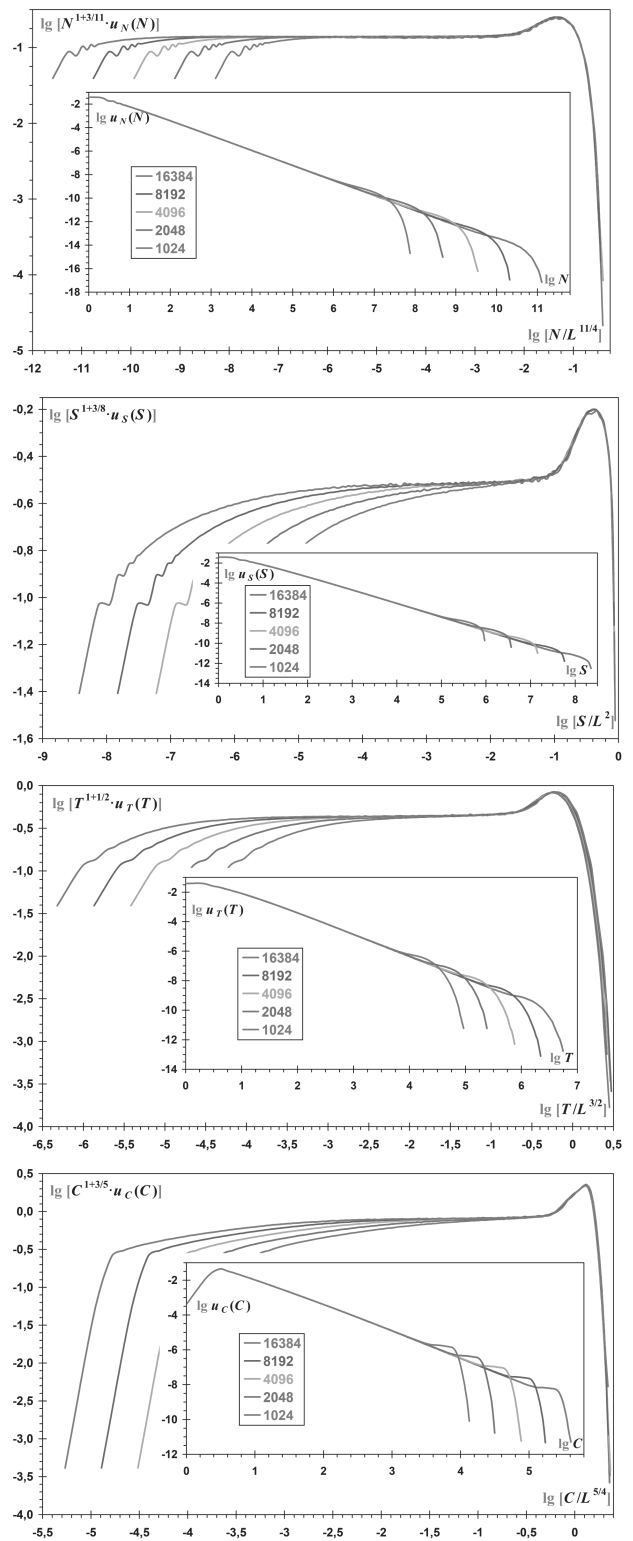


Рис. 2. Плотность распределения лавин по размеру, объему, длительности и периметру для $d = 2$ для решеток различного размера L

ти. Попытки добиться их совмещения привели бы к значениям $\nu_t > 3/2$, хорошо известным из литературы [1, 24–28], но противоречащим построенному решению.

Причина обнаруженного расхождения кроется в том, что теоретическая и экспериментальная длительности лавины — немного разные характеристики. Дело в том, что по мере развития лавины, ее теоретические характеристики, связанные между собой формулами (6) и (7), должны расти одновременно, тогда как для реальных характеристик такая связь может и нарушаться.

В силу стохастичности правил, лавина, захватившая некоторую область, в принципе может продолжаться внутри нее сколь угодно долго. При этом длительность увеличивается при неизменных объеме и периметре. И даже прирост размера лавины оказывается незначительным, поскольку ее область, уже обедненная песком, не может поддерживать высокую активность.

Описанный процесс догорания лавины уместно рассматривать как блуждание по ее области отдельных точек активности, уже не взаимодействующих друг с другом. Характерная длительность их существования в наиболее удачных условиях пропорциональна времени развития лавины T , поскольку при более долгом сохранении активности она бы наверняка вышла за границы лавины, продолжив ее развитие. Если предположить, что число точек активности, оказавшихся в удачных условиях, дается какой-то степенью T , то активность полностью угаснет за порядка $T \ln T$ шагов, так как максимум по выборке возрастает как логарифм ее объема. При этом для характерной длительности крупных лавин формула (3) заменится выражением вида

$$T_1 \propto L^{\nu_t} (1 + \theta \ln L),$$

где коэффициент $\theta \ll 1$, поскольку длительное догорание лавины обуславливается редким стечением обстоятельств. При доступных для моделирования значениях L эта зависимость практически неотличима от зависимости $T_1 \propto L^{\nu_t + \theta}$, что и приводит к небольшому завышению показателя ν_t , получаемого по результатам моделирования.

К сожалению, способ аналитического расчета коэффициента θ неизвестен. Поэтому предложенное объяснение расхождения между теорией и экспериментом пока следует считать гипотезой, требующей дополнительной проверки.

5.2. Трехмерный случай

На рис. 3 представлены распределения основных характеристик лавины для $d = 3$, построенные по результатам обработки $2.6 \cdot 10^{10}$ лавин, в ходе которых произошли $9.4 \cdot 10^{14}$ опрокидываний. Если бы перемасштабирование на этом рисунке выполнялось так же, как для $d = 2$, то для всех рассматриваемых характеристик совмещение графиков по оси абсцисс оказалось бы столь же посредственным, как и для длительности на рис. 2. Улучшить скейлинг возможно двумя способами.

Можно было завязать универсальный показатель ε , а с ним — и все скейлинговые показатели ν_x по сравнению со значениями, предсказанными решением модели. При этом удастся добиться вполне удовлетворительного скейлинга. Более того, подобная попытка анализа, хотя и выполненная с помощью другого инструментария, уже была предпринята в работе [25]. На этом пути есть только одна проблема: неизбежно получается абсурдное значение $\nu_s > 3$, означающее превышение объемом лавины объема решетки при достаточно большом линейном размере последней. Вероятно, по этим причинам в других работах [26, 27, 32], где были получены завышенные показатели для трехмерного случая, распределение лавин по объему не рассматривалось.

Разумным представляется иной подход, связанный с масштабированием абсциссы по формуле (3) на степень не реального размера решетки L , а эффективного размера

$$\Lambda = L (1 - h/L^\phi).$$

Здесь показатель $\phi = 1/7$ (он рассчитывается далее), а значение коэффициента $h \approx 0.3$ просто подбирается из соображений наилучшего совмещения графиков. Эффективный размер, разумеется, меньше реального. Но поскольку он меньше на величину, которая убывает с ростом L , то при проведении расчетов с точностью до коэффициента эффективный размер кажется превосходящим реальный, что и приводит к завышению показателей при обработке результатов эксперимента без оглядки на предсказанную теорию.

Следует отметить, что, несмотря на использование эффективного размера решетки для масштабирования, графики распределений лавин по размеру и длительности совмещаются на рис. 3 неидеально. Для N это связано с тем, что средний размер лавины остается пропорционален квадрату реального размера решетки, что влечет отклонения плотности

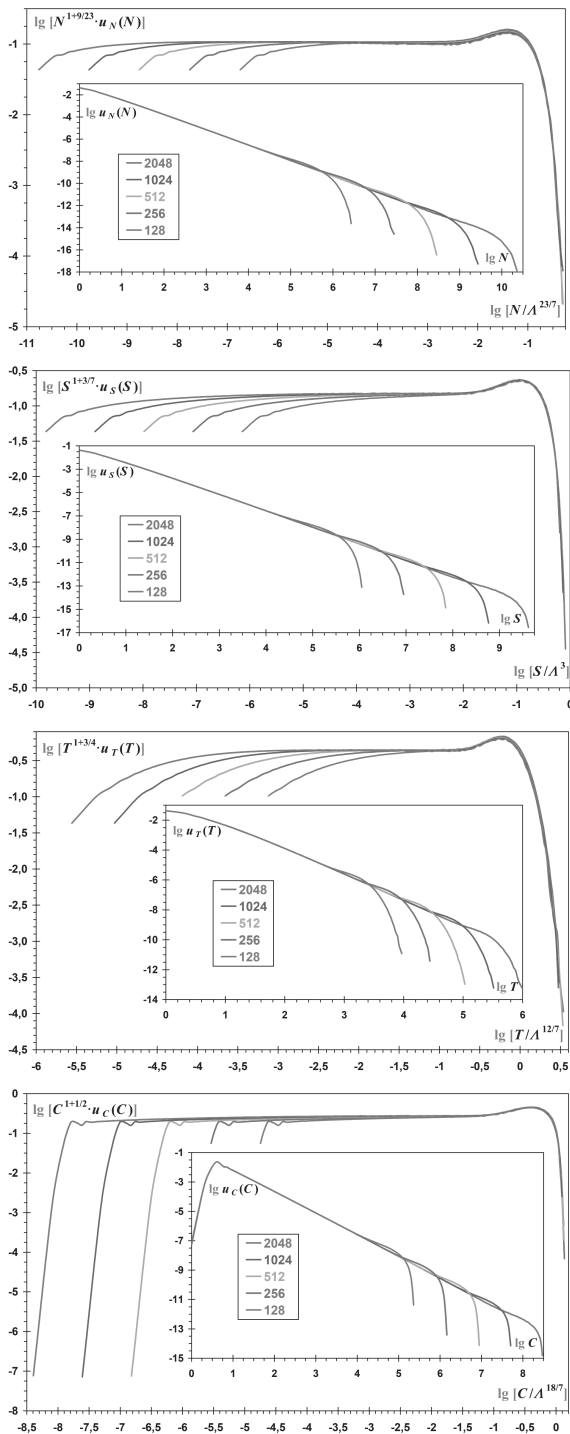


Рис. 3. Плотность распределения лавин по размеру, объему, длительности и периметру для $d = 3$ для решеток разного размера L . В отличие от рис. 2 здесь абсцисса масштабируется на степень не реального, а эффективного размера решетки

от вида (2) при $N \sim N_1$. А для T сохраняется эффект догорания лавины, делающий ее длительность несоразмерной остальным характеристикам, хотя он и оказывается много слабее из-за меньшей кратности опрокидывания.

Понять причины, потребовавшие введения эффективного размера решетки, помогает рассмотрение средней кратности опрокидывания. Для $d = 2$ выполнено $s^2 \propto nc$ или, что то же самое, $r \propto tw$. Это позволяет схематично рассматривать область лавины как набор вложенных слоев убывающей (из глубины к периферии) кратности опрокидывания, так что линейная протяженность лавины дается просто суммой ширин границ эти слоев [3, 4]. В тривиальном виде эта же ситуация воспроизводится и для $d = 4$ в силу пренебрежимо малой доли повторных опрокидываний ячеек и расположения практически всех ячеек области лавины у ее границы. Но для $d = 3$ выполнено $s^2 \propto ncr^\phi$ с указанным выше показателем ϕ . Поэтому если попытаться разложить область лавины на слои разной кратности опрокидывания, то окажется, что сумма ширин их границ tw меньше линейной протяженности r .

Область двумерной лавины увеличивается только за счет продвижения ее границы вовне, тогда как граница трехмерной лавины, образуя боковые выпячивания, оказывается столь изрезанной, что представление о глобальном направлении ее движения теряет смысл. В результате область лавины может иметь пустоты, не захватываемые даже при повторных опрокидываниях. Недоступность для лавины некоторых ячеек решетки и означает уменьшение ее эффективного размера по сравнению с реальным.

5.3. Четырехмерный случай

На рис. 4 представлены распределения основных характеристик лавины для $d = 4$, построенные по результатам обработки $5.2 \cdot 10^{10}$ лавин, в ходе которых произошли $3.6 \cdot 10^{13}$ опрокидываний. Здесь малость размеров решетки, доступных для моделирования, становится наглядной. Можно видеть, как совмещение графиков улучшается при переходе от малых решеток к большим. Однако ключевой особенностью верхней критической размерности является появление мультипликативных логарифмических поправок к степенным зависимостям. Без их введения не удастся добиться какого бы то ни было совмещения перемасштабированных графиков.

Формулы (2) и (3) сменяются более сложными выражениями [14–16]

$$u_X(X) = X^{-(1+\alpha_x)} \ln^{\tilde{\alpha}_x} X \cdot g_X(X/X_1),$$

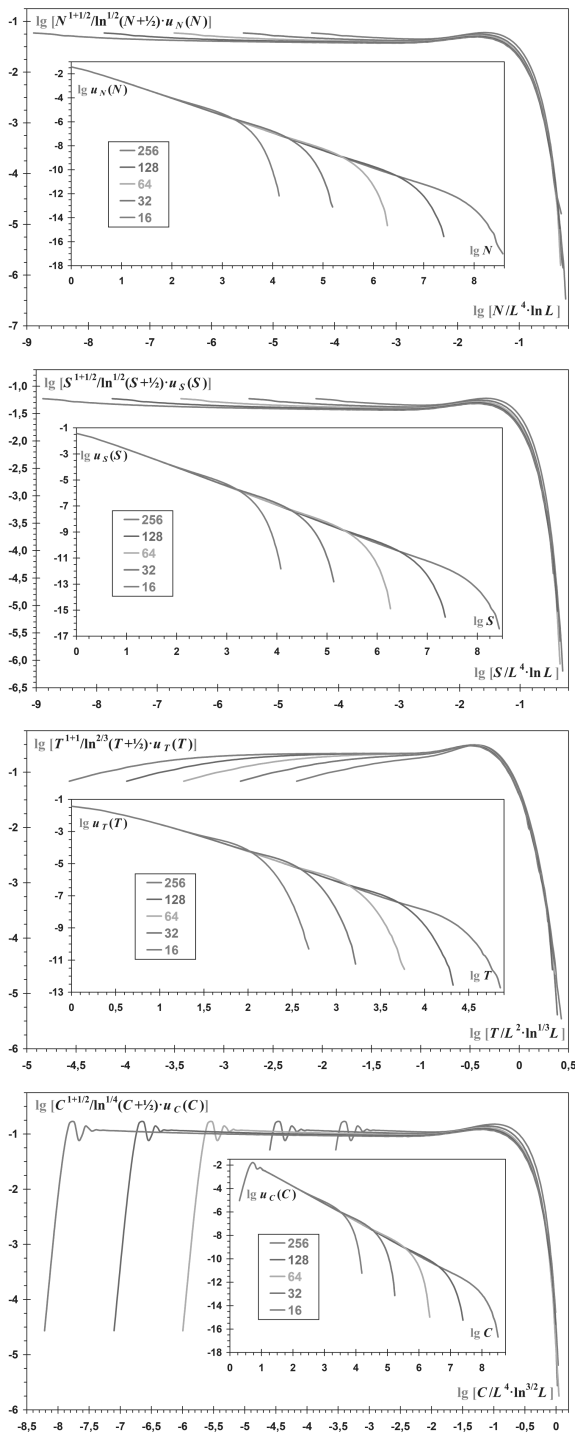


Рис. 4. Плотность распределения лавин по размеру, объему, длительности и периметру для $d = 4$ для решеток разного размера L . Чтобы при перемасштабировании ординат избежать деления на ноль, для всех характеристик введена искусственная добавка. Ее величина не принципиальна, поскольку сказывается только на левых частях графиков

$$X_1 \propto L^{\nu_x} / \ln^{\tilde{\nu}_x} L,$$

требующими нахождения еще двух показателей $\tilde{\alpha}_x$ и $\tilde{\nu}_x$ для каждой характеристики события X . При анализе этих формул следует помнить, что логарифмические поправки в них — это лишь первый порядок приближения, не претендующий на полную самосогласованность. Поэтому далее мы пренебрегаем логарифмами логарифмов, считая логарифмы разных характеристик взаимно пропорциональными величинами.

Рассмотрение по аналогии с выводом формулы (4) доли событий, не помещающихся в решетку, позволяет ввести универсальный поправочный показатель

$$\tilde{\varepsilon} = \alpha_x \tilde{\nu}_x + \tilde{\alpha}_x,$$

значение которого, как и значение универсального показателя ε , не зависит от рассматриваемой характеристики.

Формула взаимосвязи разных характеристик события (6) усложняется до записи

$$Y^{\alpha_y} / \ln^{\tilde{\alpha}_y} Y \propto X^{\alpha_x} / \ln^{\tilde{\alpha}_x} X.$$

Формулы (5а) и (5b) заменяются выражениями

$$\langle X \rangle \propto L^{\sigma_x} / \ln^{\tilde{\sigma}_x} L,$$

$$\tilde{\sigma}_x = \tilde{\nu}_x - \tilde{\varepsilon}.$$

Здесь при расчетах используется то, что при $\alpha < 1$ интеграл для среднего набирает свое основное значение в диапазоне крупных событий.

Зависимость $\langle N \rangle \propto L^2$, точная для пространства любой целой размерности, приводит к значению $\tilde{\sigma}_n = 0$, т. е. $\tilde{\varepsilon} = \tilde{\nu}_n$. Точной остается и формула $R_1 \propto L$, дающая показатель $\tilde{\nu}_r = 0$, однако рассчитывать на отсутствие логарифмических поправок к формуле $S_1 \propto L^d$ уже не приходится, т. е. про $\tilde{\nu}_s$ ничего априори сказать нельзя. Таким образом, анализ правил модели для поправочных показателей дает чуть меньше информации, чем для обычных. Однако, с другой стороны, исключительность повторных опрокидываний позволяет полагать $N \approx S$, т. е. $\tilde{\nu}_n = \tilde{\nu}_s$.

Для получения нетривиальных поправочных показателей сначала рассмотрим подробнее природу неравенства (10), связанного с перемещением песчинок по решетке. Коль скоро их взаимодействие в многомерном случае сводится к простому отталкиванию, адекватной моделью этого процесса является случайное блуждание без самопересечений. Если

его траектория из t звеньев размещается в пространственной области характерного размера r , то установившийся режим роста описывается уравнением

$$dr/dt = \partial U/\partial r,$$

где энергия отталкивания звеньев

$$U \propto \int_1^t t'/r^d dt'$$

находится суммированием их пространственной плотности вдоль траектории [33]. Это описание применимо к блужданию без самопересечений в пространстве любой размерности. Так, при $d < 4$ получается классическая формула $r^{d+2} \propto t^3$, а при $d > 4$ — тривиальная зависимость $r^2 \propto t$. Однако нас интересуют лишь размерности $d \geq 4$, в которых данный процесс описывает развитие лавины. В частности, для $d = 4$ находим нетривиальную связь

$$r^2 \propto t \cdot \ln^{1/3} t,$$

т. е. $\tilde{\alpha}_r - \tilde{\alpha}_t = 1/3$, откуда $\tilde{\nu}_t = 1/3$.

Теперь рассмотрим подробнее природу неравенства (12), связанного с размножением неустойчивых ячеек. Здесь рассуждения аналогичны приведенным в предыдущем абзаце с той разницей, что моделью служит развивающийся на решетке критический ветвящийся процесс, в котором частицы взаимно отталкиваются, избегая попадания в одни и те же ячейки (по всей видимости, специального названия такой процесс не имеет). Установившийся режим роста числа частиц a описывается в последовательном времени n уравнением

$$da/dn = \partial U/\partial a,$$

где энергия отталкивания частиц

$$U \propto \int_1^a a'/r^d da'$$

находится суммированием их пространственной плотности по всем местам их расположения. Для случая $d = 4$ получаем связь

$$a^2 \propto n/\ln^{1/3} n,$$

которую удобнее переписать в виде

$$t^2 \propto n \cdot \ln^{1/3} n,$$

т. е. $\tilde{\alpha}_t - \tilde{\alpha}_n = 1/6$, откуда $\tilde{\nu}_n = 1$. Это позволяет определить универсальный поправочный показатель $\tilde{\varepsilon} = 1$ и на его основе — остальные поправочные показатели для объема, размера, длительности и протяженности лавин:

$$\tilde{\nu}_s = 1,$$

$$\tilde{\alpha}_n = \tilde{\alpha}_s = \frac{1}{2},$$

$$\tilde{\alpha}_t = \frac{2}{3},$$

$$\tilde{\alpha}_r = 1.$$

Ненайденными остаются только показатели для периметра, т. е. чисто геометрической, а не динамической характеристики лавины. Чтобы ввести здесь динамику, рассмотрим отношение числа ячеек в объеме $v \propto r^4$, ограниченном линейной протяженностью области лавины r , к числу ячеек, собственно затронутых лавиной, $s \propto r^4/\ln r$. На каждую опрокинутую ячейку в пределах линейной протяженности лавины приходится $k \propto v/s \propto \ln r$ ячеек, в остальных из которых опрокидываний не случилось из-за неспособности лавины захватить все пространство большой размерности. Динамика коэффициента k описывается уравнением $dk \propto dv/v$, пусть априори и неочевидным, но апостериори понятным. Однако интерес представляет динамика отношения s/c , т. е. того числа ячеек, с которых одна песчинка выносится на границу области лавины. По мере роста k это отношение совершает симметричное случайное блуждание, т. е. $s/c \propto \sqrt{k}$, откуда и получаются показатели

$$\tilde{\alpha}_c = 1/4 \quad \text{и} \quad \tilde{\nu}_c = 3/2.$$

6. ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Исследователи моделей кучи песка обыкновенно пренебрегают рассмотрением границы области лавины, по-видимому, полагая периметр второстепенной характеристикой. Однако именно его изучение оказывается ключевым моментом в обоих способах решения. При использовании ланжевеновского формализма уравнение для ширины границы оказывается единственным, содержащим нелинейность, без которой явление самоорганизованной критичности невозможно. А при сведении динамики к случайным блужданиям вынос песка из объема области лавины на ее границу выступает процессом, связывающим между собой все пространственные масштабы.

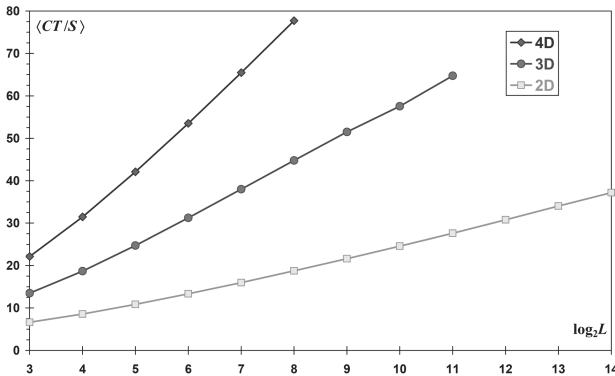


Рис. 5. Среднее время, необходимое границе области лавины для прохождения своей ширины

Чтобы лучше понять роль границы области лавины, рассмотрим время, за которое граница проходит свою ширину $q \propto wr/r$. С помощью формул (22) и (23) находим временную размерность $\kappa_q = d/4 = \alpha_t$, дающую показатели

$$\alpha_q = 1 \text{ и } \nu_q = \varepsilon, \tag{32}$$

первый из которых суперуниверсален. Из полученных соотношений на основе записи (2) возникает зависимость

$$\langle Q \rangle \propto \log L.$$

С учетом очевидного выражения

$$Q \propto CT/S$$

она легко проверяется по результатам моделирования, как показано на рис. 5.

Представление о величине q позволяет сделать более понятными некоторые сложные формулы. Так выражение (30) принимает вид $a \propto q\rho$. В самом деле, ситуация во всей области лавины изменяется лишь за то время, за которое ее граница проходит свою ширину. В силу этого величина q оказывается коэффициентом пересчета возбуждения в активность. Аналогично, и формула (28) упрощается до вида $r^2 \propto n/q$, что и интерпретировать можно схожим образом. Рост линейной протяженности области лавины связан с изменениями, происходящими на ее границе, где их темп замедлен в q раз по сравнению с ее объемом, на который приходится основная масса опрокидываний.

Выведенные здесь формулы апостериори кажутся очевидным. В самом деле, по мере развития лавины время прохождения ее границей своей ширины должно возрастать, но возрастать чрезвычайно медленно, коль скоро периферия области лавины характеризуется минимально возможной плотностью возбуждения. А самым медленным законом

роста характеристики является тот, при котором ее среднее значение зависит от размера системы с нулевым показателем, т. е. логарифмически. Однако использование соотношения (32) при расчете показателей нельзя полагать добросовестным подходом, поскольку вряд ли возможно додуматься до введения характеристики Q , еще не имея на руках полного решения модели. Во всяком случае, автору не известно примеров прозрения подобного рода.

Вместе с тем, если добавить значение (32) к значениям (8) и (9), получаемым непосредственно из правил модели, то для ее решения останется найти еще только два скейлинговых соотношения. И если выбирать их из соображений простоты итоговой записи, а не математического вывода или физического обоснования, то это, несомненно, будут формулы (29) и (22). Первая из них содержит информацию о верхней критической размерности модели, а вторая — и о нижней (явным образом), и о верхней (неявным — при $d = d_{uc}$ изменение ширины границы представляет собой случайное блуждание, для которого $\kappa_w = 1/2$). Набор из этих пяти изящных соотношений, дополненный тождеством (4), позволяет восстановить полное решение (24), (25), являющееся намного более громоздким.

Кроме ширины границы w принципиальной для построения промежуточной модели оказалась корреляционная длина ξ . И хотя использование этой величины, напротив, типично для описания критических систем, с ней был связан другой нехарактерный прием — перенормировка ланжевеновского уравнения (13) на ее масштабе, а не на масштабе протяженности лавины r . Структура ее области полностью описывается с помощью этих трех пространственных масштабов, соотношение которых

$$w : \xi : r = 1 : \rho : \rho^{3/2}$$

задается амплитудой плотности возбуждения ρ . Не будучи определенной явно, она не допускает непосредственного измерения, однако оказывается непосредственно связанной с активностью a двумя способами — как на макроуровне через уравнение (17), так и на мезоуровне через формулу (30). Введение, описание и успешное использование скрытой переменной ρ представляется методически важнейшим результатом данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. S. Manna, J. Phys. A **24**, L363 (1991).

2. G. Pruessner, *Self-Organised Criticality: Theory, Models and Characterisation*, Cambridge University Press, New York (2012).
3. А. В. Подлазов, Изв. вузов: ПНД **21**, 69 (2013).
4. А. В. Подлазов, Изв. вузов: ПНД **24**, 39 (2016).
5. П. Бак, *Как работает природа: Теория самоорганизованной критичности*, URSS, Москва (2015) [P. Bak, *How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality*, Springer-Verlag, Inc., New York (1996)].
6. D. Sornette, A. Johansen, and I. Dornic, J. Phys. I (France) **5**, 325 (1995).
7. S. Clar, B. Drossel, and F. Schwabl, J. Phys.: Cond. Mat. **8**, 6803 (1996).
8. P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987).
9. P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld, Phys. Rev. A **38**, 364 (1988).
10. D. Dhar and R. Ramaswamy, Phys. Rev. Lett. **63**, 1659 (1989).
11. R. Pastor-Satorras and A. Vespignani, J. Phys. A **33**, L33 (2000).
12. M. Kloster, S. Maslov, and C. Tang, Phys. Rev. E **63**, 026111 (2001).
13. E. Milshtein, O. Biham, and S. Solomon, Phys. Rev. E **58**, 303 (1998).
14. S. Lübeck and K. D. Usadel, Phys. Rev. E **56**, 5138 (1997).
15. V. B. Priezzhev, J. Stat. Phys. **98**, 667 (2000).
16. D. V. Ktitarev, S. Lübeck, P. Grassberger, and V. B. Priezzhev, Phys. Rev. E **61**, 81 (2000).
17. D. Dhar, Phys. Rev. Lett. **64**, 1613 (1990).
18. S. N. Majumdar and D. Dhar, Physica A **185**, 129 (1992).
19. D. Dhar and S. S. Manna, Phys. Rev. E **49**, 2684 (1994).
20. V. B. Priezzhev, D. V. Ktitarev, and E. V. Ivashkevich, Phys. Rev. Lett. **76**, 2093 (1996).
21. C.-K. Hu, E. V. Ivashkevich, C.-Y. Lin, and V. B. Priezzhev, Phys. Rev. Lett. **85**, 4048 (2000).
22. H. G. E. Hentschel and F. Family, Phys. Rev. Lett. **66**, 1982 (1991).
23. Т. Харрис, *Теория ветвящихся процессов*, Мир, Москва (1966) [T. E. Harris, *The Theory of Branching Processes*, Springer-Verlag (1963)].
24. R. Dickman, T. Tomé, and M.J. de Oliveira, Phys. Rev. E **66**, 016111 (2002).
25. S. Lübeck, Phys. Rev. E **61**, 204 (2000).
26. M. Alava and M. A. Muñoz, Phys. Rev. E **65**, 026145 (2002).
27. S. Lübeck and P. C. Heger, Phys. Rev. E **68**, 056102 (2003).
28. H. N. Huynh, G. Pruessner, and L. Y. Chew, J. Stat. Mech. P09024 (2011).
29. S. Lübeck and K. D. Usadel, Phys. Rev. E **55**, 4095 (1997).
30. A. Chessa, H. E. Stanley, A. Vespignani, and S. Zapperi, Phys. Rev. E **59**, R12 (1999).
31. A. Chessa, A. Vespignani, and S. Zapperi, Comput. Phys. Commun. **121–122**, 299 (1999).
32. R. Pastor-Satorras and A. Vespignani, Eur. Phys. J. B **19**, 583 (2001).
33. Y.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **63**, 470 (1989).

ПОИСК ПЕРЕХОДА БАЙКА – БЕН АРУСА – ПЕШЕ ПУТЕМ РАЗМЕРНОЙ РЕДУКЦИИ

А. Ф. Валов^а, А. С. Горский^б, С. К. Нечаев^{с, д*}

^а Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^б Институт проблем передачи информации Российской академии наук
127051, Москва, Россия

^с Междисциплинарный научный центр им. Ж.-В. Понселе (CNRS IRL 2615)
119002, Москва, Россия

^д Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 ноября 2021 г.,
после переработки 21 ноября 2021 г.
Принята к публикации 23 ноября 2021 г.

Рассмотрен микроканонический ансамбль случайных путей фиксированной длины, N , в окрестности полупроницаемой границы диска. При варьировании проницаемости диска для траекторий, η , от слабого режима ($0 < \eta \ll 1$) до сильного ($\eta \rightarrow 1$) наблюдается переход Байка – Бен Арус – Пеше (Baik–Ben Arous–Péché, ВВР), который проявляется в изменении характерных флуктуаций траекторий в направлении, перпендикулярном границе. Типичный размах флуктуаций, Δ , ведет себя как $\Delta(N) \sim N^{1/3}$ для $0 < \eta \ll 1$ и как $\Delta(N) \sim N^{1/2}$ для $\eta \rightarrow 1$. Применен нелинейный метод размерной редукции UMAP, широко используемый для выделения значимых («медленных») переменных при анализе больших массивов данных, и показано, что он позволяет увидеть переход ВВР в рассматриваемой задаче, что проявляется в специфической кластеризации данных на двумерной фазовой плоскости. Аналогичная размерная редукция, осуществленная с помощью линейного метода PCA, оказывается нечувствительной к переходу ВВР.

DOI: 10.31857/S0044451022030129

1. ВВЕДЕНИЕ

Размерные соображения (скейлинг) довольно часто служат инструментом, с помощью которого удобно исследовать статистическое поведение системы. Два скейлинговых закона: Гаусса и Кардара – Паризи – Занга (КПЗ), появляются в огромном разнообразии статистических систем. Стандартное распределение Гаусса с критическим индексом $1/2$ для флуктуаций следует из центральной предельной теоремы для большого числа независимых случайных величин. С другой стороны, критический индекс КПЗ $1/3$ для флуктуаций, определяемых законом Трейси – Видома, характерен для экстремальной статистики большого числа

коррелированных случайных величин. Поведение некоторых наблюдаемых в соответствующих скейлинговых режимах определяется решениями специальных дифференциальных уравнений. Например, решение уравнения Пенлеве II определяет скейлинговую зависимость КПЗ в режиме Трейси – Видома.

Недавно в работе [1] было показано, что переход от гауссова режима к режиму КПЗ является универсальным и может рассматриваться как фазовый переход с соответствующим образом выбранной скейлинговой функцией. В работе [2] было показано, что данная функция вновь определяется решением уравнения Пенлеве II. Позже подобные фазовые переходы были обнаружены в нескольких физических задачах, таких как “last passage percolation” [3], модель ASEP со специальными начальными условиями [4], q-TASEP с наличием медленных частиц [5], перколяция в двумерии [6] и переход спиновое стек-

* E-mail: sergei.nechaev@gmail.com

ло-парамагнетик в приближении среднего поля [7]. В последнем случае переход происходит при некотором критическом значении температуры.

Во всех случаях соответствующие фазовые переходы представляют собой так называемый фазовый переход Байка – Бен Аруса – Пеше (Baik–Ben Arous–Péché, ВВР), который обнаруживает новый класс универсальности перехода от флуктуационного режима КПЗ к гауссову. Физика, лежащая в основе перехода ВВР, во всех доступных примерах достаточно универсальна. На языке полимеров переход ВВР означает, что $(1+1)D$ случайная траектория находится точно на пороге образования связанного состояния с каким-либо дефектом или притягивающей границей.

Взаимодействие траектории и дефекта может быть введено явно или каким-либо эффективным способом. Пример явного взаимодействия приведен в работе [8], где переход ВВР происходит, когда часть траектории полимера локализуется на протяженном дефекте при некотором критическом значении связи между полимером и дефектом. Пример эффективного взаимодействия траектории и протяженного дефекта был рассмотрен в работах [9–12] в связи с задачей Феррари – Шпона [13]. Формулируя задачу в полимерных терминах, можно сказать, что часть полимерной траектории испытывает переход между различными флуктуационными режимами над полукругом. Соответствующая качественная картина была подтверждена в работе [14]. В этой постановке ключевым моментом является рассмотрение микроканонического ансамбля флуктуирующих траекторий фиксированной длины N . Условие $N = cR$ накладывается на траектории, концы которых закреплены в противоположных точках полукруга радиусом R . Варьируя значение c , в микроканоническом ансамбле мы наблюдаем переход ВВР. В данном случае принципиально, что мы рассматриваем траектории фиксированной длины, из-за чего траектории прижимаются к границе диска, а c является управляющим параметром, который эффективно регулирует силу «прилипания» траекторий к полукругу.

Несмотря на то, что критические (скейлинговые) показатели говорят о статистике траекторий, иногда они оказываются слишком грубыми, чтобы характеризовать конкретные детали системы, и требуются какие-то более информативные характеристики коллективного поведения путей. На помощь приходят спектральные методы изучения многообразий. Известно, что изолированные собственные значения матрицы смежности некоторого графа, оторванные

от непрерывной части спектральной плотности, характеризуют кластеры графа [15]. С динамической точки зрения возбуждения (квазичастицы), распространяющиеся по графу, локализируются на этих кластерах. Таким образом, предложив некоторый специальный способ построения графа по ансамблю траекторий, статистику которых мы анализируем, мы ожидаем, что сможем увидеть проявление перехода ВВР в поведении самых медленных мод (наибольших собственных значений) матрицы смежности построенного графа.

Современные задачи работы с большими данными (big data) сталкиваются с серьезными проблемами, связанными с объемом и надежностью исследуемых наборов данных. Кроме того, экспериментальные данные довольно часто содержат избыточную локальную информацию, которая маскирует глобальные свойства системы (данное свойство известно как «проклятие размерности»). В связи с этим актуальной проблемой анализа данных является снижение их размерности и выделение «медленных мод», ответственных за основные особенности поведения системы. В физике сложных систем такими глобальными характеристиками являются параметры порядка, которые, будучи макроскопическими, классифицируют поведение системы в разные моменты времени по наборам микропеременных. С другой стороны, часто при описании коллективных явлений выбор параметров порядка представляет собой сложную задачу, которая может быть решена методами обучения без контроля (nonsupervised learning), как это происходит в задачах упорядочения в стаях птиц и рыб [16] или при изучении возникновения топологической фазы в переходе Березинского – Костерлица – Таулесса [17, 18].

Интенсивное развитие новых нелинейных методов размерной редукции в течение последних 10 лет связано с неспособностью линейных методов описать внутреннюю топологическую структуру (многообразии) большинства современных наборов данных. Среди нелинейных методов наиболее популярными являются SNE (t-SNE) [19, 20], UMAP [21] и их многочисленные обобщения [22–24]. Координаты в низкоразмерном пространстве являются решениями задачи оптимизации для некоторого информационного функционала (типа дивергенции Кульбека – Лейблера для SNE или кросс-энтропии для UMAP).

В данной работе мы предлагаем исследовать переход ВВР в микроканоническом ансамбле путей фиксированной длины, флуктуирующих в окрестности полупроницаемой границы диска, с помощью

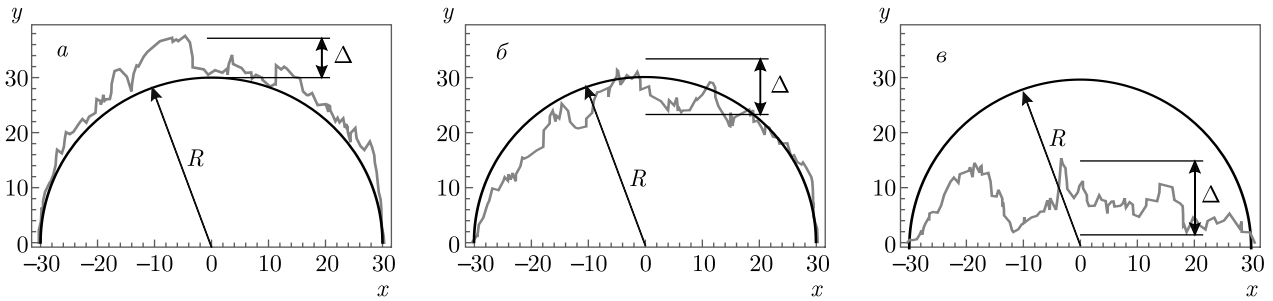


Рис. 1. Пример пути длиной $N = 4R$, который огибает частично непроницаемый полукруг радиусом $R = 30$ для $\eta = 0$ (а), 0.8 (б), 0.98 (в)

метода снижения размерности. Мы модифицируем постановку задачи в модели Феррари–Шпона и рассматриваем микроканонический ансамбль путей с фиксированным параметром c , определенным выше. Мы вводим еще один управляющий параметр, η , который соответствует «проницаемости» диска для траекторий. Подробная постановка задачи описана в следующем разделе. Переход ВВР при уменьшении размерности большого набора данных по блужданиям траекторий проявляется как некоторый спектральный паттерн кластеризации в двумерной фазовой плоскости.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим микроканонический ансамбль случайных направленных путей фиксированной длины, $N = cR$, с заданными граничными условиями, которые находятся в окрестности диска радиусом R . Пусть $\pi R < N \ll R^2$, параметр c фиксирован, а диск частично проницаем для траекторий. Долю шагов траектории, которые попадают внутрь диска, обозначим через η . Варьируя η от $\eta = 0$ (все пути находятся вне диска) до $\eta = 1$ (все пути находятся внутри диска), мы исследуем зависимость характерного масштаба флуктуаций путей в нашем микроканоническом ансамбле от их взаимодействия с границей диска. С точки зрения траекторий частиц в евклидовом $(1+1)D$ пространстве-времени, параметр η можно рассматривать как отношение масс частицы в двух фазах: внутри и снаружи диска. Соответствующая статистическая сумма микроканонического ансамбля траекторий может быть записана как

$$Z(cR, \eta) = \sum_{\text{paths of length } N} \delta(N - cR) \delta\left(\eta - \frac{N_{in}(\text{path})}{N}\right), \quad (1)$$

где $N_{in}(\text{path})$ — число шагов конкретного пути внутри окружности, N — общее число шагов, которое совпадает с $N = cR$, фиксированной длиной траектории.

Напомним некоторые качественные аргументы, следующие из скейлингового анализа. Случайное блуждание из $N \gg R^2$ шагов свободно флуктуирует вне диска и почти не чувствует ограничений (границы диска). Таким образом, единственная возможная комбинация D (коэффициент диффузии) и N , которая имеет размерность длины, может быть $\Delta \sim (DN)^{1/2}$ для типичного участка траектории. В противоположном режиме, $\pi R < N \ll R^2$, статистика цепи существенно возмущена взаимодействием с границей диска. В пределе сильного растяжения, $N = cR$, соответствующий критический индекс определяется скейлинговой зависимостью: $\Delta \sim (DRN)^\gamma$ с $\gamma = 1/3$, которая в пределе $N \ll R^2$ дает $\Delta \ll R$, а при $N \sim R^2$ переходит в $\Delta \sim R$.

Постановка задачи для численного моделирования выглядит следующим образом: каждая $(1+1)D$ траектория длиной $N = cR$, флуктуирующая вблизи полупроницаемого диска радиусом R , представлена последовательностью точек $\{(x_i, y_i)\}_{i=1, N}$, конечные точки траектории закреплены рядом с противоположными сторонами полукруга, $(-R - \epsilon, 0)$ и $(R + \epsilon, 0)$, где $\epsilon/R \ll 1$. Расстояния между соседними точками траектории распределены по закону Гаусса с единичными средним значением и дисперсией.

Проницаемость полукруга характеризуется параметром $\eta = N_{in}/N$, который определяет отношение числа шагов внутри круга, N_{in} , к общему числу шагов траектории, $N = N_{in} + N_{out}$. Предельный случай $\eta \rightarrow 0$ (т.е. $N_{in} = 0$) соответствует модели Феррари–Шпона, в которой траектории находятся снаружи непроницаемого полукруга, в то время как противоположный предел, $\eta \rightarrow 1$, соответствует траекториям, полностью остающимся внутри полукруга, за исключением конечных точек, ко-

торые по определению фиксированы вне диска. На рис. 1 изображены примеры траекторий для $\eta = 0, 0.8, 0.98$.

Как известно из работы [9], «растянутая» случайная траектория длиной $N = cR$ из микроканонического ансамбля, вынужденная блуждать в окрестности непроницаемой круговой границы, флуктуирует в пределах «полосы» типичного характерного размера $\Delta(R)$ со скейлинговой зависимостью

$$\Delta(R) \sim R^{1/3}. \tag{2}$$

Вопросы, поставленные в данной работе, формулируются следующим образом: 1) как влияет проницаемость η на критический показатель γ в зависимости для флуктуаций $\Delta(R|\eta) \sim R^\gamma$, 2) можно ли увидеть переход (если таковой имеется) не только на уровне критического показателя γ (что является довольно грубой характеристикой перехода), но и непосредственно на уровне ансамбля траекторий.

Для ответа на эти вопросы мы провели моделирование траекторий методом Монте-Карло по алгоритму Метрополиса с «ценой» пребывания внутри диска, η . На начальном этапе моделирования мы генерируем $N = cR$ точек, равномерно распределенных на полукруге радиусом $R + \epsilon$, которые затем смещаются случайным образом, сохраняя 1) гауссово распределение длин связей, 2) упорядочение по x -координате, $x_i > x_{i-1}$ для всех $i \in [1, N]$. На каждом шаге моделирования мы следим за величиной

$$u = \left| \eta - \frac{N_{in}}{N} \right|, \tag{3}$$

где η – заданная проницаемость полукруга, N_{in} – число шагов пути внутри полукруга. Применение алгоритма Метрополиса подразумевает, что, если значение u в (3) не увеличивается при случайном смещении, а все остальные условия для траектории выполняются, то мы принимаем эту конформацию с единичной вероятностью; в обратном случае мы принимаем ее с вероятностью e^{-Nu} . После примерно N^3 шагов моделирования мы уравниваем систему, проверяем, что $u = 0$, и получаем траектории, из которых затем вычисляем типичные флуктуации в радиальном направлении, Δ , над средней точкой полукруга. Здесь и далее мы принимаем $c = 4$ для вытянутых траекторий, которые при $\eta = 0$ локализованы в пределах полосы $\Delta \sim R^{1/3}$ около границы полукруга. При изменении η критическая экспонента γ меняется от $1/3$ до $1/2$, как показано на рис. 2, что является признаком фазового перехода ВВР.

Чтобы выяснить тонкие детали статистического поведения траекторий, которые могут остаться

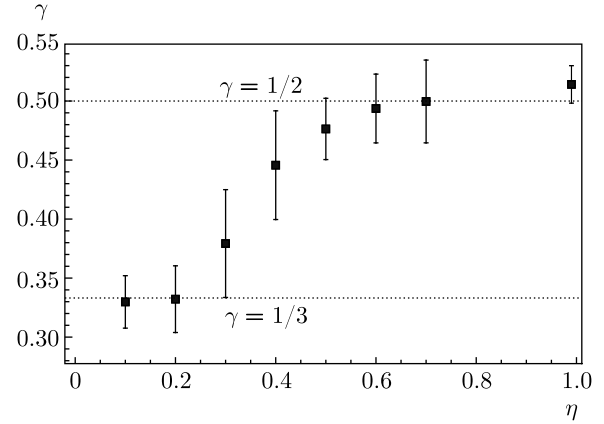


Рис. 2. Зависимость критической экспоненты γ в законе масштабирования $\Delta(R) \sim R^\gamma$ от функции параметра проницаемости, $\eta = N_{in}/N$. При $\eta = 0$ имеем $\gamma = 1/3$ (КПЗ-поведение), при $\eta \rightarrow 1$ имеем $\gamma \rightarrow 1/2$ (гауссово поведение)

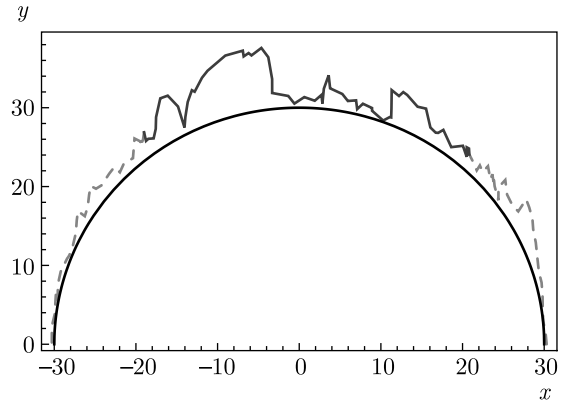


Рис. 3. Пример подготовки траектории для уменьшения размерности. Из траектории длиной $N = 120$, блуждающей около полукруга радиусом $R = 30$, вырезана центральная часть длиной $N' = 60$

вне нашего довольно грубого рассмотрения в терминах критических экспонент, γ , мы изучаем переход ВВР на уровне ансамбля траекторий, используя нелинейные методы снижения размерности. Поскольку в нашей постановке начальная и конечная точки всех траекторий фиксированы, мы имеем дело только с «подвижной» частью траекторий, на которую меньше всего влияют граничные условия. А именно, из конкретной реализации траектории длиной $N = 4R$, $\mathbf{r} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1, N}$, или, эквивалентно, $\mathbf{r} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1, 4R}$, мы рассматриваем только ее центральную часть длиной $N' = 2R$, $\mathbf{r}_c = \{(x_i, y_i)\}_{i=[R+1, 3R]}$, как показано на рис. 3.

Удобно переписать $2 \times (2R)$ -компонентный вектор \mathbf{r}' как $1 \times (4R)$ -компонентный вектор:

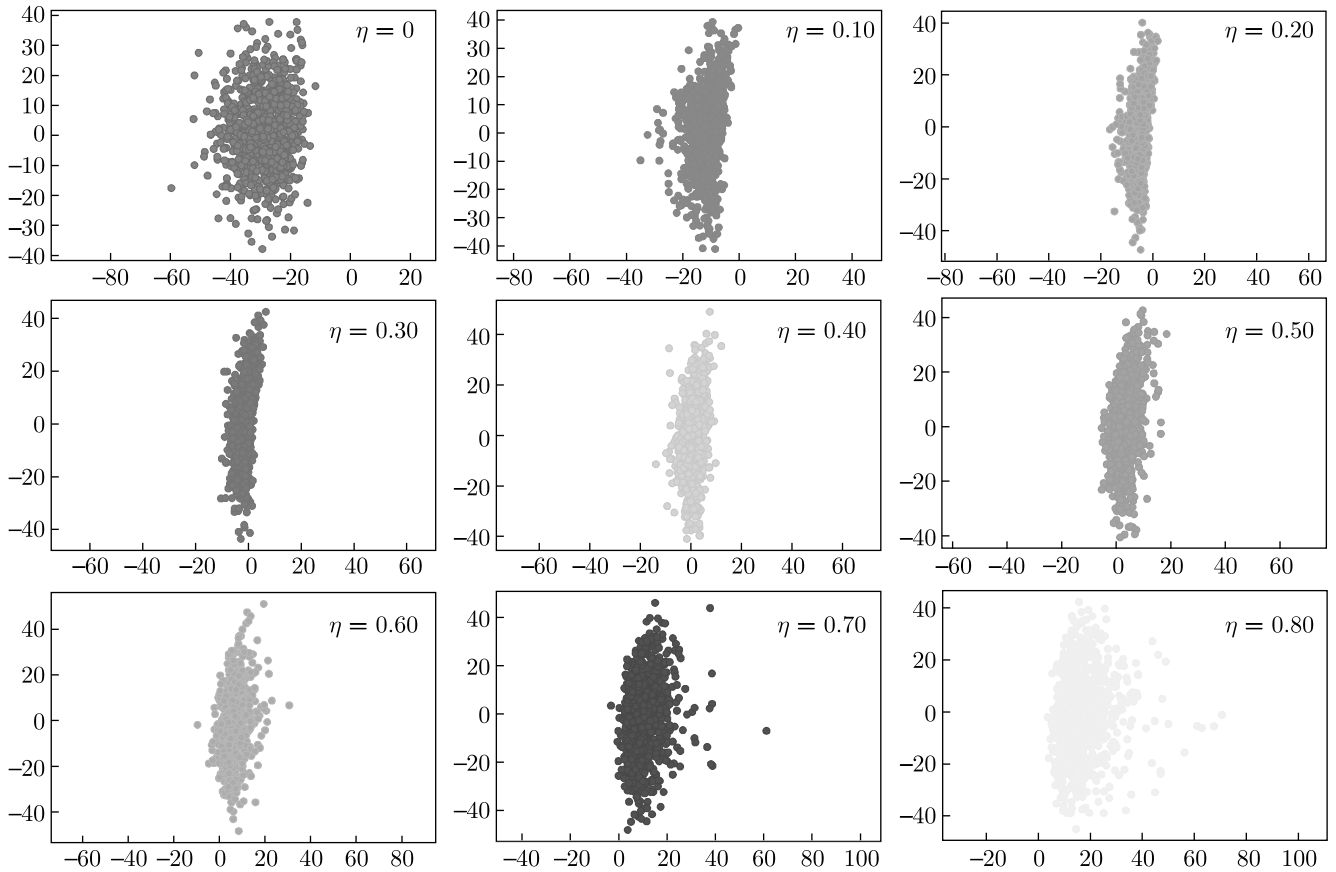


Рис. 4. Встраивание набора данных 120-мерных векторов (4) в двумерное фазовое пространство с помощью метода PCA

$$\mathbf{X} = (x_{R+1}, y_{R+1}, x_{R+2}, y_{R+2}, x_{R+3}, y_{R+3}, \dots, x_{3R}, y_{3R}). \quad (4)$$

В качестве набора данных, в котором осуществляется снижение размерности, мы выбираем ансамбль 120-компонентных векторов \mathbf{X} , уникально кодирующих траектории длиной $N = 120$, которые флуктуируют около диска радиусом $R = 30$ с проникаемостью η . Наш набор данных почти всюду равномерно покрывает интервал $0 \leq \eta < 1$ с набором параметров $\eta = \{0, 0.05, 0.1, 0.2, \dots, 0.9\}$, где для каждого значения η генерируется 1000 векторов \mathbf{X} . Подчеркнем, что траектории, соответствующие разным значениям η , смешиваются в одном датасете и затем анализируются все вместе.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Мы исследовали статистические свойства ансамбля путей, используя два популярных метода уменьшения размерности: анализ главных компонент (PCA) и UMAP (Uniform Manifold

Approximation and Projection) [21]. Мы используем оба этих метода, поскольку один из них (PCA) является линейным, а другой (UMAP) — нелинейным. Результаты размерной редукции, т.е. проекции датасета на двумерное фазовое пространство, показаны на рис. 4 для PCA и на рис. 5 для UMAP.

Оба метода, PCA и UMAP, демонстрируют пространственное разделение пятен, соответствующих траекториям, сгенерированным при различных значениях η . Кроме того, при некоторых η ($\eta \leq 0.25$) метод UMAP выделяет обособленный кластер, содержащий часть траекторий. Такой кластер не виден при уменьшении размерности с помощью PCA. Сравнивая рис. 4 и 5, можно заключить, что PCA, по-видимому, оказывается слишком грубым, чтобы различить траектории, соответствующие фазам с различными критическими показателями γ на рис. 2, как мы видим в переходе ВВР. Напротив, UMAP четко разделяет траектории, соответствующие разным фазам, что делает осмысленным и оправданным применение нелинейных методов снижения размерности для рассматриваемой задачи.

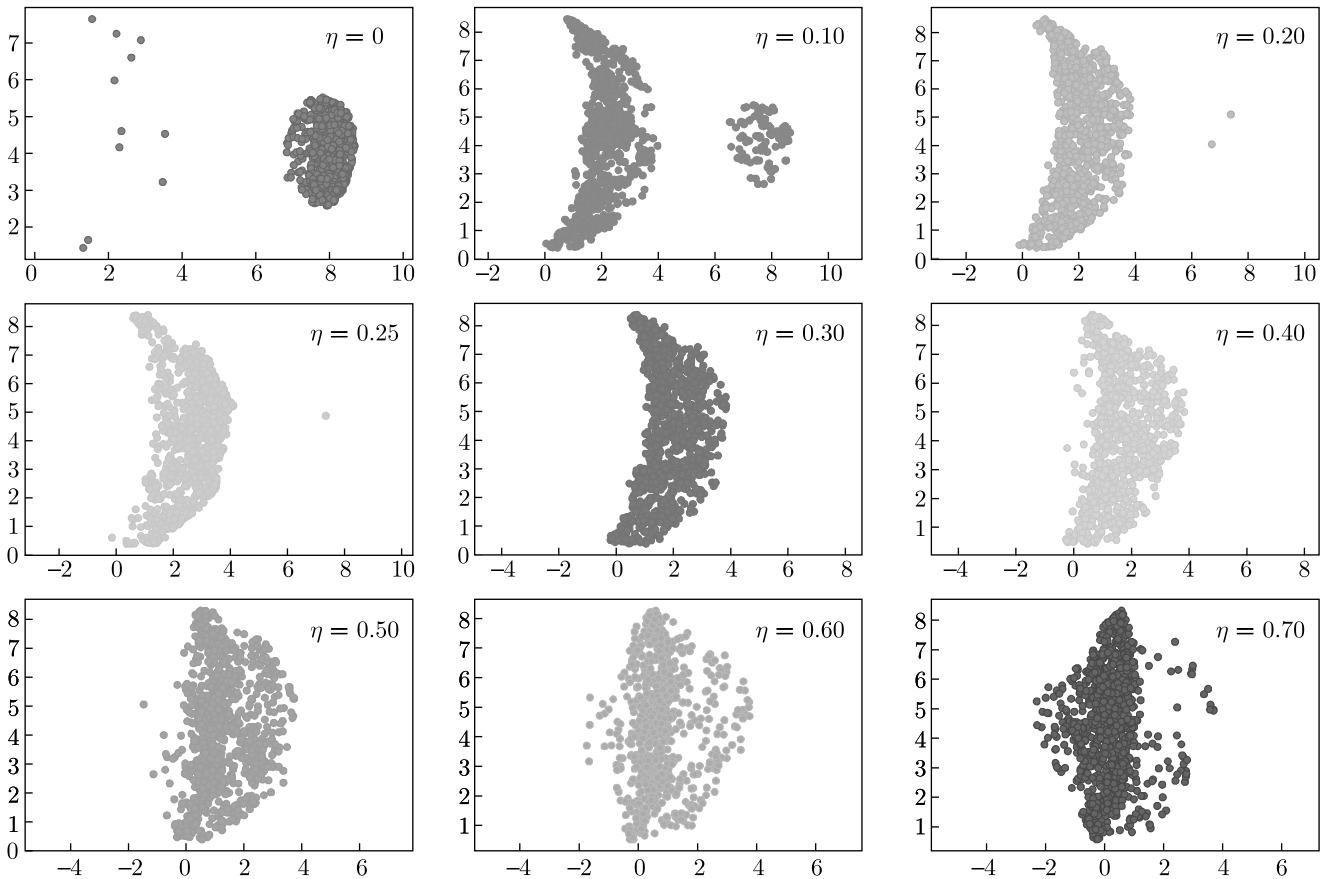


Рис. 5. Встраивание набора данных 120-мерных векторов (4) в двумерное фазовое пространство с помощью метода UMAP

Следует отметить, что используемая в данной работе реализация UMAP является результатом применения алгоритма Laplacian Eigenmaps (LE) в качестве отправной точки для некоторого процесса оптимизации. Известно, что LE дает низкоразмерные вложения, состоящие из низкоэнергетических собственных мод лапласиана графа исходной системы, поэтому финальные вложения, полученные с помощью UMAP, можно рассматривать как тонкое проявление спектральной кластеризации в низкоразмерном пространстве для алгоритма LE.

Исчезновение правого кластера на рис. 5 при изменении параметра η в интервале $\eta \in [0, 0.25]$ имеет очень ясный физический смысл. Каждая точка на рис. 5 обозначает некоторую траекторию: точки из левого кластера соответствуют траекториям с гауссовой статистикой, точки из правого (бокового) кластера кодируют траектории с КПЗ-статистикой. При увеличении η от $\eta = 0$ к $\eta = 1$ количество траекторий со статистикой $1/3$ (КПЗ) уменьшается и одновременно увеличивается количество траек-

торий со статистикой $1/2$ (гауссовой). Такая трансформация проявляется в переходе некоторых точек из правого кластера в левый. Выше $\eta = 0.25$ траекторий со статистикой КПЗ не существует и соответствующий кластер исчезает.

Это поведение находится в качественном согласии с тем, что наблюдается на рис. 2, однако есть некоторое количественное различие: переход ВВР, проанализированный с помощью метода уменьшения размерности на рис. 5, появляется при меньших значениях η , чем переход ВВР, измеренный по зависимости $\gamma(\eta)$ на рис. 2. Это количественное расхождение требует дальнейшего анализа, однако мы полагаем, что оно связано с малой длиной рассматриваемых траекторий: $N = 60$ для размерной редукции и $N = 120$ для скейлинговой зависимости $\gamma(\eta)$.

Мы провели проверку устойчивости полученных результатов. А именно, чтобы проверить, действительно ли каждая точка на рис. 5 обозначает какой-то конкретный путь, мы провели следующий численный эксперимент. После генерации рис. 5 мы взя-

ли некоторый снимок (скажем, при $\eta = 0.1$) и удалили из набора данных все траектории, соответствующие левому (гауссову) кластеру (пятну) при $\eta = 0.1$. Затем мы повторно запустили УМАР на этом измененном наборе данных и снова получили ансамбль двумерных пятен для всех рассматриваемых значений η . Мы обнаружили, что левое (гауссово) пятно при $\eta = 0.1$ отсутствует. Этот эксперимент доказывает однозначное соответствие между каждой точкой на двумерной фазовой плоскости, полученной после нелинейной размерной редукции, и каждой конкретной траекторией при некотором значении проницаемости η .

4. ОБСУЖДЕНИЕ

В этой работе мы обнаружили переход ВВР в микроканоническом ансамбле траекторий фиксированной длины в окрестности частично проницаемого диска. Переход проявляется в изменении критического показателя γ флуктуаций траекторий в радиальном направлении вблизи границы диска при изменении проницаемости η . Мы показали, что нелинейный метод редукции размерности, тесно связанный со спектральным анализом матрицы связности большого массива данных (так называемый метод УМАР), позволяет идентифицировать переход ВВР через кластеризацию изображений траекторий на двумерной фазовой плоскости.

Наш результат показывает, что нелинейная редукция размерности применима для идентификации фазового перехода в ансамбле протяженных объектов (траекторий), подчиняющихся некоторому ограничению (например, наличию границы диска). В связи с этим возникает вопрос о применении метода УМАР для сходной задачи о полимерах вблизи точечных дефектов, где переходы ВВР были найдены для различных управляющих параметров, см. работы [8, 12]. Было бы также интересно применить наш метод для изучения канонического ансамбля траекторий с фиксированным химическим потенциалом, контролирующим длину пути. Такая постановка аналогична интегралу по путям массивных частиц в евклидовом пространстве-времени. Другая потенциально интересная возможность касается комбинации УМАР с алгоритмом квантового метода Монте-Карло [25], который применим для получения фазовых диаграмм в сильносвязных квантовых системах.

В работах [8, 26] переход ВВР был сформулирован в полимерных терминах как образование

изолированного собственного значения, выходящего из континуума в эффективной матричной модели с большим числом степеней свободы, N . Было бы интересно развить эффективное матричное описание для проблемы, рассматриваемой в настоящей работе, и увидеть аналогичное отсоединение одиночного собственного значения в точке перехода. Образование бокового кластера при редукции размерности в методе УМАР дает намек на возможные подходы к данной задаче.

Благодарности. Мы благодарны организаторам семинара по статистической механике сложных систем в Центре Понселе, на котором обсуждались результаты данной работы.

Финансирование. Работа А. Г. и С. Н. поддержана Российским научным фондом (грант № 21-11-00215).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Baik, G. Ben-Arous, and S. Peche, *Ann. Probab.* **33**, 1643 (2005), arXiv:math/0403022.
2. J. Baik, *Duke Math. J.* **133**, 205 (2006), arXiv:math/0504606.
3. J. Baik, G. Barraquand, I. Corwin, and T. Suidan, *Ann. Probab.* **46**, 3015 (2018).
4. A. Aggarwal and A. Borodin, *Ann. Probab.* **47**, 613 (2019), arXiv:1607.08684; A. Borodin, I. Corwin, and P. Ferrari, *Comm. Pure Appl. Math.* **67**, 1129 (2014).
5. G. Barraquand, *Stochastic Processes and their Applications* **125**, 2674 (2015), arXiv:1404.7409.
6. S. Saber and A. Ali Saberi, arXiv:2109.02348.
7. J. Baik and J. O. Lee, *Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Statist.* **56**, 2897 (2020), arXiv:1711.06364.
8. A. Krajenbrink, P. Le Doussal, and N. O'Connell, *Phys. Rev. E* **103**, 042120 (2021), arXiv:2009.11284.
9. S. Nechaev, K. Polovnikov, S. Shlosman, A. Valov, and A. Vladimirov, *Phys. Rev. E* **99**, 012110 (2019).
10. A. Vladimirov, S. Shlosman, and S. Nechaev, *Phys. Rev. E* **102**, 012124 (2020).
11. A. S. Gorsky, S. K. Nechaev, and A. F. Valov, *JHEP* **08**, 123 (2018).
12. A. Gorsky, S. Nechaev, and A. Valov, *Phys. Part. Nuclei* **52**, 185 (2021), arXiv:2005.02382.

13. P. L. Ferrari and H. Spohn, *Ann. Probab.* **33**, 1302 (2005).
14. B. Meerson and N. R. Smith, *J. Phys. A: Math. Theor.* **52**, 415001 (2019).
15. R. R. Nadakuditi and M. E. J. Newman, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 188701 (2012), arXiv:1205.1813; R. R. Nadakuditi and M. E. J. Newman, *Phys. Rev. E* **87**, 012803 (2012), arXiv:1208.1275.
16. M. Titus, G. Hagstrom, and J. R. Watson, *PLoS Comp. Biol.* **17**, e1007811 (2021).
17. J. F. Rodriguez-Nieva, F. Joaquin, and M. S. Scheurer, *Nature Phys.* **15**, 790 (2019).
18. T. Mendes-Santos, X. Turkeshi, M. Dalmonte, and A. Rodriguez, *Phys. Rev. X* **11**, 011040 (2021).
19. G. E. Hinton and S. T. Roweis, in *Advances in Neural Information Processing Systems*, ed. by S. Becker, S. Thrun, and K. Obermayer, MIT Press, Massachusetts (2003), Vol. 15, pp. 857–864.
20. L. D. V. Maaten and G. Hinton, *J. Machine Learning Res.* **9**, 2579 (2008).
21. L. McInnes, J. Healy, and J. Melville, arXiv:1802.03426.
22. T. Sainburg, L. McInnes, and T. Q. Gentner, arXiv:2009.12981.
23. G. C. Linderman, M. Rachh, J. G. Hoskins, S. Steinerberger, and Y. Kluger, *Nature Methods* **16**, 243 (2019).
24. L. Van Der Maaten, *J. Machine Learning Res.* **15**, 3221 (2014).
25. N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn, *ЖЭТФ* **114**, 570 (1998) [*JETP* **87**, 310 (1998)], <https://doi.org/10.1134/1.558661>.
26. G. Barraquand and P. Le Doussal, *Phys. Rev. E* **104**, 024502 (2021).

МЕТОД ПСЕВДОАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЯЗКОСТИ И ИОННОЙ САМОДИФФУЗИИ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ

А. Л. Фальков^{a*}, П. А. Лобода^{a,b,**}, А. А. Овечкин^{a***}, С. В. Ивлиев^b

^a Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е. И. Забабахина
456770, Снежинск, Челябинская обл., Россия

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

Поступила в редакцию 26 ноября 2021 г.,
после переработки 29 ноября 2021 г.
Принята к публикации 29 ноября 2021 г.

С помощью квазиклассического варианта метода псевдоатомной молекулярной динамики выполнены расчеты коэффициентов динамической вязкости и ионной самодиффузии теплой и умеренно нагретой плотной плазмы ряда химических элементов, представляющие интерес для исследований по физике высоких плотностей энергии, решения ряда прикладных геофизических и планетологических задач, а также для сравнения с расчетными данными других авторов. Учтены эффекты, обусловленные кулоновским взаимодействием в среде, а также квантовыми свойствами электронной подсистемы плазмы. Предложены соответствующие аналитические аппроксимации для коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии, которые могут быть использованы для моделирования динамики плотного ионизованного вещества при описании экспериментов по физике высоких плотностей энергии.

DOI: 10.31857/S0044451022030130

1. ВВЕДЕНИЕ

Во многих задачах физики высоких плотностей энергии реализуются квазиравновесные состояния вещества с плотностью порядка твердотельной и температурой, недостаточно высокой для его полной ионизации, — так называемое теплое, $T \sim E_F$ ($E_F \sim 10$ эВ — энергия Ферми), или умеренно нагретое, $T \lesssim 0.3$ –1 кэВ, плотное ионизованное вещество. Поскольку экспериментальные данные по теплофизическим свойствам такого вещества весьма ограничены и часто имеют значительную погрешность, большое значение имеет разработка соответствующих теоретических методов, не использующих эмпирическую информацию и применимых в указанной области параметров вещества. Теплое и умеренно нагретое плотное вещество, как правило, характери-

зуется частичным вырождением электронной подсистемы, а также сопоставимыми значениями кинетической и потенциальной энергий взаимодействия частиц. Поэтому для описания свойств такого вещества методы расчета, разработанные для слабонеидеальной плазмы и твердого тела, часто оказываются неприменимыми.

На практике при относительно невысоких температурах, $T \lesssim E_F$, и плотностях меньше или порядка нескольких значений плотности твердого тела наиболее точные результаты дает *ab initio*-метод квантовой молекулярной динамики (КМД) [1]. Однако этот метод имеет свои ограничения: сильный рост вычислительных затрат при $T \gtrsim E_F$, невозможность описания взаимодействия частиц с помощью псевдопотенциалов при высоких плотностях и температурах, когда ионные остовы перекрываются или происходит тепловое возбуждение внутренних электронов. Поэтому расчеты методом КМД требуются дополнять результатами других моделей, области применимости которых пересекались бы с диапазоном температур и плотностей, практически до-

* E-mail: sinarit9091@mail.ru

** E-mail: p.a.loboda@vniitf.ru

*** E-mail: ovechkin.an@mail.ru

ступным для КМД. Среди таких моделей выделяются модели среднего атома (см., например, [2–6]), которые являются существенно более экономичными по сравнению с методом КМД, что достигается путем сведения задачи к одноцентровой и сферически-симметричной.

Такой подход вполне эффективен при описании термодинамических свойств вещества, однако он не позволяет вычислять ионные переносные характеристики — коэффициенты самодиффузии и вязкости. Отметим также, что существует промежуточный диапазон параметров плазмы, в котором, с одной стороны, температуры и плотности достаточно высоки, чтобы сделать расчеты методом КМД затруднительными, но, с другой стороны, степень неидеальности плазмы достаточно велика, что не позволяет пренебречь ионными корреляциями и воспользоваться оценками для коэффициентов переноса, следующими из кинетической теории газов [7, 8]. Поэтому желательно иметь метод, который позволял бы проводить расчеты при более высоких температурах по сравнению с КМД, при этом учитывал бы сильные межчастичные корреляции в плотном ионизованном веществе и был бы свободен от ограничений, характерных для моделей среднего атома. В принципе, таким условиям отвечает вариант метода КМД с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (так называемая безорбитальная молекулярная динамика — orbital-free molecular dynamics, OFMD, или томас-фермиевская молекулярная динамика — Thomas-Fermi molecular dynamics, TFMD) [9–13], однако эти подходы все равно остаются достаточно затратными.

В настоящей работе рассмотрен квазиклассический вариант [14, 15] другого перспективного метода — метода псевдоатомной молекулярной динамики (ПАМД) [16–18], — представляющий собой комбинацию метода классической молекулярной динамики (МД) [19–21] для ионов и теоретической модели Старретта и Саумона [22–24] в квазиклассическом приближении для описания ионных корреляций и расчета эффективных парных потенциалов взаимодействия ионов. С помощью данного варианта метода ПАМД получены зависимости коэффициентов динамической вязкости $\eta(\rho, T)$ и самодиффузии $D(\rho, T)$ от плотности ρ и температуры T для плотной плазмы ряда химических элементов, представляющих интерес для моделирования динамики плотного ионизованного вещества в исследованиях по физике высоких плотностей энергии [25, 26], при решении ряда задач планетологии и геофизики [27–34], а также для сравнения с расчетными дан-

ными других авторов [35–38]. Краткое описание метода ПАМД и способы расчета ионных переносных коэффициентов рассматриваются в разд. 2. Результаты расчетов коэффициентов динамической вязкости и самодиффузии приведены в разд. 3. В разд. 4 проведено обсуждение результатов расчетов.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Теоретическая модель Старретта и Саумона [22–24] представляет собой обобщение модели среднего атома, в рамках которого удалось достичь самосогласованного описания микроструктуры вещества (с учетом ион-ионных и ион-электронных корреляций) и потенциальной энергии парного взаимодействия в электрон-ионной плазме. Модель позволяет с высокой степенью физической достоверности описать как результаты ряда рентгеноструктурных экспериментов по томсоновскому рассеянию монохроматического излучения на плотной плазме [25, 26], так и данные, полученные в ходе математического моделирования с использованием различных вариантов методов МД и Монте-Карло [23, 39, 40]. При этом расчет статической микроструктуры вещества по модели Старретта и Саумона оказывается существенно менее затратным по сравнению с указанными методами.

В модели Старретта и Саумона ядра атомов, рассматриваемые совместно с центрально-симметричными облаками связанных и экранирующих свободных электронов с плотностями соответственно $n_{e,b}(r)$ и $n_e^{scr}(r)$, образуют псевдоатомы (ПА), электрически нейтральные на бесконечности¹⁾:

$$Z = \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_e^{PA}(r), \quad (1)$$

где Z — заряд ядра, а величина

$$n_e^{PA}(r) = n_{e,b}(r) + n_e^{scr}(r) \quad (2)$$

определяет плотность электронов псевдоатома. При этом движение псевдоатома описывается законами классической механики.

Экранирующая электронная плотность $n_e^{scr}(r)$, определяющая вид межйонного потенциала, в модели Старретта и Саумона [22, 23] находится как разность плотностей свободных электронов в полной модели среднего атома и в модели среднего атома

¹⁾ В разд. 2 используется атомная система единиц ($e = \hbar = m_e = 1$).

с той же ион-ионной парной корреляционной функцией $g_{II}(r)$ и тем же химическим потенциалом электронов μ_e , но с искусственно удаленным центральным ядром:

$$n_e^{scr}(r) = n_e(r) - n_{e,f}^{ext}(r) - n_{e,b}(r), \quad (3)$$

где $n_e(r)$ — суммарная электронная плотность в полной модели среднего атома, $n_{e,f}^{ext}(r)$ — плотность свободных электронов.

Эффективную потенциальную энергию $V(r)$ парного взаимодействия между ионами в рамках модели Старретта и Саумона удобно вычислять с помощью обратного трехмерного интегрального преобразования Фурье²⁾ от разности фурье-образов неэкранированной кулоновской энергии взаимодействия ионов и свертки экранирующей электронной плотности $n_e^{scr}(r)$ с прямой ион-электронной парной корреляционной функцией $c_{Ie}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$, что дает в результате [23]:

$$V(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{+\infty} dk k V(k) \sin(kr), \quad (4)$$

$$\beta V(k) = \frac{4\pi\beta}{k^2} Z_*^2 - n_e^{scr}(k) c_{Ie}(k, \bar{n}_e^0).$$

Здесь $\beta = 1/T$, $\bar{n}_e^0 = Z_* n_I^0$ — средняя плотность свободных электронов, $n_I^0 = \rho N_A a_0^3 / A$ — асимптотическая плотность ионов (ат. ед.), ρ — плотность вещества (г/см³), a_0 — борковский радиус, N_A — число Авогадро, A — атомный вес (г/моль). Величина Z_* — средний заряд иона в картине псевдоатома — определена выражением

$$Z_* = Z - \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_{e,b}(r) = \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_e^{scr}(r). \quad (5)$$

Фурье-образ прямой электрон-электронной парной корреляционной функции $c_{Ie}(k, \bar{n}_e^0)$ из (4) определен в [23] через фурье-образы экранирующей электронной плотности $n_e^{scr}(k)$ и эффективной восприимчивости электронного газа $\chi_e(k)$:

$$c_{Ie}(k, \bar{n}_e^0) = -\beta n_e^{scr}(k) / \chi_e(k). \quad (6)$$

Для восприимчивости электронного газа $\chi_e(k)$ используется приближение [41], состоящее в учете корреляционных эффектов в электронном газе на основании моделирования методом Монте-Карло [42].

²⁾ В рассматриваемом нами сферически-симметричном случае трехмерное интегральное преобразование Фурье сводится к синус-преобразованию Фурье, но над функцией, которая умножена на $4\pi r/k$ при прямом преобразовании и на $k/(\pi r)$ — при обратном, где r — радиальная координата, а k — волновое число.

В рамках квазиклассического подхода (см., например, [2]) полная электронная плотность $n_e(r)$ может быть определена в результате решения системы уравнений для «бесконечного среднего атома» [24], заряд ядра которого равен Z :

$$n_e(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} I_{1/2} \left(\beta \left(\mu_e - V_{Ne}^{eff}(r) \right) \right),$$

$$I_{1/2}(x) = \int_0^{+\infty} \frac{dy \sqrt{y}}{1 + \exp(y - x)}, \quad (7)$$

$$V_{Ne}^{eff}(r) = -\frac{Z}{r} + \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_e(r') - \langle Z \rangle n_I^0 g_{II}^{(0)}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \left(\frac{3n_e(r)}{\pi} \right)^{1/3} + \left(\frac{3n_e^0}{\pi} \right)^{1/3}.$$

Здесь $n_e^0 = \lim_{r \rightarrow \infty} n_e(r)$ при $r \rightarrow \infty$ — асимптотическая плотность электронов; $V_{Ne}^{eff}(r)$ — эффективная потенциальная энергия электрона в поле ядра, других электронов и внешних ионов с зарядами

$$\langle Z \rangle = \frac{n_e^0}{n_I^0} = \frac{\sqrt{2}}{n_I^0 \pi^2 \beta^{3/2}} I_{1/2}(\beta \mu_e). \quad (8)$$

Плотность свободных электронов $n_{e,f}^{ext}(r)$ можно найти при решении задачи, аналогичной (7), положив заряд ядра равным нулю ($Z \equiv 0$):

$$n_{e,f}^{ext}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} I_{1/2} \left(\beta \left(\mu_e - V_e^{eff,ext}(r) \right) \right),$$

$$V_e^{eff,ext}(r) = \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_{e,f}^{ext}(r') - \langle Z \rangle n_I^0 g_{II}^{(0)}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \left(\frac{3n_{e,f}^{ext}(r)}{\pi} \right)^{1/3} + \left(\frac{3n_e^0}{\pi} \right)^{1/3}. \quad (9)$$

В уравнениях (7) и (9) химический потенциал электронного газа μ_e определяется по модели Томаса–Ферми–Дирака, а ион-ионная парная корреляционная функция (радиальная функция распределения — РФР) $g_{II}(r)$ взята в нулевом приближении модели Старретта и Саумона относительно учета межйонных взаимодействий:

$$g_{II}^{(0)}(r) = \theta(r - r_0^I),$$

где $\theta(x)$ — функция Хевисайда, $r_0^I = \sqrt[3]{3/(4\pi n_I^0)}$ — радиус сферической атомной ячейки³⁾. Решение системы уравнений (7), полученное с функцией нулевого приближения $g_{II}^{(0)}(r)$, отвечает модели Томаса–Ферми–Дирака с учетом обменного взаимодействия электронов в локальном приближении [2].

Решение систем уравнений (7) и (9) позволяет найти экранирующую электронную плотность (3) и эффективную энергию межйонного взаимодействия (4), если известен вклад связанных электронов $n_{e,b}(r)$. Для описания этого вклада в данной работе используется приближение [45], состоящее в том, что связанными считаются только электроны с отрицательной энергией, локализованные в объеме сферической атомной ячейки:

$$n_{e,b}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} \left\{ I_{1/2} \left[\beta \left(\mu_e - V_{Ne}^{eff}(r) \right) \right] - J_{1/2} \left[\beta \left(\mu_e - V_{Ne}^{eff}(r) \right), -\beta V_{Ne}^{eff}(r) \right] \right\} f_{cut}(r). \quad (10)$$

В формулу (10) входит $J_k(x, a)$ — неполный интеграл Ферми–Дирака [2], и гладкая функция $f_{cut}(r)$ [23], аппроксимирующая ступенчатую функцию Хевисайда $\theta(r - r_0^I)$:

$$J_k(x, a) = \int_a^{+\infty} \frac{dy y^k}{1 + \exp(y - x)}, \quad (11)$$

$$f_{cut}(r) = \left[1 + \exp\left(\frac{r - r_0^I}{cr_0^I}\right) \right]^{-1}, \quad c = \frac{1}{20}.$$

Для численного решения систем уравнений (7) и (9) применялся метод Пуассона–Гельмгольца [46]. При выполнении синус-преобразований Фурье использовался метод интегрирования быстросциллирующих функций [47, 48].

Полученные функции $V(r)$ использовались при МД-моделировании системы, состоящей из $N_{tot} = 343$ частиц. В начальный момент времени ионы

³⁾ В [23, 24] показано, что замена РФР на ступенчатую функцию Хевисайда в уравнениях (7) и (9) не приводит к существенному изменению экранирующей электронной плотности. Поиск последующих приближений для РФР $g_{II}(r) \neq g_{II}^{(0)}(r)$ может быть основан как на результатах ПАМД-моделирования ионной микроструктуры вещества, так и на решении системы уравнений Орнштейна–Зернике [43] для определения реалистических РФР $g_{II}(r)$ [14, 15, 44]. Совместное итерационное уточнение РФР и экранирующей электронной плотности позволяет получить самосогласованное решение для модели Старретта и Саумона, которое в рамках метода ПАМД не имеет большого смысла, поскольку оказывается неоправданно затратным.

хаотически распределялись внутри расчетной области с периодическими граничными условиями с сохранением средней плотности вещества. Интегрирование уравнений, описывающих движение ионов, осуществлялось с помощью двухслойной по времени численной схемы [21]. Флуктуации температуры системы контролировались с помощью алгоритма с отрицательной обратной связью [21], который позволяет корректировать ускорения частиц на каждом шаге расчета по времени. При проведении моделирования считалось, что система находится в локальном термодинамическом равновесии с одинаковыми значениями температуры ионов и электронов. Шаг расчета по времени составлял $\Delta t = 0.2\text{--}0.7$ фс. В ходе расчета проводилось до 0.5 млн шагов, причем в ходе первых 25 тыс. шагов устанавливалась необходимая температура ионной подсистемы вещества, а затем происходило накопление статистической информации о динамике системы.

Коэффициент самодиффузии ионов вещества $D(\rho, T)$ рассчитывался двумя способами. В приближении Эйнштейна–Смолуховского указанная величина может быть определена как [49]

$$D_r = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6N_{tot}t} \left\langle \sum_{i=1}^{N_{tot}} |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \right\rangle, \quad (12)$$

где $\{\mathbf{r}_i(t)\}_{i=1}^{N_{tot}}$ — совокупность радиус-векторов частиц в некоторый ненулевой момент времени t , $\{\mathbf{r}_i(0)\}_{i=1}^{N_{tot}}$ — набор радиус-векторов в начальный момент времени. Выразив в (12) средний квадрат смещения частицы за время t через интегралы от ее скорости, можно получить формулу Кубо–Грина [49], которая связывает автокорреляционную функцию (АКФ) скорости $\mathbf{v}_i(t)\mathbf{v}_i(0)$ с коэффициентом ионной самодиффузии:

$$D_v = \frac{1}{3N_{tot}} \int_0^{+\infty} dt \sum_{i=1}^{N_{tot}} \langle \mathbf{v}_i(t)\mathbf{v}_i(0) \rangle, \quad (13)$$

где $\{\mathbf{v}_i(t)\}_{i=1}^{N_{tot}}$ и $\{\mathbf{v}_i(0)\}_{i=1}^{N_{tot}}$ — наборы скоростей частиц соответственно в некоторый момент времени t и в начальный момент времени. Проведенные нами расчеты показывают, что значения D_r и D_v , определенные для некоторого состояния плотной плазмы, обычно отличаются друг от друга не более чем на 10%. Указанное различие обусловлено как счетной погрешностью, так и влиянием на величину D_r периодических граничных условий. По результатам расчетов коэффициентов ионной самодиффузии были построены аналитические аппроксимации значений $D_{PAMD}(\rho, T) = (D_r + D_v)/2$.

Для определения величины коэффициента динамической вязкости в настоящей работе используется формула Кубо–Грина, записанная через АКФ фурье-образа тензора вязких напряжений $\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$ ($\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$) при $\mathbf{k} = 0$ [49]:

$$\eta = \frac{1}{3TV} \int_0^{+\infty} dt \sum_{\alpha < \beta} \langle \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t) \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, 0) \rangle, \quad (14)$$

где символ « $\sum_{\alpha < \beta} \dots$ » означает суммирование АКФ недиагональных компонент тензора $\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$ по следующему правилу [21]:

$$\sum_{\alpha < \beta} \Pi_{\alpha\beta}(\dots) \Pi_{\alpha\beta}(\dots) \equiv \Pi_{xy}(\dots) \Pi_{xy}(\dots) + \Pi_{xz}(\dots) \Pi_{xz}(\dots) + \Pi_{yz}(\dots) \Pi_{yz}(\dots). \quad (15)$$

Выражение для фурье-образа $\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t)$ имеет вид [49]

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t) = \sum_{i=1}^{N_{tot}} \left(m_{at} v_{i\alpha}(t) v_{i\beta}(t) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_{tot}} \frac{(r_{ij})_{\alpha} (r_{ij})_{\beta}}{r_{ij}} \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right). \quad (16)$$

Тензор (16) содержит кинетический (первое слагаемое суммы) и потенциальный вклады (второе слагаемое суммы). Кинетический вклад обусловлен поперечным переносом импульса в результате непосредственного (диффузионного) смещения ионов, потенциальный вклад связан с парными столкновениями частиц [49]. ПАМД-моделирование позволяет учесть эти вклады совместно.

Расчеты по формулам (12)–(14) проводились на основе ПАМД-моделирования движения системы частиц до некоторого момента времени t_{max} . Поэтому расчетные переносные коэффициенты $D_r(t_*)$, $D_v(t_*)$ и $\eta(t_*)$ также оказываются зависящими от времени $t_* \leq t_{max}$ (см. рис. 1). Величина t_* для каждого из рассматриваемых переносных коэффициентов выбиралась исходя из условий $dD_r/dt|_{t_*} \approx 0$, $dD_v/dt|_{t_*} \approx 0$ и $d\eta/dt|_{t_*} \approx 0$. При этом дальнейшее увеличение t_* зачастую приводит лишь к увеличению дисперсии переносных коэффициентов при сохранении их средних значений [33], поскольку при больших значениях t абсолютные величины АКФ близки к нулю и испытывают хаотические флуктуации.

Отметим, что при расчете величин коэффициентов переноса из (12), (13) и (14) используется алгоритм накопления данных [21, 50, 51], который

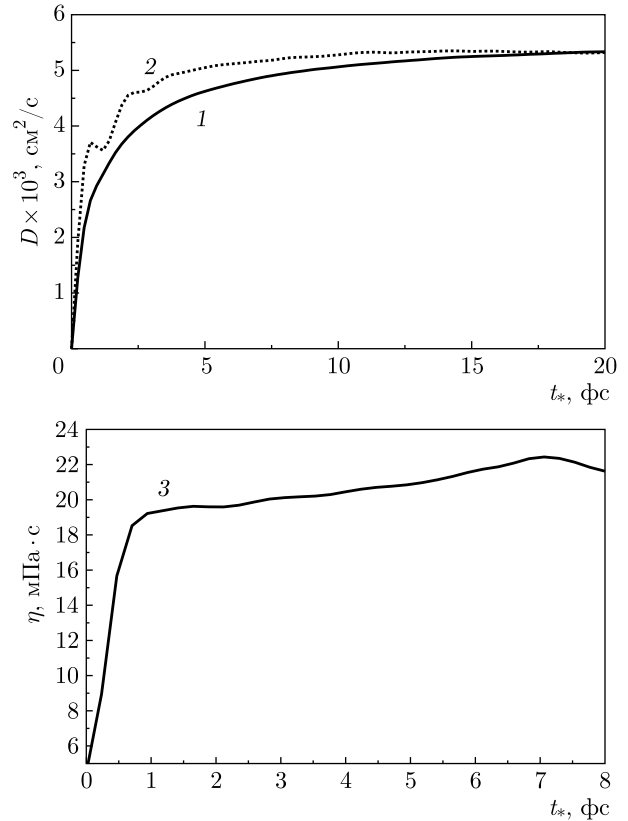


Рис. 1. Ионные переносные коэффициенты в зависимости от времени их накопления t_* : 1 — D_r (12), 2 — D_v (13), 3 — η (14). Плазма Fe при $\rho = 34.5 \text{ г/см}^3$ и $T = 100 \text{ эВ}$

позволяет существенно снизить величину дисперсии результатов моделирования. Для любых вариантов МД-моделирования далее по тексту указаны диапазоны статистической неопределенности результатов, которые соответствуют одному среднему квадратичному отклонению результатов моделирования от их общего выборочного среднего [51].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

3.1. Расчеты ион-ионных радиальных функций распределения

Полученные с помощью ПАМД-моделирования РФР $g_{II}(r)$ были сопоставлены с результатами расчетов методом TFMD [9], а также по квазиклассическому варианту [14, 15] исходной версии модели Старретта и Саумона [22–24] с решением уравнений Орнштейна–Цернике с гиперцепным замыканием [43, 53] для РФР. На рис. 2 приведен пример РФР для состояний на ударной адиабате сплошного железа. Как видно на рисунке, все полученные

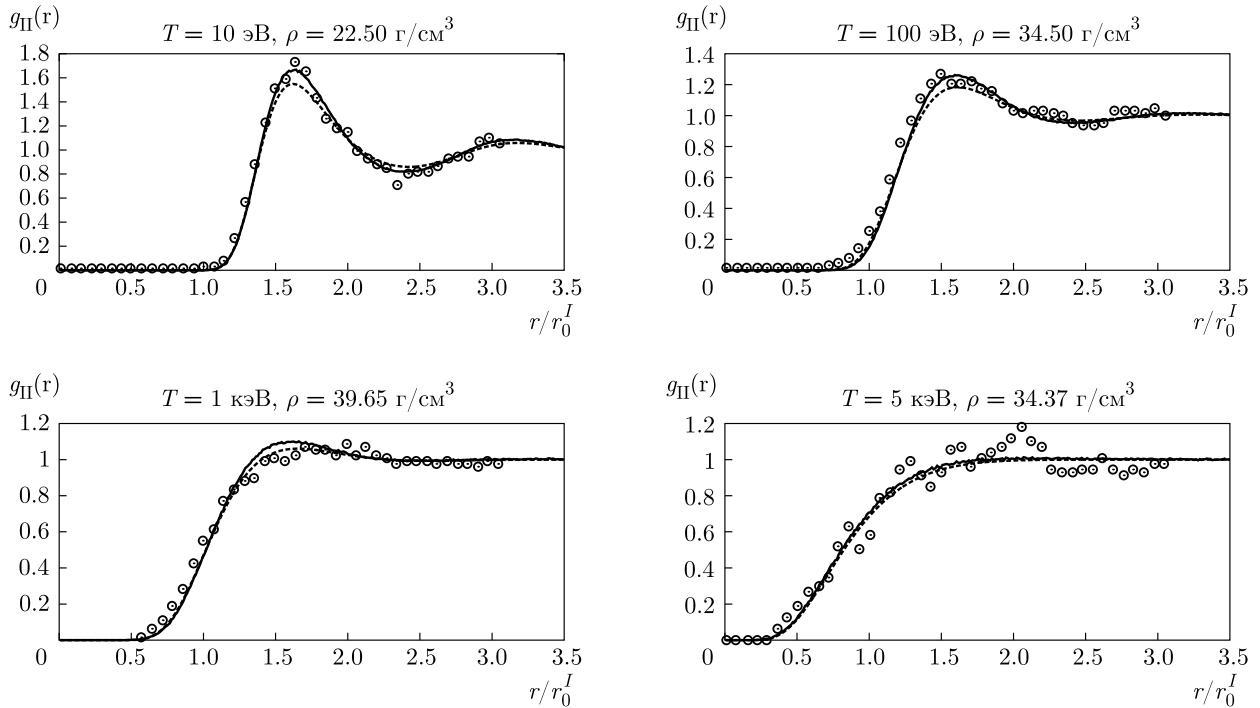


Рис. 2. Ион-ионные РФР для состояний на ударной адиабате сплошного железа, полученные методами ПАМД (сплошные кривые), TFMD (точки) [9], а также по квазиклассическому варианту [14, 15] исходной модели Старретта и Саумона [22–24] (штриховые кривые)

РФР хорошо согласуются между собой. Следовательно, можно считать, что потенциальная энергия $V(r)$ (4) верно передает характер взаимодействия между ионами, а используемые в методике ПАМД алгоритмы расчета траекторий движения частиц и поддержания температуры системы не вносят дополнительных искажений в расчетную микроструктуру вещества.

3.2. Матричные аппроксимации для коэффициентов вязкости и самодиффузии ионов

Для проведения гидродинамического моделирования вместо таблиц расчетных данных по коэффициентам динамической вязкости и самодиффузии ионов оказывается удобным использовать аналитические аппроксимации этих данных в зависимости от логарифмов плотности и температуры вещества [52]⁴:

$$\eta_{fit}(\rho, T) = \exp \left[\sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 b_{kl}^{(\eta)} \ln^{3-k} \rho \ln^{3-l} T \right], \quad (17)$$

$$D_{fit}(\rho, T) = \exp \left[\sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 b_{kl}^{(D)} \ln^{3-k} \rho \ln^{3-l} T \right], \quad (18)$$

где $[\eta_{fit}] = \text{мПа} \cdot \text{с}$, $[D_{fit}] = \text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$, $[\rho] = \text{г/см}^3$, $[T] = \text{кэВ}$. Матрицы коэффициентов аппроксимации $\widehat{b}^{(\eta)}$ и $\widehat{b}^{(D)}$ для указанных веществ, построенные на основании широкодиапазонных расчетов по методике ПАМД, приведены соответственно в (19)–(24) и (25)–(30):

$$\widehat{b}_{Al}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} -0.2047 & -0.7515 & -0.6338 \\ 0.1612 & 0.5425 & 6.358 \\ 1.015 & 10.24 & 28.75 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (19)$$

$$\widehat{b}_{Fe}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} 0.6120 & 1.604 & 1.060 \\ -3.474 & -9.470 & 0.1817 \\ 5.320 & 20.25 & 29.22 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (20)$$

$$\widehat{b}_{Cu}^{(\eta)} = \begin{pmatrix} 0.1910 & 0.1748 & 0.1990 \\ -1.190 & -1.989 & 4.510 \\ 2.180 & 10.50 & 23.66 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (21)$$

⁴ Логарифмическая зависимость от аргументов позволяет применять (17) и (18) в задачах с сильной пространственной и/или временной неоднородностью полей ρ и T .

Таблица 1. Границы области определения аппроксимаций для коэффициентов динамической вязкости η_{fit} (17) и ионной самодиффузии D_{fit} (18). Наибольшие относительные погрешности аппроксимации

Элемент	$\rho, \text{г/см}^3$	$T, \text{эВ}$	$\delta_{appr}^{max}(\eta), \%$	$\delta_{appr}^{max}(D), \%$
Al	$2.70 \leq \rho \leq 13.5$	$50 \leq T < 360$	14	5
Fe	$7.87 \leq \rho \leq 39.4$	$50 \leq T < 970$	14	6
Cu	$8.92 \leq \rho \leq 44.6$	$50 \leq T < 970$	9	10
Ag	$10.5 \leq \rho \leq 52.5$	$\eta : 50 \leq T < 1340$ $D : 50 \leq T < 970$	12	5
Au	$19.3 \leq \rho \leq 97.5$	$\eta : 50 \leq T < 2590$ $D : 50 \leq T < 970$	14	8
U	$18.9 \leq \rho \leq 94.7$	$50 \leq T < 970$	12	8

$$\widehat{b_{Ag}^{(\eta)}} = \begin{pmatrix} 0.3407 & 0.6919 & 0.6435 \\ -1.791 & -4.382 & 2.640 \\ 2.302 & 11.52 & 23.34 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (22)$$

$$\widehat{b_U^{(D)}} = \begin{pmatrix} -0.4950 & -0.5882 & -0.2008 \\ 3.081 & 4.237 & -3.513 \\ -4.826 & -3.098 & -31.92 \end{pmatrix} \times 10^{-1}. \quad (30)$$

$$\widehat{b_{Au}^{(\eta)}} = \begin{pmatrix} 1.804 & 0.6385 & 2.553 \\ -8.654 & -6.012 & 54.93 \\ 6.669 & 54.14 & 186.1 \end{pmatrix} \times 10^{-2}, \quad (23)$$

$$\widehat{b_U^{(\eta)}} = \begin{pmatrix} -0.1744 & -6.956 & -1.251 \\ 7.818 & 58.49 & 92.56 \\ -22.94 & -62.89 & 110.4 \end{pmatrix} \times 10^{-2}; \quad (24)$$

$$\widehat{b_{Al}^{(D)}} = \begin{pmatrix} -0.2917 & -0.7644 & -0.7044 \\ 0.4232 & 0.4672 & -3.921 \\ 0.6040 & 9.756 & -13.01 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (25)$$

$$\widehat{b_{Fe}^{(D)}} = \begin{pmatrix} -0.1141 & -8.543 & -0.2593 \cdot 10^{-2} \\ 0.2620 & 0.2513 & -4.292 \\ 0.2338 & 6.575 & -20.90 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (26)$$

$$\widehat{b_{Cu}^{(D)}} = \begin{pmatrix} 0.1500 & 0.7704 & 0.2325 \\ -1.328 & -4.930 & -5.928 \\ 2.585 & 14.10 & -19.08 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (27)$$

$$\widehat{b_{Ag}^{(D)}} = \begin{pmatrix} -0.3598 & -0.7198 & -0.3735 \\ 1.686 & 3.985 & -2.236 \\ -1.733 & 0.4782 & -28.61 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (28)$$

$$\widehat{b_{Au}^{(D)}} = \begin{pmatrix} -0.2685 & -0.1299 & -0.4043 \\ 1.339 & 0.7899 & -1.732 \\ -1.538 & 3.720 & -34.18 \end{pmatrix} \times 10^{-1}, \quad (29)$$

Результаты ПАМД-моделирования приближены методом наименьших квадратов с достаточно высокой точностью, которая гарантируется внутри области определения выражений (17) и (18) (см. табл. 1). Так, относительная погрешность аппроксимации коэффициентов динамической вязкости ($\delta_{appr}^{max}(\eta)$) и ионной самодиффузии ($\delta_{appr}^{max}(D)$) для большинства рассчитанных точек сравнима по величине с относительной неопределенностью ПАМД-моделирования, принятой равной одному среднеквадратичному отклонению⁵⁾.

Область определения выражений для η_{fit} и D_{fit} с матрицами коэффициентов (19)–(30) достаточно широка: от нормальной плотности вещества до пятикратно сжатого состояния и от 50 эВ до температур 360–2600 эВ, при которых степень ионизации плазмы составляет $Z_*/Z = 0.9–0.95$.

Отметим также, что использование аппроксимаций (17) и (18) позволяет сгладить нерегулярные возмущения на зависимостях переносных коэффициентов от температуры и плотности, неизбежно возникающие при проведении статистического моделирования (см., например, рис. 4).

⁵⁾ В наших расчетах по методике ПАМД наибольшая статистическая погрешность коэффициентов ионной самодиффузии относительно их средних значений не превышает 10%, а для коэффициента вязкости — 15%, что сравнимо с точностью расчетных результатов, полученных по методике КМД с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (OFMD) [36, 37].

Таблица 2. Сравнение результатов расчетов коэффициента ионной самодиффузии D для плазмы Al, Fe, Cu и Ag по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (18) с данными моделирования методами OFMD и TFMD. В круглых скобках приведено относительное отличие результатов данной работы от значений, полученных методами OFMD и TFMD. $D_{ПАМД} = (D_r + D_v)/2$. Характерные статистические погрешности расчетов по методикам ПАМД и OFMD/TFMD не превышают 5–10 %

Элемент	$\rho, \text{г/см}^3$	$T, \text{эВ}$	Коэффициент диффузии $D \cdot 10^3, \text{см}^2/\text{с}$		
			OFMD/TFMD	ПАМД	Формула (18)
Al	13.4	100	15 [38]	13.9 (–7 %)	14.0 (–7 %)
Fe	34.5	100	7 [35]	$D_v : 5.50 \pm 0.06$ (–21 %) $D_r : 5.52 \pm 0.06$ (–21 %)	5.4 (–23 %)
Cu	21.6	100	7.9 [38]	7.0 (–11 %)	6.8 (–14 %)
Ag	20.0	50	4.0 [37]	3.7 (–8 %)	3.8 (–5 %)
	20.0	100	6.0 [37]	5.7 (–6 %)	5.6 (–7 %)
	30.9	100	5.1 [38]	4.5 (–12 %)	4.2 (–18 %)
	20.0	200	9.0 [37]	8.4 (–7 %)	8.2 (–9 %)
	20.0	400	12.0 [37]	12.0 (0 %)	12.2 (+2 %)
	20.0	600	16.0 [37]	15.4 (–4 %)	15.5 (–3 %)

3.3. Результаты расчетов ионных переносных коэффициентов для плазмы Al, Fe, Cu и Ag

В табл. 2 приведены результаты расчетов коэффициента ионной самодиффузии в плазме Al, Fe, Cu и Ag, выполненных методами КМД с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (OFMD и TFMD) [35, 37, 38] и ПАМД, а также по формуле (18) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (25)–(28). Рассматриваются случаи, когда температура вещества не превышает $T = 600$ эВ, а сжатие плазмы относительно нормальной плотности ρ_0 составляет $\rho/\rho_0 = 2$ –5. Таким образом, в табл. 2 представлены состояния, отвечающие случаю плотной сильнонеидеальной плазмы. Действительно, средняя степень ионизации вещества Z_*/Z достигает 0.2–0.6, а отношение характерной энергии кулоновского взаимодействия между ионами к температуре вещества, т. е. ионный параметр неидеальности $\Gamma_{II} = \beta Z_*^2 / r_0^I$, где Z_* определяется согласно (5), принимает значения $\Gamma_{II} \sim 10$.

Из табл. 2 следует, что коэффициенты ионной самодиффузии, определенные непосредственно в ходе ПАМД-моделирования и рассчитанные по аппроксимирующей зависимости (18), достаточно хорошо согласуются как между собой, так и с данными из работ [35, 37, 38]. Из результатов моделирования, проведенного по методикам ПАМД и OFMD для

серебра, также видно, что относительное различие результатов для коэффициента D уменьшается при повышении температуры плазмы и/или при снижении ее плотности, т. е. при уменьшении параметра кулоновской неидеальности Γ_{II} . При этом результаты расчетов по формуле (18), основанной на данных ПАМД-моделирования, также приближаются к данным OFMD.

В большинстве случаев, рассмотренных в табл. 2, относительные отличия $D_{ПАМД}$ от D_{OFMD}/D_{TFMD} не превышает 10–12 %, а D_{fit} (18) — 20 %. Исключение составляет случай плазмы железа при $\rho = 34.5$ г/см³ и $T = 100$ эВ (см. табл. 2): величина коэффициента ионной самодиффузии в результате ПАМД-моделирования оказывается меньше значения, которое дает метод TFMD [35], примерно на 20 %, а аппроксимация (18) — на 23 %. Однако поскольку в данном случае хорошо согласуются характеристики ионной микроструктуры вещества ($g_{II}(r)$), полученные по ПАМД и TFMD [9] (см. рис. 2)⁶, а также имеется взаимное согласие между D_r и D_v , то несколько большее различие значений $D_{ПАМД}$ и D_{TFMD} по-видимому связано с методическими особенностями вычисления АКФ скорости в работе [35] в сравнении с расчетами методом ПАМД и другими

⁶ Расчеты $g_{II}(r)$ [9] проводились теми же авторами и по той же модели, что и в работе [35].

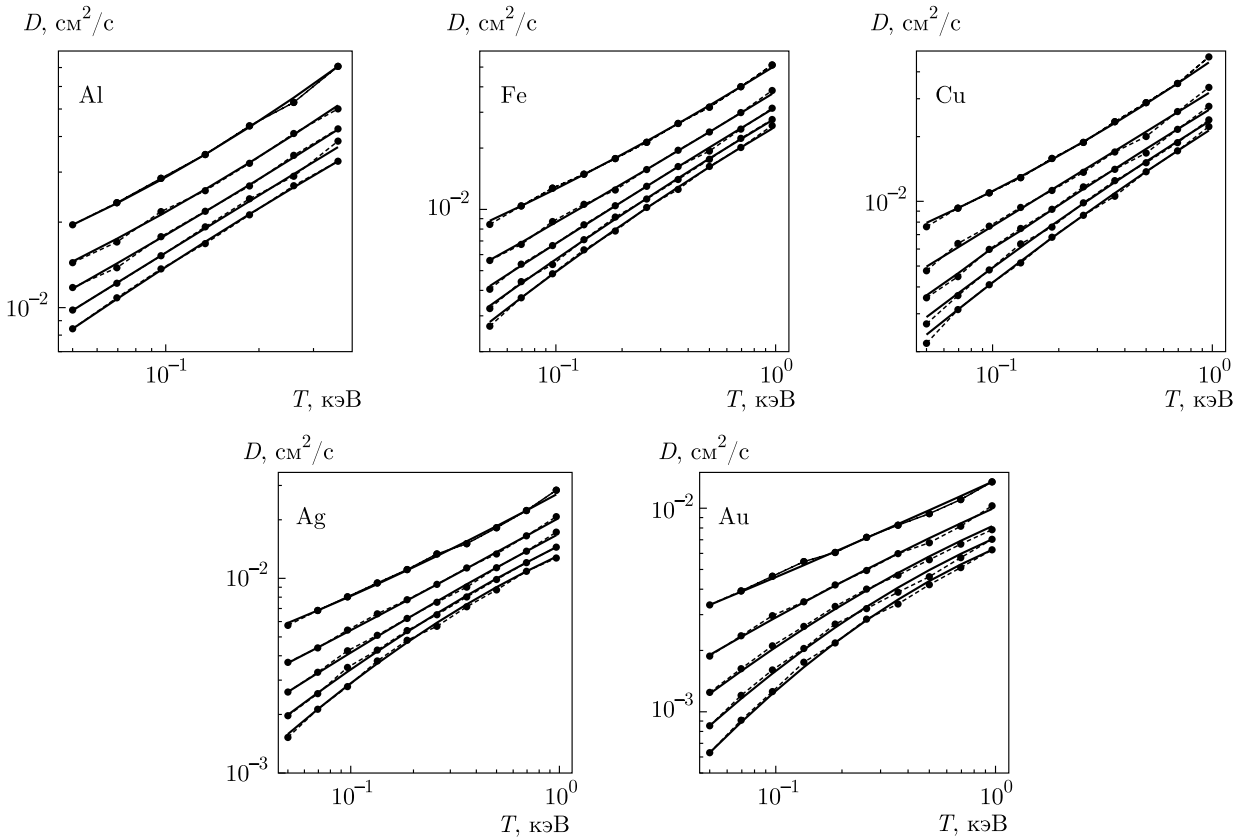


Рис. 3. Изохоры коэффициента ионной самодиффузии ($\rho/\rho_0 = 1, \dots, 5$; сверху вниз) в плотной плазме Al ($\rho_0 = 2.7 \text{ г/см}^3$), Fe ($\rho_0 = 7.87 \text{ г/см}^3$), Cu ($\rho_0 = 8.92 \text{ г/см}^3$), Ag ($\rho_0 = 10.5 \text{ г/см}^3$) и Au ($\rho_0 = 19.3 \text{ г/см}^3$). Точки — результаты ПАМД-моделирования (343 атома, $D_{PAMD} = (D_r + D_v)/2$). Сплошные линии — расчет по формуле (18) с коэффициентами аппроксимации из (25)–(29)

расчетами методом OFMD/TFMD, представленными в табл. 2.

Отметим также, что в работе [35] не указана статистическая неопределенность результата вычисления D_{TFMD} , тогда как при учете такой неопределенности интервалы значений D_{PAMD} и D_{OFMD} из табл. 2 существенно перекрываются.

Результаты расчетов коэффициента ионной самодиффузии в плазме Al, Fe, Cu, Ag и Au по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (18) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (25)–(29) представлены на рис. 3. Рассмотрен достаточно широкий диапазон температур и плотностей, отвечающий области определения выражений вида (18), указанной в табл. 1. В большинстве случаев аппроксимирующие кривые проходят внутри диапазона статистической неопределенности результата ПАМД-расчетов, составляющего примерно 10 %, что указывает на возможность практического использования аппроксимации (18) вме-

сто прямого моделирования. Как следует из рис. 3, интенсивность самодиффузии существенно возрастает при ослаблении межйонного взаимодействия при увеличении температуры вещества и/или снижении его степени сжатия. При этом коэффициент самодиффузии может быть аппроксимирован степенными зависимостями:

$$\begin{aligned}
 D_{\text{Al,Fe,Cu,Ag}} &\propto T^{0.7}, \\
 D_{\text{Al,Fe,Cu,Ag}} &\propto (\rho/\rho_0)^{-(0.4-0.7)}.
 \end{aligned}
 \tag{31}$$

При этом каких-либо нерегулярностей в поведении коэффициента D в рассмотренных случаях не наблюдается.

В табл. 3 представлены результаты сравнительных расчетов коэффициента динамической вязкости плазмы Al, Fe, Cu и Ag методами ПАМД (343 атома), OFMD/TFMD [38, 40] и по формуле (17) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (19)–(22). Относительные различия коэффициентов

Таблица 3. Сравнение результатов расчетов коэффициента динамической вязкости η для плазмы Al, Fe, Cu и Ag по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (17) с данными расчетов по методу OFMD. В круглых скобках приведено относительное отличие результатов данной работы от значений, полученных методом OFMD. Характерная статистическая погрешность расчетов по методике ПАМД не превышает 15 %, по методике OFMD/TFMD — 10–15 %

Элемент	$\rho, \text{г/см}^3$	$T, \text{эВ}$	Коэффициент вязкости $\eta, \text{мПа} \cdot \text{с}$		
			OFMD	ПАМД	Формула (17)
Al	13.4	100	13 [38]	13.8 ± 1.5 (+6 %)	13.6 (+5 %)
Fe	34.5	100	23 [40]	21.6 ± 3.4 (-6 %)	22.4 (-3 %)
	39.65	1000	90 [40]	80.6 ± 9.3 (-10 %)	83.5 (-7 %)
Cu	21.6	100	16 [38]	16.4 ± 1.3 (+3 %)	15.2 (-5 %)
Ag	30.9	100	19 [38]	20.9 ± 2.3 (+10 %)	20.5 (+8 %)

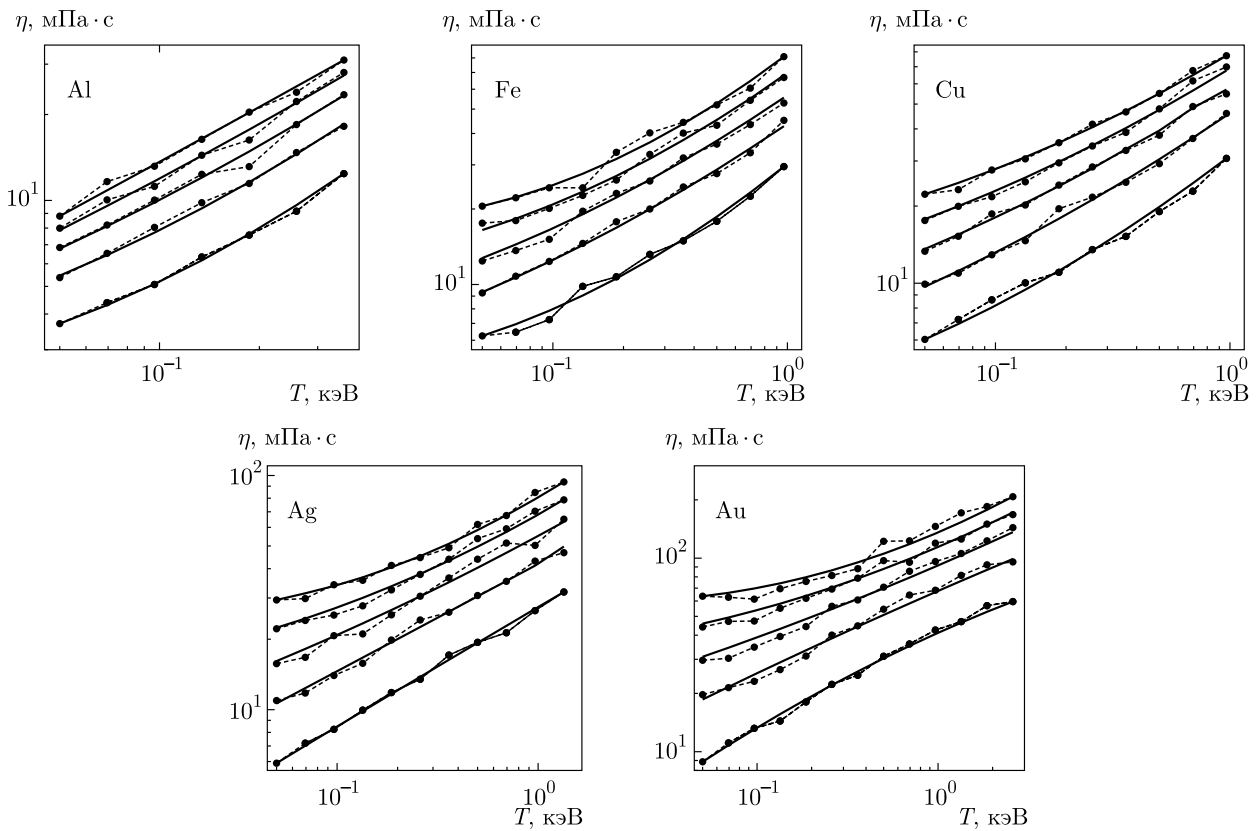


Рис. 4. Изохоры коэффициента динамической вязкости ($\rho/\rho_0 = 1, \dots, 5$; снизу вверх) в плотной плазме Al ($\rho_0 = 2.7 \text{ г/см}^3$), Fe ($\rho_0 = 7.87 \text{ г/см}^3$), Cu ($\rho_0 = 8.92 \text{ г/см}^3$), Ag ($\rho_0 = 10.5 \text{ г/см}^3$) и Au ($\rho_0 = 19.3 \text{ г/см}^3$). Точки — результаты ПАМД-моделирования (343 атома). Сплошные линии — расчет по формуле (17) с коэффициентами аппроксимации из (19)–(23)

вязкости, определенных разными способами, для всех рассмотренных случаев не превышают 10–13 %.

На рис. 4 приведены результаты расчетов коэффициента динамической вязкости в плазме Al,

Fe, Cu, Ag и Au по методике ПАМД (343 атома) и по формуле (17) с матрицами коэффициентов аппроксимации из (19)–(23). Диапазоны температур и плотностей соответствуют области опре-

деления выражений вида (17) из табл. 1. Использование аппроксимирующих выражений позволило сгладить ход некоторых кривых, особенно при больших сжатиях вещества. Аппроксимирующие кривые для большинства точек проходят внутри диапазона статистической неопределенности результата ПАМД-расчетов вязкости (около 15%), что, как и в случае коэффициента ионной самодиффузии, указывает на возможность практического использования аппроксимации (17) вместо прямого моделирования. Из рис. 4 следует, что коэффициент динамической вязкости слабо чувствителен к росту температуры плазмы, причем зависимость ослабевает с ростом атомного номера вещества:

$$\eta_{Al} \propto T^{0.6}, \quad \eta_{Fe} \propto T^{0.5}, \quad \eta_{Ag} \propto T^{0.4}. \quad (32)$$

В то же время зависимость коэффициента вязкости от степени сжатия плазмы ρ/ρ_0 усиливается при переходе к более тяжелым элементам:

$$\begin{aligned} \eta_{Al} &\propto (\rho/\rho_0)^{0.65}, & \eta_{Fe} &\propto (\rho/\rho_0)^{0.7}, \\ \eta_{Ag} &\propto (\rho/\rho_0)^{0.8}. \end{aligned} \quad (33)$$

3.4. Результаты расчетов ионных переносных коэффициентов для плазмы урана

В работе [36] представлено детальное расчетно-теоретическое исследование переносных свойств ионной подсистемы плазмы урана — наиболее тяжелого элемента, встречающегося в естественных условиях и имеющего важное прикладное значение. Это исследование проведено на основе данных по коэффициентам динамической вязкости и ионной самодиффузии, полученных в широком интервале плотностей и температур плазмы урана с помощью OFMD-моделирования системы из 54 атомов. Неопределенность результатов моделирования оценивалась на уровне 20% для динамической вязкости и 10% для коэффициента ионной самодиффузии. Такая неопределенность была обусловлена как влиянием статистического усреднения, так и применяемой в работе [36] процедурой аппроксимации интегралов по времени от АКФ скорости и тензора вязких напряжений с последующей экстраполяцией таких аппроксимаций в область больших значений временного аргумента (см., например, [54]). Поскольку в настоящей работе временная эволюция системы описывалась более подробно, чем при OFMD-моделировании [36]⁷⁾,

⁷⁾ Шаг расчета по времени составлял 0.15 фс, тогда как в работе [36] — 2.5–5 фс.

а общая экономичность метода ПАМД и реализованной методики расчета позволяли проводить моделирование эволюции системы с необходимой длительностью, подобные процедуры упрощенного вычисления временных интегралов не применялись. Это обстоятельство, очевидно, является одной из причин, обуславливающих появление систематических различий результатов проведенного ПАМД-моделирования и данных работы [36].

Сравнение результатов моделирования коэффициента динамической вязкости по методикам ПАМД и OFMD [36], а также расчетов по формуле (17) дано на рис. 5, где также представлены результаты расчетов коэффициента вязкости по аппроксимационным формулам, построенным на основе расчетных данных по различным приближенным моделям для однокомпонентной плазмы ионов [55–57]. При этом использование аппроксимаций [55–57] предполагает предварительное вычисление величины среднего заряда иона в плазме, которая может быть определена различными способами⁸⁾. В нашей работе средний заряд иона рассчитывался по квантово-статистической модели среднего атома RESEOS [15, 58–60] в рамках модели Либермана [3, 61] как число электронов непрерывного спектра, приходящееся на одно ядро, плотность состояний которых описывалась асимптотическим квазиклассическим выражением пропорциональным $\sqrt{\epsilon}$ (ϵ — энергия электрона). Такой способ определения среднего заряда иона позволил наилучшим образом описать результаты OFMD-моделирования вязкости урана [36] в приближениях [55, 56]. Приближение [57] приводит к существенно завышенным значениям вязкости плазмы урана во всем рассматриваемом диапазоне.

При относительном сжатии $\rho/\rho_0 = 1–4$ значения динамической вязкости плазмы урана, полученные по аппроксимационным формулам (17) и [55, 56], хорошо согласуются между собой (см. рис. 5), причем эти аппроксимации приводят к результатам, которые в целом лучше согласуются именно с данными ПАМД-моделирования, чем с OFMD [36]. Для плазмы урана наиболее явно это проявляется при $\rho/\rho_0 = 3–4$. При умеренном сжатии вещества (вплоть до $\rho/\rho_0 = 2–3$) аппроксимация (17) согласуется с результатами OFMD-моделирования [36] несколько лучше, чем аппроксимации [55, 56], хотя

⁸⁾ Отметим, что применение формул (17) и (18) не предполагает дополнительного расчета степени ионизации плазмы, как при использовании аппроксимаций [55, 56].

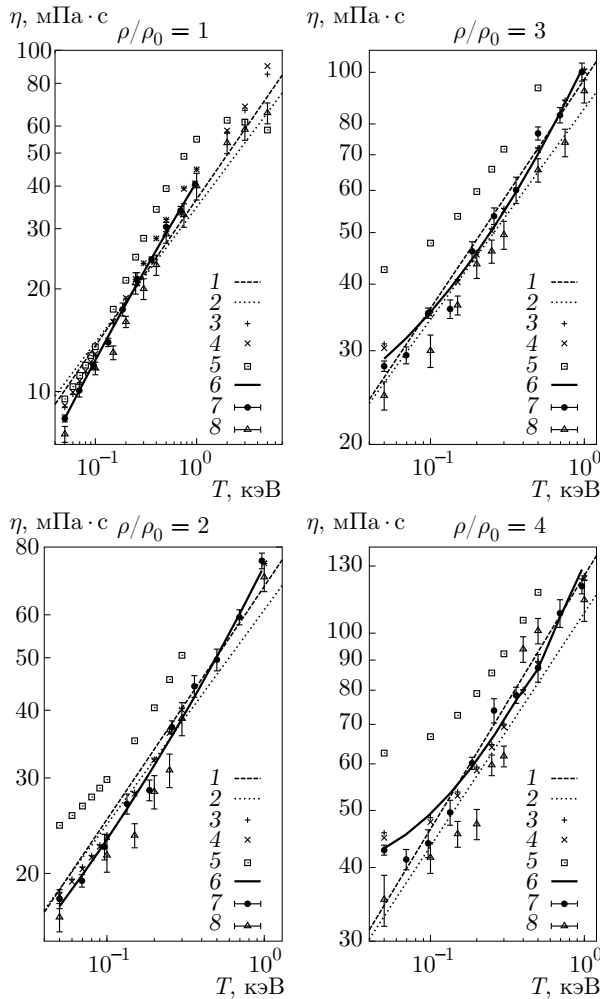


Рис. 5. Изохоры коэффициента динамической вязкости для плазмы урана ($\rho_0 = 18.93 \text{ г/см}^3$): 1, 2 — расчеты по (34), основанные на данных моделирования соответственно методами ПАМД и OFMD [36]; 3–5 — расчеты с использованием аппроксимаций, построенных на основе приближенных моделей для однокомпонентной плазмы ионов [55–57], со средним зарядом иона, полученным по модели среднего атома RESEOS [15, 58], 6 — расчеты по формуле (17) с коэффициентами аппроксимации из (24), 7 — результаты ПАМД-моделирования (343 атома; формула (14)), 8 — результаты OFMD-моделирования (54 атома) [36]

взаимные различия между рассматриваемыми аппроксимациями (17) и [55, 56] невелики (6–7 %).

Коэффициент динамической вязкости плазмы урана может быть также аппроксимирован степенной зависимостью [36], удобной для получения быстрых оценок:

$$\eta_{fit}^{(1)}(\rho, T) = a_\eta T^{b_\eta} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{c_\eta}, \quad (34)$$

$[\rho] = \text{г/см}^3, \quad [T] = \text{эВ}.$

Результаты наших расчетов дают:

$$a_\eta = 1.9, \quad b_\eta = 0.43, \quad c_\eta = 0.89.$$

На рис. 5 приведено сравнение результатов расчетов по формуле (34) с нашими коэффициентами и с коэффициентами, найденными в работе [36] (соответственно кривые 1 и 2). Зависимость (34) с нашими коэффициентами демонстрирует более высокую скорость роста при любых рассмотренных значениях плотности, чем аналогичная кривая, основанная на данных OFMD. При относительном сжатии $\rho/\rho_0 = 2-4$ и температуре $T \geq 200 \text{ эВ}$ результаты расчетов по формулам (17), (34) и по моделям [55, 56] хорошо согласуются как между собой, так и с данными OFMD- и ПАМД-моделирования. В указанных условиях аппроксимационная кривая 2 из [36] дает заниженные значения коэффициента вязкости (на уровне примерно 10 % по сравнению с ПАМД).

Из рис. 6 следует, что коэффициент самодиффузии $D_{fit}(\rho, T)$ (18) при нормальной плотности плазмы урана на 7–20 % превышает значения, полученные в ходе OFMD-моделирования [36], в то время как при более высоких плотностях различия обычно не превышают 15 %. Различия между результатами моделирования коэффициентов самодиффузии по ПАМД и по OFMD обусловлены методическими особенностями и полностью укладываются в диапазон статистической погрешности. При этом простейшая аналитическая аппроксимация для коэффициента самодиффузии может быть построена аналогично (34):

$$D_{fit}^{(1)}(\rho, T) = a_D T^{b_D} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{c_D}, \quad (35)$$

$[\rho] = \text{г/см}^3, \quad [T] = \text{эВ}.$

По результатам ПАМД-моделирования были подобраны коэффициенты аппроксимации:

$$a_D = 2.8 \cdot 10^{-4}, \quad b_D = 0.57, \quad c_D = -0.59.$$

Формула (35) при $\rho/\rho_0 = 2-4$ позволяет получить оценку для коэффициента самодиффузии, которая хорошо согласуется (различия менее 15 %) как с аналогичным приближением из работы [36], так и результатами расчетов по формуле (18). Отметим, что расчеты по формулам (18) и (35) при $\rho/\rho_0 = 2-3$ описывают результаты TFMD-моделирования коэффициента диффузии в плотной плазме урана точнее, чем расчеты с использованием аппроксимаций [62, 63], так же как и [55–57], построенных на основе расчетных данных по приближенным моделям для однокомпонентной плазмы ионов.

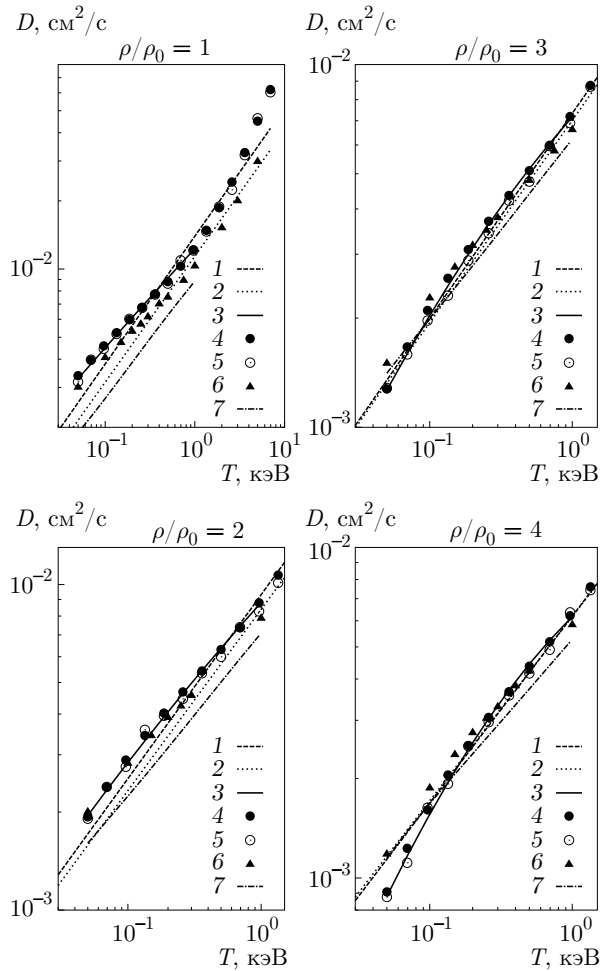


Рис. 6. Изохоры коэффициента ионной самодиффузии для плазмы урана ($\rho_0 = 18.93 \text{ г/см}^3$): 1, 2 — расчеты по (35), основанные соответственно на данных ПАМД и работы [36], 3 — расчеты по формуле (18) с коэффициентами аппроксимации из (30), 4, 5 — результаты ПАМД-моделирования (343 атома; формулы (12) и (13) соответственно), 6 — результаты OFMD-моделирования (54 атома) [36], 7 — расчеты с использованием аппроксимации [62, 63], построенной на основе модели для однокомпонентной плазмы ионов со средним зарядом иона, полученным по модели среднего атома RESEOS [15, 58]

4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе рассмотрен квазиклассический вариант [14, 15] метода псевдоатомной молекулярной динамики (ПАМД) [16–18], представляющий собой комбинацию метода классической молекулярной динамики для ионов и теоретической модели Старретта и Саумона [22–24], позволяющей описывать ионные корреляции и рассчитывать эффективные парные потенциалы взаимодействия

ионов. Данный вариант хорошо подходит для описания ионной микроструктуры вещества и расчета ионных переносных коэффициентов в неидеальной плазме теплового и умеренно нагретого плотного вещества, требуя при этом существенно меньших вычислительных затрат по сравнению с вариантом метода ПАМД, использующим полностью квантовомеханическую версию теоретической модели Старретта и Саумона, и тем более с расчетами методом квантовой молекулярной динамики с квазиклассическим описанием электронной подсистемы (OFMD и TFMD) при сопоставимой точности расчетов. Так, результаты ПАМД-моделирования, проведенного для состояний на ударной адиабате сплошного железа, показали, что полученные характеристики ионной микроструктуры вещества — ион-ионные парные корреляционные функции — хорошо согласуются с данными TFMD.

Ионные переносные коэффициенты динамической вязкости и ионной самодиффузии рассчитывались по формулам Кубо–Грина через временные интегралы от автокорреляционных функций скорости и фурье-образа тензора вязких напряжений, а также в приближении Эйнштейна–Смолуховского (для ионной самодиффузии) [49]. Проведено сравнение результатов расчетов ионных переносных коэффициентов для плазмы Al, Fe, Cu и Ag с данными OFMD/TFMD-моделирования, которое показало, что отличие результатов ПАМД от данных OFMD/TFMD не превышает 10–12 %, заметно уменьшаясь при увеличении температуры плазмы и/или при снижении ее плотности, т.е. при уменьшении параметра кулоновской неидеальности Γ_{II} . Исключение составляет расчет коэффициента ионной самодиффузии в плазме железа с $\rho/\rho_0 \approx 4.4$ и $T = 100 \text{ эВ}$, где величина, полученная методом ПАМД, оказывается примерно на 20 % меньше, чем в результате TFMD-моделирования [35], что, по-видимому, связано с методическими особенностями вычисления АКФ скорости в работе [35].

Проведены расчеты коэффициентов динамической вязкости и ионной самодиффузии в широком диапазоне температур и плотностей, оценен характер изменения переносных коэффициентов в зависимости от плотности и температуры вещества и построены аналитические аппроксимации (17) и (18) данных широкодиапазонных ПАМД-расчетов для плазмы Al, Fe, Cu, Ag, Au и U. Наибольшая статистическая погрешность результатов ПАМД-моделирования не превышает 10 % для коэффициентов ионной самодиффузии и 15 % для коэффициента

вязкости⁹⁾. При использовании формулы (17) для оценки коэффициента динамической вязкости наибольшее относительное отличие результатов от данных моделирования методом OFMD не превышает 10%. Применение аппроксимационной формулы (18) для коэффициента ионной самодиффузии приводит к результатам, отличающимся от результатов OFMD не более чем на 25%. Таким образом, неопределенность, обусловленная применением аппроксимационных формул (17) и (18) с матрицами коэффициентов (19)–(30) для расчета ионных переносных коэффициентов, сравнима по величине со статистической погрешностью моделирования как методом ПАМД, так и методом OFMD.

Отметим, что сравнение коэффициентов динамической вязкости для умеренно сжатой плазмы урана (вплоть до $\rho/\rho_0 = 2-3$), полученных по аппроксимационной формуле (17), показало несколько лучшее согласие с результатами OFMD-моделирования [36], чем при использовании известных аппроксимаций для однокомпонентной плазмы ионов [55, 56]. Кроме того, аппроксимации (18) и (35) для коэффициента ионной самодиффузии с коэффициентами, найденными по результатам ПАМД-расчетов, более точно описывают результаты OFMD-моделирования плазмы урана при $\rho/\rho_0 = 2-3$, чем приближение [62, 63].

Таким образом, построенные аппроксимации (17) и (18) с матрицами аппроксимационных коэффициентов (19)–(30) могут быть использованы для моделирования динамики плотного ионизованного вещества при описании экспериментов по физике высоких плотностей энергии и решении ряда планетологических задач.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Marx and J. Hutter, *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*, Cambridge University Press, Cambridge (2009).
2. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, Б. В. Уваров, *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния*, Физматлит, Москва (2000).
3. D. A. Liberman, *Phys. Rev. B* **20**, №12, 4981 (1979).
4. T. T. Blenski and B. Cichocki, *Phys. Rev. E* **75**, 056402 (2007).
5. T. Blenski, R. Piron, C. Caizergues et al., *High Energy Density Phys.* **9**, 687 (2013).
6. D. C. Swift, T. Lockard, R. G. Kraus et al., *Phys. Rev. E* **99**, 063210 (2019).
7. В. П. Силин, *Введение в кинетическую теорию газов*, Изд-во Физического института им. П. Н. Лебедева РАН, Москва (1998).
8. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Физматлит, Москва (2002).
9. F. Lambert, J. Cl erouin, and G. Z erah, *Phys. Rev. E* **73**, 016403 (2006).
10. J.-F. Danel, L. Kazandjian., and G. Zerah, *Phys. Rev. E* **79**, 066408 (2009).
11. J.-F. Danel and L. Kazandjian, *Phys. Rev. E* **91**, 013103 (2015).
12. J.-F. Danel, L. Kazandjian, and R. Piron, *Phys. Rev. E* **93**, 043210 (2016).
13. D. Sheppard, J. D. Kress, S. Crockett et al., *Phys. Rev. E* **90**, 063314 (2014).
14. A. L. Falkov, A. A. Ovechkin, and P. A. Loboda, in *Book of Abstracts of Annual Moscow Workshop on the Non-Ideal Plasma Physics*, NPP, Moscow (2015), ed. by V. E. Fortov, I. L. Iosilevskiy, and P. R. Levashov, Russian Academy of Sciences, Moscow (2015), p. 10.
15. A. A. Ovechkin, P. A. Loboda, and A. L. Falkov, *High Energy Density Phys.* **20**, 38 (2016).
16. C. E. Starrett, J. Daligault, and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **91**, 013104 (2015).
17. C. E. Starrett and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **93**, 063206 (2016).
18. A. A. Ovechkin, A. L. Falkov, P. A. Sapozhnikov et al., in *Book of Abstracts of XXXIII International Conference on Equation of State for Matter (Elbrus, 2018)*, ed. by V. E. Fortov, B. S. Karamurzov, V. P. Efremov et al., Russian Academy of Sciences, Moscow (2018), p. 57.
19. M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1987).
20. D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, London (2002).
21. Д. С. Рапапорт, *Искусство молекулярной динамики*, Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2012).

⁹⁾ Аналогичная величина статистической погрешности характерна и для расчетов переносных коэффициентов, выполненных другими методами (см., например, [33, 36, 37]).

22. C. E. Starrett and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **85**, 026403 (2012).
23. C. E. Starrett and D. Saumon, *Phys. Rev. E* **87**, 013104 (2013).
24. C. E. Starrett and D. Saumon, *High Energy Density Phys.* **10**, 35 (2014).
25. A. N. Souza, D. J. Perkins, C. E. Starrett et al., *Phys. Rev. E* **89**, 023108 (2014).
26. L. B. Fletcher, H. J. Lee, T. Döppner et al., *Nature Photonics* **9**, 247 (2015).
27. H. M. Van Horn, *Science* **252**, 3848 (1991).
28. R. A. Secco, in *Mineral Physics and Crystallography*, ed. by T. J. Ahrens, American Geophysical Union, Washington (1995), p. 218.
29. G. A. de Wijs, G. Kresse, L. Vočadlo et al., *Nature* **392**, 805 (1998).
30. D. Alfé, G. Kresse, and M. J. Gillan, *Phys. Rev. B* **61**, №1, 132 (2000).
31. M. D. Ruter, R. A. Secco, H. Liu et al., *Phys. Rev. B* **66**, №6, 060102 (2002).
32. В. Н. Жарков, *УФН* **179**, 106 (2009).
33. M. Pozzo, C. Davies, D. Gubbins et al., *Phys. Rev. B* **87**, 014110 (2013).
34. К. Д. Литасов, А. Ф. Шацкий, *Состав и строение ядра Земли*, издательство СО РАН, Новосибирск (2016).
35. F. Lambert, J. Clérouin, and S. Mazevet, *Europhys. Lett.* **75**, №5, 681 (2006).
36. J. D. Kress, J. S. Cohen, D. P. Kilcrease et al., *High Energy Density Phys.* **7**, 155 (2011).
37. C. Ticknor, J. D. Kress, and L. A. Collins, *Phys. Rev. E* **93**, 063208 (2016).
38. A. J. White, L. A. Collins, J. D. Kress et al., *Phys. Rev. E* **95**, 063202 (2017).
39. K. P. Driver, B. Militzer, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 155502 (2012).
40. G. Faussurier, C. Blancard, P. Cossé et al., *Phys. Plasm.* **17**, 052707 (2010).
41. G. Chabrier, *J. Phys. France* **51**, 1607 (1990).
42. S. Ichimaru and K. Utsumi, *Phys. Rev. B* **24**, 7385 (1981).
43. Н. П. Коваленко, И. З. Фишер, *УФН* **108**, 209 (1972).
44. R. Piron and T. Blenski, *Phys. Rev. E* **83**, 026403 (2011).
45. D. Ofer, E. Nardi, and Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. A* **38**, 5801 (1988).
46. M. Manninen, R. Nieminen, P. Hautajarvi et al., *Phys. Rev. B* **12**, 4012 (1975).
47. Н. С. Бахвалов, *Численные методы*, Наука, Москва (1973).
48. G. Pantis, *J. Comp. Phys.* **17**, 229 (1975).
49. J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, New York (2006).
50. D. Dubbeldam, D. C. Ford, D. E. Ellis et al., *Molecular Simulation* **35**, №№12–13, 1084 (2009).
51. J.-F. Danel, L. Kazandjian, and G. Zerah, *Phys. Rev. E* **85**, 066701 (2012).
52. В. Е. Фортов, *Мощные ударные волны на Земле и в космосе*, Физматлит, Москва (2019).
53. J. M. J. Van Leeuwen, J. Groeneveld, and J. de Boer, *Physica* **25**, 792 (1959).
54. E. R. Meyer, J. D. Kress, L. A. Collins et al., *Phys. Rev. E* **90**, 043101 (2014).
55. S. Bastea, *Phys. Rev. E* **71**, 056405 (2005).
56. J. Daligault, K. S. Rasmussen, and S. D. Baalrud, *Phys. Rev. E* **90**, 033105 (2014).
57. J. Wallenborn and M. Baus, *Phys. Rev. A* **18**, №4, 1737 (1978).
58. А. А. Овечкин, П. А. Лобода, В. Г. Новиков et al., *High Energy Density Phys.* **13**, 20 (2014).
59. А. А. Овечкин, П. А. Лобода, and А. Л. Фальков, *High Energy Density Phys.*, **30**, 29 (2019).
60. А. А. Овечкин, П. А. Лобода, А. Л. Фальков et al., *Phys. Rev. E* **103**, 053206 (2021).
61. B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne et al., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* **99**, 658 (2006).
62. J. Daligault, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 065003 (2006).
63. J. Daligault, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 029901 (2009).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам **ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ**) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

- а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;
- б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);
- в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате \LaTeX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, *ФТТ* **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., *Phys. Rev. A* **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
 9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.
7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
 9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

Главный редактор *А. И. СМЕРНОВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук *И. Г. ЗУБАРЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *Е. И. КАЦ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук *В. П. КРАЙНОВ*, акад. *М. В. САДОВСКИЙ*, канд. физ.-мат. наук *С. С. СОСИН*,
канд. физ.-мат. наук *Ю. С. БАРАШ*, член-корр. РАН *С. В. ТРОИЦКИЙ* (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН *И. А. ФОМИН* (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук *А. В. ФИЛИППОВ*,
д-р физ.-мат. наук *Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ*
(зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании),
д-р физ.-мат. наук *А. А. ЦЕЙТЛИН*, акад. *А. М. ЧЕРЕПАЩУК*

Редакционный совет:

акад. *А. Ф. АНДРЕЕВ* (председатель),
член-корр. РАН *В. В. ЛЕБЕДЕВ*, д-р физ.-мат. наук *В. С. ПОПОВ*

Зав. редакцией *Н. Г. Церевитинова*
Редакторы: *Л. Б. Кульчицкая*, *Т. Г. Орехова*, *Т. Н. Смирнова*